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.***

<u>Основные этапы математического моделирования:</u>

- 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***.


Использование результатов:
Результат
Расчёты
Программа
Программирование
для совершенствования
программы
Алгоритм
Алгоритмизация
для совершенствования
алгоритма
Мат. модель
Формализация
для совершенствования
модели
Объект
для изучения, управления
проектирования

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 с из уравнения (1.5). Что общего в этих задачах? То, что нужно решить уравнение вида:

$$x^2 = a \tag{1.6}$$

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 $a > 0$, то два вещественных решения;
если $a = 0$, то тривиальное решение $x^*_1 = x^*_2 = 0$;
если $a < 0$, то вещественных решений нет.

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

Вычислительная математика предлагает следующий алгоритм вычис-

вычисления x^*:

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

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

до достижения условия:

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

Здесь $i = 1,2,..$ – номер вычисления - ***итерации***.

ε – требуемая точность.

Пример. Нужно решить уравнение $x^2 - 3 = 0$ с точностью ε=0,001.

Зададимся $x_0 = a = 3$,

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

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

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

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

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

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 $\lim_{i\to\infty} x_i = x^* = \pm\sqrt{a}$, 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:

$$x^2 - a = 0 \underset{*(-1)}{\Leftrightarrow} a - x^2 = 0 \underset{+2x^2}{\Leftrightarrow} a + x^2 = 2x^2 \underset{:2x}{\Leftrightarrow} x = \frac{1}{2}(x + \frac{a}{x})$$

Но **не всякое тождественное преобразование позволяет получить сходящийся итерационный процесс**.

<u>Например:</u>

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

Выполним расчет при a=3:

$x_0 = 3;\ \ x_1 = \frac{a}{x_0} = 1;\ x_2 = \frac{\mathrm{a}}{x_1} = 3;\ x_3 = 1\ldots$

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

б) $\mathrm{x}^2 - \mathrm{a} = 0 \underset{+\mathrm{x}}{\Rightarrow} \mathrm{x} = \mathrm{x}^2 + \mathrm{x} - \mathrm{a}$

$\mathrm{x}_0 = 3;\quad \mathrm{x}_1 = 3^2 + 3 - 3 = 9;\quad \mathrm{x}_2 = 9^2 + 9 - 3 = 87.\ldots$

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**.