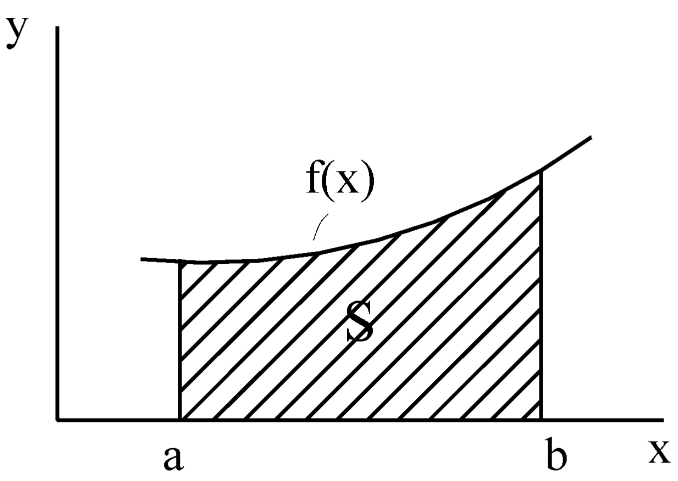
Численные методы

Математические модели и численные методы

- **Первый этап** **математического анализа** – это **создание математической модели** (постановка задачи). Для физического процесса модель обычно состоит из уравнений, описывающих процесс.
- **Второй этап** – это ***математическое исследование***. В зависимости от сложности модели применяются различные математические методы. Часто применяются **численные методы**.
- **Третий этап** – это *осмысление математического решения* и сопоставление его с экспериментальными данными. **Проверка адекватности математической модели**.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО (ПРИБЛИЖЕННОГО) ИНТЕГРИРОВАНИЯ

- Все методы численного интегрирования основаны на геометрической интерпретации интеграла как площади фигуры, ограниченной осью абсцисс, подынтегральной кривой и прямыми x=a, x=b,
- где a и b – пределы интегрирования

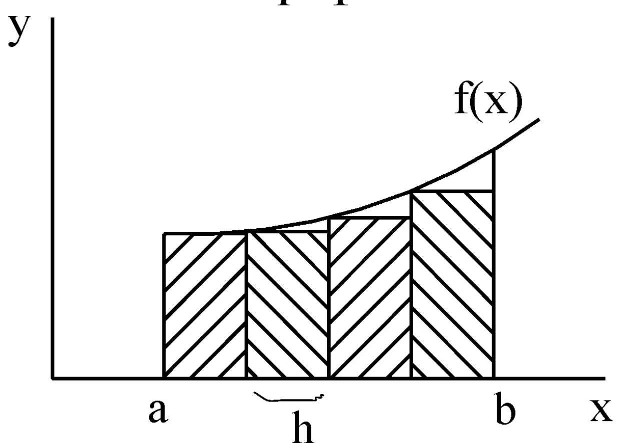


$$\int_a^b f(x)dx \approx S$$

Формула прямоугольников

- Даны пределы интегрирования. Зададим число элементарных фигур N, на которое будет разбита вся площадь. Находим шаг интегрирования:
- h = (b - a) / N
- Найдем определенный интеграл как сумму площадей элементарных фигур (прямоугольников), на которые разбита площадь под подынтегральной кривой

$$S = \sum_{i=1}^{N} S_i = f(a) * h + f(a+h) * h + \dots + f(b-h) * h$$

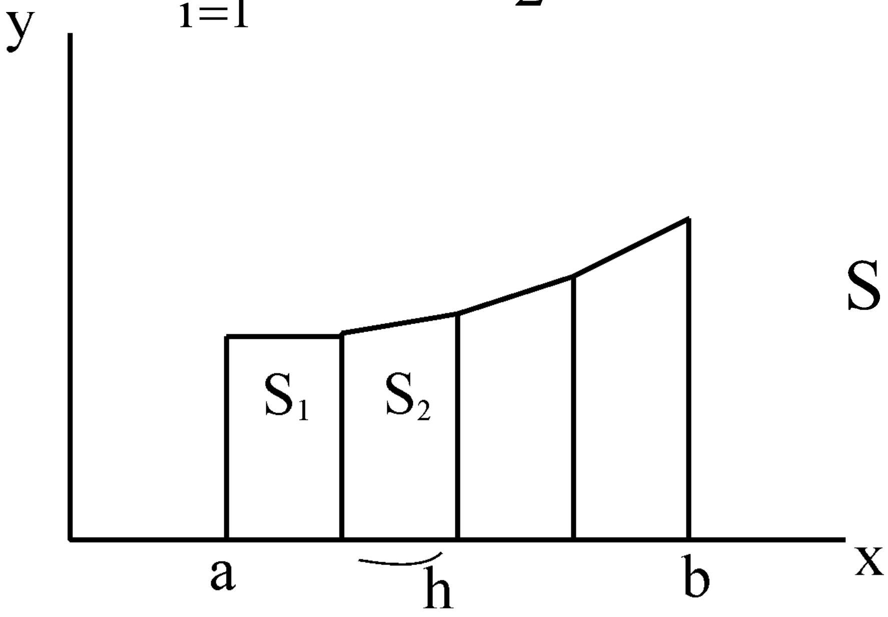


$$S = h * \sum_{x=a}^{b-h} f(x)$$

Формула трапеций

- Найдем определенный интеграл как сумму площадей элементарных фигур (трапеций), на которые разбита площадь под подынтегральной кривой

$$S = \sum_{i=1}^{N} S_i \qquad S_1 = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(a+h)\right] \qquad S_2 = \frac{h}{2}\left[f(a+h) + f(a+2h)\right]$$



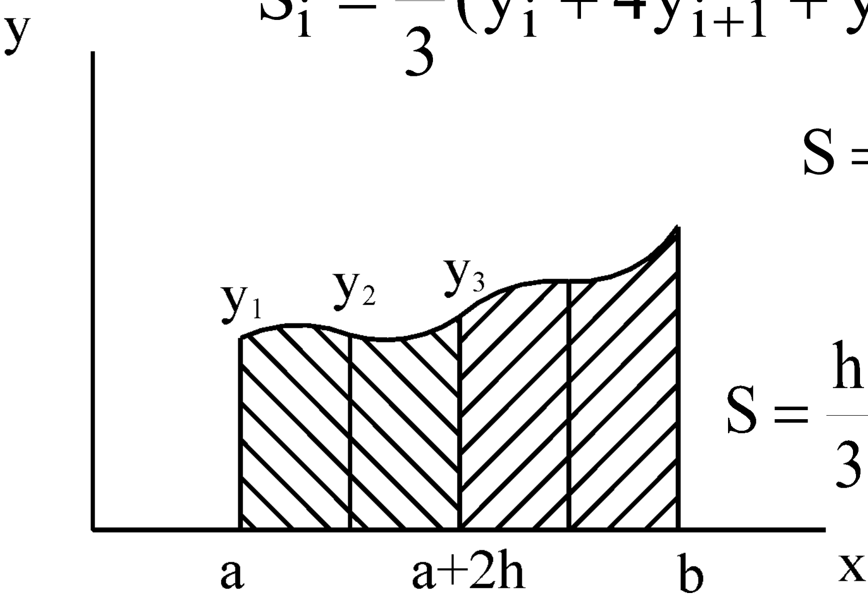
$$S = \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{x=a+h}^{b-h} f(x_i)\right] * h$$

Формула Симпсона

- Найдем определенный интеграл как сумму площадей элементарных фигур (криволинейных трапеций), на которые разбита площадь под подынтегральной кривой. Площадь криволинейной параболы определяется по формуле:

$$S_i = \frac{h}{3}\left(y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2}\right)$$

$$S = \sum_{i=1}^{N} S_i$$



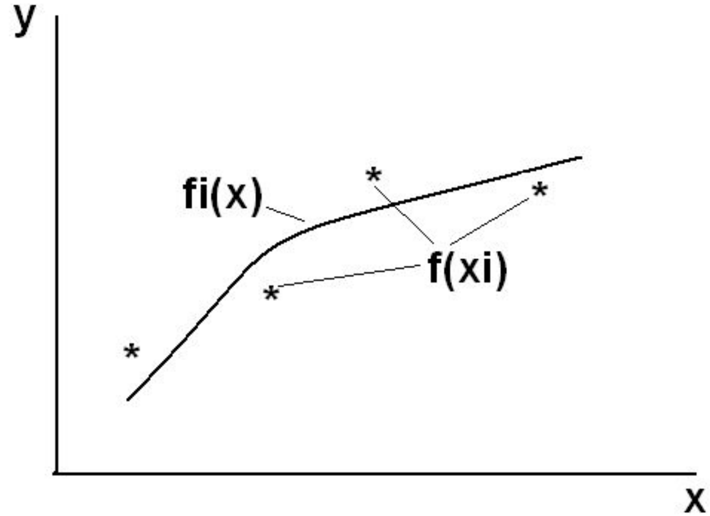
$$S = \frac{h}{3}\left[y(a) + y(b) + \sum_{x=a+h}^{b-h,2h} 4f(x) + \sum_{x=a+2h}^{b-2h,2h} 2f(x)\right]$$

ПРИНЦИПЫ МАШИННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АППРОКСИМАЦИИ И ИНТЕРПОЛЯЦИИ

- Одной из важнейших задач в процессе математического моделирования является **вычисление значений функций**, входящих в математическое описание модели. Для сложных моделей подобные вычисления могут быть трудоемкими даже при использовании ЭВМ.
- Поставленные проблемы решаются путем приближенной замены функции f(x) более простой функцией ϕ(x), которую нетрудно вычислять при любом значении аргумента в заданном интервале его изменения.
- Приближение функции f(x) более простой функцией ϕ(x) называется ***аппроксимацией***.

Аппроксимация методом наименьших квадратов (МНК)

- Пусть проведено N опытов. В каждом опыте получена пара значений xi, yi (i=1,…, N).
- Необходимо провести аппроксимирующую кривую, которая не проходит через экспериментальные точки, но в то же время отражает исследуемую зависимость, сглаживает возможные выбросы, возникшие за счет погрешностей эксперимента.



- Пусть **функция ф(x)** - аппроксимирующая функция для дискретной зависимости f(xi).
- В узлах xi функции f(xi) и ф (x) будут отличаться на величину **ε_i = ф (xi) - f(xi)**. **Отклонения** могут быть положительными и отрицательными. Чтобы не учитывать знаки, возведем отклонение в квадрат и просуммируем:

$$Q = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[\varphi(x_i) - f(x_i)\right]^2 \to \min$$

Метод построения аппроксимирующей функции из условия минимума величины Q называется **методом наименьших квадратов (МНК).**

- Зададимся видом функции ϕ(x).
- Обычно проводят аппроксимацию полиномами n-й степени. Общий вид полинома n-й степени :
- $y = a_0 + a_1*x + a_2*x^2 + \ldots + a_n*x^n$
- Нахождение коэффициентов a_i рассмотрим на примере аппроксимации прямой (полиномом первой степени).
- y = a0 + a1*x – математическая модель
- Запишем критерий МНК:

$$Q = \sum_{i=1}^{N} (y_i - a_0 - a_1 * x_i)^2 \rightarrow \min$$

- Ищем коэффициенты a0, a1. Исследуем функцию Q на экстремум, т.е. найдем частные производные и приравняем нулю.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial a_0} = 0 \\ \dfrac{\partial Q}{\partial a_1} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2\sum (y_i - a_0 - a_1 x_i)(-1) = 0 \\ 2\sum (y_i - a_0 - a_1 x_i)(-x_i) = 0 \end{cases}$$

Преобразуем:

$$\begin{cases} -\sum\limits_{i=1}^{N} y_i + N a_0 + a_1 \sum\limits_{i=1}^{N} x_i = 0 \\ -\sum\limits_{i=1}^{N} x_i y_i + a_0 \sum\limits_{i=1}^{N} x_i + a_1 \sum\limits_{i=1}^{N} x_i^2 = 0 \end{cases}$$

Получим в итоге систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} N * a_0 + \sum x_i * a_1 = \sum y_i \\ \sum x_i * a_0 + \sum x_i^2 * a_1 = \sum x_i y_i \end{cases}$$

Запишем систему в векторной форме:
D*A = C
где A – вектор-столбец неизвестных,
C – вектор свободных членов,
D – матрица коэффициентов.

$$A = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} N & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix}$$

Система линейных уравнений может быть решена либо точными методами (метод Крамера, метод обратных матриц, метод Гаусса), либо приближенными методами (метод простых итераций, метод Зейделя).

Интерполяция

- Задача приближения таблично заданной функции многочленом, когда принимается, что заменяющая функция должна проходить через заданные узлы, называется ***интерполяцией***.
- **Частной задачей интерполяции** считают нахождение приближенных значений табличной функции при аргументах x, не совпадающих с узловыми.
- **В более общем плане** с помощью интерполяции решают широкий круг задач численного анализа – дифференцирование и интегрирование функций, нахождение нулей и экстремумов функций, решение дифференциальных уравнений и т.д.
- Возможность решения этих задач обусловлена достаточно простым видом аппроксимирующей функции ф (x).

Интерполяция полиномом Лагранжа

- Пусть функция f(x) задана таблицей значений, полученной из эксперимента или путем вычислений. Выбранные значения аргумента x называются узлами таблицы. Считаем, что узлы не являются равноотстоящими.

x1	x2	x3	…	xn
y1	y2	y3	…	yn

Введем функцию ϕ(x) так, чтобы она совпадала с табличными значениями заданной функции f(x) во всех узлах xi:

ϕ(x, a0, a1, …,an) = fi,   0 ≤ i ≤ N (*)

Свободные параметры a_i определяются из системы уравнений. Подобный способ введения аппроксимирующей функции называется лагранжевой интерполяцией, а соотношения (*) – условиями Лагранжа.

Интерполяция полиномом Лагранжа

- Для решения частной задачи интерполяции Лагранж предложил следующую форму интерполяционного полинома:

$$P_n(x) = \sum_{i=1}^{N} f_i \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \frac{x^* - x_i}{x_i - x_j}$$

X* - значение аргумента, не совпадающее с узловыми значениями

Коэффициент полинома находится как отношение произведений отклонений точки x, не принадлежащей узлу, от всех узлов (исключая i-й) и произведения отклонений i-го узла от всех остальных узлов.

Интерполяция полиномом Ньютона

- Для таблиц с равноотстоящими узлами существуют несколько видов полиномов Ньютона
- **<u>Первый полином Ньютона (для интерполяции «вперед»)</u>**

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)\Delta^2 y_0}{2!} + \ldots + \frac{q(q-1)\ldots(q-n+1)\Delta^n y_0}{n!}$$

где y_i – значения дискретной функции,
Δy_i, $\Delta^2 y_i$ – конечные разности первого, второго порядка и т.д.
q определяется по формуле:

$$q = \frac{x^* - x_0}{h}$$

h – шаг интерполяции;
n – порядок полинома;
n=N-1
N – количество точек в таблице

Интерполяция полиномом Ньютона

- **Второй полином Ньютона (для интерполяции «назад»)**

$$P_n(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)\Delta^2 y_{n-2}}{2!} + \ldots + \frac{q(q+1)\ldots(q+n-1)\Delta^n y_0}{n!}$$

$$q = \frac{x^* - x_n}{h}$$

Таблица конечных разностей:

y	Δy	Δ^2y	Δ^3y	
y1	y2-y1	Δy2- Δy1	Δ^2y2-Δ^2y1	
y2	y3-y2	Δy3- Δy2		
y3	y4-y3			
y4				

Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

- ОДУ широко используется для мат. моделирования процессов и явлений в различных областях науки и техники:
- - уравнения движения тел в механике,
- - кинетика химических реакций,
- - прогиб упругого стержня.
- В ДУ n-го порядка в качестве неизвестных величин входят функция f(x) и ее первые n производных по аргументу x:
- $\varphi(x, y, y', \dots, y(n)) = 0$ (1)
- Уравнение (1) эквивалентно системе n уравнений первого порядка:
- $\varphi_k (x, y_1, y_1', y_2, y'_2, \dots , y_n, y'_n) =0$, где $k = 1 \dots n$ (2)

- Уравнение (1) и эквивалентная ему система (2) имеют бесконечное множество решений.
- Единственное решение выделяют с помощью дополнительных условий, которым должны удовлетворять искомые решения.
- В зависимости от вида этих условий выделяют 3 типа задач:
- \- задачи Коши,
- \- граничные задачи,
- \- задачи на собственные значения.

Задача Коши (задача с начальными условиями)

- Кроме исходного уравнения (1) в некоторой точке x_0 заданы начальные условия, т.е. значения функции y(x) и (n-1) ее производных:
- $y(x_0) = y_0$, $y'(x_0) = y'_0$, …, $y^{(n-1)}(x_0) = y^{n-1}{}_0$.
- Для системы ОДУ (2):
- $y_1(x_0)$, $y_2(x_0)$, …, $y_n(x_0)$.

Метод Эйлера (метод ломаных)

- Представим задачу (2) в каноническом виде, в форме Коши

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y) \qquad y(x0)=y0$$

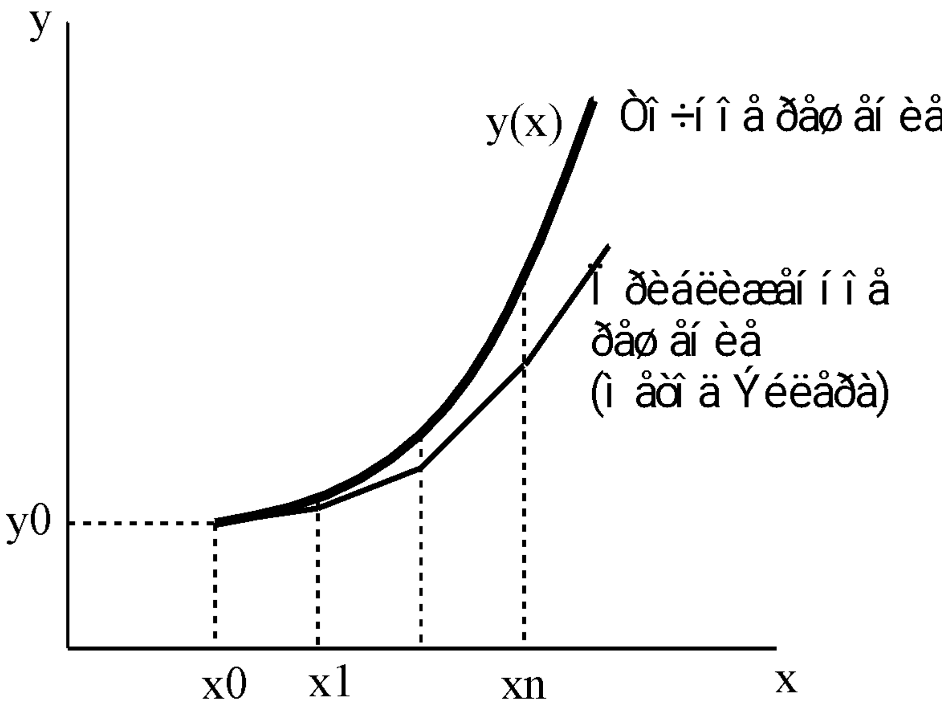
В окрестности точки x0 функцию y(x) разложим в ряд Тейлора, который можно применить для приближенного определения искомой функции y(x):

$$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} * y''(x_0) + \ldots$$

- В точке x_0+h при малых значениях h можно ограничиться двумя членами ряда
- $y(x_0+h) = y_0 + h*y'(x_0) + O(h^2)$,
- где $O(h^2)$ – бесконечно малая величина порядка h^2.
- Заменим производную $y'(x_0)$ на $f(x_0,y_0)$:

  $$\mathbf{y(x_0+h) \approx y_0 + h^* f(x_0,y_0)} \qquad (3)$$
- Теперь приближенное решение в точке $x_1 = x_0 + h$ можно вновь рассматривать как начальное условие и по формуле (3) найти значение функции y в следующей точке $x_2 = x_1+h$.
- Получен простейший алгоритм решения задачи Коши, который называется методом Эйлера

Геометрическая интерпретация метода Эйлера



Искомую функцию y(x) заменяем ломаной линией, представляющей собой **отрезки касательных к этой функции** в узлах x0, x1, …, xn.

Метод Рунге-Кутта

- Для уменьшения погрешности метода интегрирования ОДУ, использующего разложение искомого решения в ряд Тейлора, необходимо учитывать большее количество членов ряда. Однако при этом возникает необходимость аппроксимации производных от правых частей ОДУ.
- Идея методов Рунге-Кутта заключается в том, что производные аппроксимируются через значения функции f(x,y) в точках на интервале [x0, x0+h], которые выбираются из условия наибольшей близости к ряду Тейлора

Метод Рунге-Кутта 4го порядка

- В зависимости от старшей степени h, с которой учитываются члены ряда, существуют вычислительные схемы Рунге-Кутта разного порядка.
- **yi+1 = yi + Δy** - рекуррентная формула Рунге-Кутта
- **Δy = (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4) / 6** - усредненное значение приращений y, где ki – аналог Δy.

Метод Рунге-Кутта 4го порядка

- Производная определяется в 4-х точках:
- **k1 = h* y'(xi, yi)**
- **k2 = h* y'(xi + h/2, yi + k1/2)**
- **k3 = h* y'(xi + h/2, yi + k2/2)**
- **k4 = h*y'(xi + h, yi + k3)**
- Метод Рунге-Кутта является более точным, чем метод Эйлера, т.к. чем выше порядок, тем точнее расчет приращения Δy.