

Тема 1

Вычислительная математика:
термины и определения

В настоящее время в науке и инженерной практике широко используется метод математического моделирования.

Математическим моделированием называется изучение реального объекта на ЭВМ с помощью математической модели этого объекта.

Например:

- **Совершенствование ядерного оружия** путем расчетов на супер-ЭВМ. Удалось отказаться от испытаний ядерного вооружения.
- **Компьютерные тренажеры (симуляторы)**, созданные на основе математических моделей, появились сначала у военных, сейчас они широко применяются в производственном и учебном процессе.

Математическая модель – это приближенное математическое описание объекта (технологического процесса, реакции, явления и т.д.).

Примеры простейших моделей:

$$pV = \frac{mRT}{M}$$

уравнение состояния идеального газа (1.1)

$$G \frac{m_1 \cdot m_2}{R^2}$$

$$\frac{mv^2}{2} = mgh$$

$$F = k \frac{q_1 \cdot q_2}{R^2}$$

$$mc^2 = h\nu$$

Сложные модели описывают объект точнее (***адекватнее***).

Математическое моделирование позволило исследовать на ЭВМ очень сложные процессы, такие, например, как глобальные климатические изменения в результате применения ядерного оружия (натурный эксперимент имеет катастрофические последствия).

В литературе математическое моделирование часто принято называть ***вычислительным экспериментом***.

Основные этапы математического моделирования:

- Разработка модели – ***формализация***. Изучается в прикладных и фундаментальных науках.
- Разработка метода (алгоритма) решения уравнения модели – ***алгоритмизация***. Изучается в вычислительной математике.
- Создание программы – ***программирование***. Изучается в информатике.
- Расчеты, анализ результатов – ***практическое использование***.



Предметом вычислительной математики являются численные методы (алгоритмы) решения математических задач, возникающих при исследовании реальных объектов методом математического моделирования.

Например, пусть нужно найти R из уравнения (1.2) или (1.4), v из уравнения (1.3) или s из уравнения (1.5). Что общего в этих задачах? То, что нужно решить уравнение вида:

$$\underline{x}^2 = a \quad (1.6)$$

Вычислительная математика не рассматривает решения конкретных задач (1.2÷1.5), а изучает их решение в общем, абстрактном виде (1.6).

С точки зрения обычной математики точное решение уравнения (1.6) имеет вид:

$$x_{1,2}^* = \pm \sqrt{a} ,$$

причем если $\underline{a} > 0$, то два вещественных решения;
 если $\underline{a} = 0$, то тривиальное решение $x_1^* = x_2^* = 0$;
 если $\underline{a} < 0$, то вещественных решений нет.

Но знак $\sqrt{\quad}$ не решает задачу, так как не дает практического способа (алгоритма) вычисления значения $\underline{x}$ для конкретного значения a .

Вычислительная математика предлагает следующий алгоритм вычис-

вычисления x^* :

1. Выбрать начальное значение x_0 , например $x_0 = a$. Это начальное приближение решения.
2. Вычислять новые приближения решения x_i по формуле:

$$x_i = \frac{1}{2} \left(x_{i-1} + \frac{a}{x_{i-1}} \right) \quad (1.7)$$

до достижения условия:

$$|x_i - x_{i-1}| \leq \varepsilon \quad (1.8)$$

Здесь $i = 1, 2, \dots$ – номер вычисления - *итерации*.
 ε – требуемая точность.

Пример. Нужно решить уравнение $x^2 - 3 = 0$ с точностью $\varepsilon = 0,001$.
 Зададимся $x_0 = a = 3$,

Вычислим первое приближение: $x_1 = \frac{1}{2} \left(x_0 + \frac{a}{x_0} \right) = \frac{1}{2} \left(3 + \frac{3}{3} \right) = 2$,

оценим точность $|x_1 - x_0| = |2 - 3| = 1 \geq \varepsilon$. Требуемая точность не достигнута, нужно продолжить расчет.

Вычислим второе приближение: $x_2 = \frac{1}{2} \left(x_1 + \frac{a}{x_1} \right) = \frac{1}{2} \left(2 + \frac{3}{2} \right) = 1,75 = \frac{7}{4}$,

оценим точность $|1,75 - 2| = 0,25 > \varepsilon$.

Вычислим третье приближение: $x_3 = \frac{1}{2} \left(x_2 + \frac{a}{x_2} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{7}{4} + \frac{12}{7} \right) = 1,7321$,

оценим точность $|1,7321 - 1,75| = 0,0179 > \varepsilon$.

Вычислим четвертое приближение: $x_4 = 1,73205$,

оценим точность $|1,73205 - 1,7321| = 0,00005 < \varepsilon$ – точность достигнута.

Ответ: $x_{1,2} = \pm 1,73205$.

Рассмотренный пример демонстрирует принципы, общие для итерационных методов решения задач вычислительной математики:

1. Исходная задача (1.6) заменяется другой задачей – вычислительным алгоритмом по формулам (1.7), (1.8), где используются только арифметические операции $+$ $-$ $*$ $/$. Принято называть (1.7) *формулой итерационного процесса (итерационным процессом)*, (1.8) - *условием завершения итерационного процесса*.
2. Задача (1.7) содержит новый параметр i – *номер итерации*. Очевидно, что **число итераций** влияет на **точность** решения.
Если $\lim_{i \rightarrow \infty} x_i = x^* = \pm \sqrt{a}$, то итерационный процесс является *сходящимся* – позволяет получить решение исходной задачи (1.6).
3. Решение, полученное итерационным методом, всегда является **приближенным**, так как точное решение получить невозможно – нужны бесконечные вычисления.

Важно подчеркнуть, что формула (1.7) получена из (1.6) путём **тождественных** преобразований:

$$x^2 - a = 0 \xLeftrightarrow{*(-1)} a - x^2 = 0 \xLeftrightarrow{+2x^2} a + x^2 = 2x^2 \xLeftrightarrow{:2x} x = \frac{1}{2} \left(x + \frac{a}{x} \right)$$

Но не всякое тождественное преобразование позволяет получить сходящийся итерационный процесс.

Например:

а) $x^2 - a = 0 \Rightarrow x^2 = a \Rightarrow x = \frac{a}{x},$

Выполним расчет при a=3:

$$x_0 = 3; \quad x_1 = \frac{a}{x_0} = 1; \quad x_2 = \frac{a}{x_1} = 3; \quad x_3 = 1 \dots$$

Итерационный процесс *не сходится*; значения приближений *колеблются*.

б) $x^2 - a = 0 \xRightarrow{+x} x = x^2 + x - a$

$$x_0 = 3; \quad x_1 = 3^2 + 3 - 3 = 9; \quad x_2 = 9^2 + 9 - 3 = 87 \dots$$

Итерационный процесс *расходится*.

Рассмотренный пример иллюстрирует один из видов численных методов – *итерационный*.

Виды численных методов:

1. Прямые – решение получают за конечное число арифметических действий.
2. **Итерационные** – точное решение может быть получено теоретически в виде предела **бесконечной сходящейся** последовательности вычислений.
3. **Вероятностные** – методы случайного поиска решения (*угадывания*).

Все виды численных методов позволяют получить только **приближенное решение** задачи, то есть численное решение **всегда** содержит погрешность.