

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

КЛАССИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТСКИЙ УЧЕБНИК



Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ



Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

7-е издание

*Рекомендовано
Министерством образования Российской Федерации
в качестве учебного пособия для студентов
физико-математических специальностей
высших учебных заведений*



Москва
БИНОМ. Лаборатория знаний
2011

УДК 519.6 (075)
ББК 22.193
Б30

*Печатается
по решению Ученого совета
Московского университета*

Бахвалов Н. С.

Б30 Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. — 7-е изд. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. — 636 с. : ил. — (Классический университетский учебник).

ISBN 978-5-9963-0449-3

Классический учебник по численным методам, переработанный с учетом современных тенденций в вычислительных методах. В данном издании устранены неточности и опечатки, имевшиеся в предыдущих изданиях, упрощены некоторые доказательства.

Для студентов и преподавателей вузов, а также для специалистов, использующих численные методы в своей работе.

**УДК 519.6 (075)
ББК 22.193**

**По вопросам приобретения обращаться:
«БИНОМ. Лаборатория знаний»
Телефон: (499) 157-5272
e-mail: binom@Lbz.ru, <http://www.Lbz.ru>**

ISBN 978-5-9963-0449-3

© БИНОМ. Лаборатория знаний,
2011
© МГУ им. М. В. Ломоносова,
художественное оформление,
2003

Оглавление



Предисловие	5
Предисловие к третьему изданию	7
Введение	9
1 Погрешность результата численного решения задачи	17
§ 1. Источники и классификация погрешности	17
§ 2. Запись чисел в ЭВМ	21
§ 3. Абсолютная и относительная погрешности. Формы записи данных	22
§ 4. О вычислительной погрешности	25
§ 5. Погрешность функции	27
§ 6. Обратная задача	32
2 Интерполяция и численное дифференцирование	35
§ 1. Постановка задачи приближения функций	36
§ 2. Интерполяционный многочлен Лагранжа	39
§ 3. Оценка остаточного члена интерполяционного многочлена Лагранжа	43
§ 4. Разделенные разности и их свойства	43
§ 5. Интерполяционная формула Ньютона с разделенными разностями	45
§ 6. Разделенные разности и интерполирование с кратными узлами	48
§ 7. Уравнения в конечных разностях	51
§ 8. Многочлены Чебышева	58
§ 9. Минимизация оценки остаточного члена интерполяционной формулы	62
§ 10. Конечные разности	65
§ 11. Интерполяционные формулы для таблиц с постоянным шагом	68
§ 12. Составление таблиц	71
§ 13. О погрешности округления при интерполяции	74
§ 14. Применения аппарата интерполирования. Обратная интерполяция	75
§ 15. Численное дифференцирование	76
§ 16. О вычислительной погрешности формул численного дифференцирования	83
§ 17. Рациональная интерполяция	85

3	Численное интегрирование	86
§ 1.	Простейшие квадратурные формулы. Метод неопределенных коэффициентов	86
§ 2.	Оценки погрешности квадратуры	89
§ 3.	Квадратурные формулы Ньютона—Котеса	94
§ 4.	Ортогональные многочлены	99
§ 5.	Квадратурные формулы Гаусса	106
§ 6.	Практическая оценка погрешности элементарных квадратурных формул	113
§ 7.	Интегрирование быстро осциллирующих функций	116
§ 8.	Повышение точности интегрирования за счет разбиения отрезка на равные части	119
§ 9.	О постановках задач оптимизации	124
§ 10.	Постановка задачи оптимизации квадратур	129
§ 11.	Оптимизация распределения узлов квадратурной формулы	131
§ 12.	Примеры оптимизации распределения узлов	137
§ 13.	Главный член погрешности	140
§ 14.	Правило Рунге практической оценки погрешности	144
§ 15.	Уточнение результата интерполяцией более высокого порядка точности	148
§ 16.	Вычисление интегралов в нерегулярном случае	150
§ 17.	Принципы построения стандартных программ с автоматическим выбором шага	157
4	Приближение функций и смежные вопросы	164
§ 1.	Наилучшие приближения в линейном нормированном пространстве	164
§ 2.	Наилучшее приближение в гильбертовом пространстве и вопросы, возникающие при его практическом построении	166
§ 3.	Тригонометрическая интерполяция. Дискретное преобразование Фурье	171
§ 4.	Быстрое преобразование Фурье	175
§ 5.	Наилучшее равномерное приближение	178
§ 6.	Примеры наилучшего равномерного приближения	181
§ 7.	О форме записи многочлена	187
§ 8.	Интерполяция и приближение сплайнами	191
5	Многомерные задачи	201
§ 1.	Метод неопределенных коэффициентов	202
§ 2.	Метод наименьших квадратов и регуляризация	203
§ 3.	Примеры регуляризации	206
§ 4.	Сведение многомерных задач к одномерным	212
§ 5.	Интерполяция функций в треугольнике	220
§ 6.	Оценка погрешности численного интегрирования на равномерной сетке	222
§ 7.	Оценка снизу погрешности численного интегрирования	225
§ 8.	Метод Монте-Карло	232

§ 9. Обсуждение правомерности использования недетерминированных методов решения задач.....	236
§ 10. Ускорение сходимости метода Монте-Карло	239
§ 11. О выборе метода решения задачи	243
6 Численные методы алгебры	250
§ 1. Методы последовательного исключения неизвестных.....	253
§ 2. Метод отражений	262
§ 3. Метод простой итерации	265
§ 4. Особенности реализации метода простой итерации на ЭВМ	268
§ 5. δ^2 -процесс практической оценки погрешности и ускорения сходимости.....	271
§ 6. Оптимизация скорости сходимости итерационных процессов	275
§ 7. Метод Зейделя	285
§ 8. Метод наискорейшего градиентного спуска.....	290
§ 9. Метод сопряженных градиентов	294
§ 10. Итерационные методы с использованием спектрально-эквивалентных операторов	301
§ 11. Погрешность приближенного решения системы уравнений и обусловленность матриц. Регуляризация	304
§ 12. Проблема собственных значений	315
§ 13. Решение полной проблемы собственных значений при помощи QR-алгоритма	320
7 Решение систем нелинейных уравнений и задач оптимизации	325
§ 1. Метод простой итерации и смежные вопросы	327
§ 2. Метод Ньютона решения нелинейных уравнений	331
§ 3. Методы спуска	337
§ 4. Другие методы сведения многомерных задач к задачам меньшей размерности	342
§ 5. Решение стационарных задач путем установления	345
§ 6. Что и как оптимизировать?	353
8 Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений	364
§ 1. Решение задачи Коши с помощью формулы Тейлора	365
§ 2. Методы Рунге—Кутта	367
§ 3. Методы с контролем погрешности на шаге	373
§ 4. Оценки погрешности одношаговых методов	375
§ 5. Конечно-разностные методы	380
§ 6. Метод неопределенных коэффициентов.....	383
§ 7. Исследование свойств конечно-разностных методов на модельных задачах	387
§ 8. Оценка погрешности конечно-разностных методов	392
§ 9. Особенности интегрирования систем уравнений	400
§ 10. Методы численного интегрирования уравнений второго порядка	412

§ 11. Оптимизация распределения узлов интегрирования	415
9 Численные методы решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений	420
§ 1. Простейшие методы решения краевой задачи для уравнений второго порядка	420
§ 2. Функция Грина сеточной краевой задачи	426
§ 3. Решение простейшей краевой сеточной задачи	431
§ 4. Замыкания вычислительных алгоритмов	439
§ 5. Обсуждение постановок краевых задач для линейных систем первого порядка	447
§ 6. Алгоритмы решения краевых задач для систем уравнений первого порядка	452
§ 7. Нелинейные краевые задачи	458
§ 8. Аппроксимации специального типа	464
§ 9. Конечно-разностные методы отыскания собственных значений	476
§ 10. Построение численных методов с помощью вариационных принципов	479
§ 11. Улучшение сходимости вариационных методов в нерегулярном случае	489
§ 12. Влияние вычислительной погрешности в зависимости от формы записи конечно-разностного уравнения	491
10 Методы решения уравнений в частных производных	498
§ 1. Основные понятия теории метода сеток	500
§ 2. Аппроксимация простейших гиперболических задач	508
§ 3. Принцип замороженных коэффициентов	524
§ 4. Численное решение нелинейных задач с разрывными решениями	527
§ 5. Разностные схемы для одномерного параболического уравнения	531
§ 6. Разностная аппроксимация эллиптических уравнений	546
§ 7. Решение параболических уравнений с несколькими пространственными переменными	569
§ 8. Методы решения сеточных эллиптических уравнений	583
11 Численные методы решения интегральных уравнений	602
§ 1. Решение интегральных уравнений методом замены интеграла квадратурной суммой	602
§ 2. Решение интегральных уравнений с помощью замены ядра на вырожденное	607
§ 3. Интегральные уравнения Фредгольма первого рода	611
Заключение	620
Список литературы	624
Предметный указатель	629

Предисловие



Уважаемый читатель!

Вы открыли одну из замечательных книг, изданных в серии «Классический университетский учебник», посвященной 250-летию Московского университета. Серия включает свыше 150 учебников и учебных пособий, рекомендованных к изданию Учеными советами факультетов, редакционным советом серии и издаваемых к юбилею по решению Ученого совета МГУ.

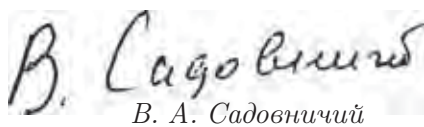
Московский университет всегда славился своими профессорами и преподавателями, воспитавшими не одно поколение студентов, впоследствии внесших заметный вклад в развитие нашей страны, составивших гордость отечественной и мировой науки, культуры и образования.

Высокий уровень образования, которое дает Московский университет, в первую очередь обеспечивается высоким уровнем написанных выдающимися учеными и педагогами учебников и учебных пособий, в которых сочетаются как глубина, так и доступность излагаемого материала. В этих книгах аккумулируется бесценный опыт методики и методологии преподавания, который становится достоянием не только Московского университета, но и других университетов России и всего мира.

Издание серии «Классический университетский учебник» наглядно демонстрирует тот вклад, который вносит Московский университет в классическое университетское образование в нашей стране и, несомненно, служит его развитию.

Решение этой благородной задачи было бы невозможным без активной помощи со стороны издательств, принявших участие в издании книг серии «Классический университетский учебник». Мы расцениваем это как поддержку ими позиции, которую занимает Московский университет в вопросах науки и образования. Это служит также свидетельством того, что 250-летний юбилей Московского университета — выдающееся событие в жизни всей нашей страны, мирового образовательного сообщества.

*Ректор Московского университета
академик РАН, профессор*



В. А. Садовничий

Предисловие к третьему изданию



Первый вариант этой книги появился около тридцати лет назад, когда экономика страны находилась на подъеме и специалисты в области численных методов были весьма уважаемы в обществе.

«Вычислители» старшего поколения, многие из которых, как и Николай Петрович Жидков, уже ушли из жизни, внесли неопенимый вклад в развитие научного и промышленного потенциала нашей страны, ее обороноспособности. Создание ракетно-ядерного щита над нашей страной, в котором они приняли активное участие, предотвратило третью мировую войну.

За прошедшее время произошло изменение интеллектуального уровня задач, требующих внимания математиков, в частности, специалистов в области численных методов.

Это вызвано, с одной стороны, падением уровня науки и производства, а с другой — непрерывно растущей общедоступностью достаточно мощной вычислительной техники. Задачи, решение которых тридцать лет назад требовало умения творчески применять теорию численных методов, часто могут быть решены с помощью современных вычислительных машин без использования сложных вычислительных методов.

Однако мы сохранили общий теоретический настрой книги, исходя из следующих соображений.

- 1.** Теория численных методов, однажды возникнув, развивается по своим внутренним законам так же, как иные фундаментальные разделы математики.
- 2.** Уже первые наметившиеся шаги по восстановлению экономики страны показали востребованность в специалистах в области теории численных методов и практики их применения.
- 3.** Как показывает опыт промышленно развитых стран Запада развитие средств коммуникации, глобальная компьютеризация и распространение так называемой массовой культуры сопутствуют катастрофическому падению уровня математической образованности. В этих условиях становится особенно актуальным создание программного обеспечения решения прикладных задач, допускающего его использование исследователями невысокой математической квалификации. Разработка такого обеспечения невозможна без участия специалистов в области численных методов и без дальнейшего развития теории численных методов.

В то же время создание такого обеспечения не решает всех проблем, связанных с падением математической образованности общества. Прежде

чем прикладные задачи попадут к специалистам в области численных методов и их применения, должны быть построены математические модели рассматриваемых проблем. Для их создания, грамотного осознания результатов расчетов и дальнейшего использования требуется участие в сотни раз большего числа специалистов из других разделов математики и особенно других областей экономики и знания — экономистов, физиков, химиков, механиков, биологов, металлургов, технологов, . . . , обладающих (помимо минимальных познаний в области вычислительных технологий) достаточно высокой математической культурой. Поэтому достойное развитие экономики и науки невозможно без широкого распространения этой культуры.

Введение



Попробуем определить место теории численных методов в системе других областей знаний и рассказать о проблемах, возникающих в связи с ее применением, прежде чем переходить к непосредственному ее изложению.

Математика как наука возникла в связи с необходимостью решения практических задач: измерений на местности, навигации и т.д. Вследствие этого математика была численной математикой, ее целью являлось получение решения в виде числа.

Численное решение прикладных задач всегда интересовало математиков. Крупнейшие представители прошлого сочетали в своих исследованиях изучение явлений природы, получение их математического описания, как иногда говорят, математической модели явления, и его исследование. Анализ усложненных моделей потребовал создания специальных, как правило, численных или асимптотических методов решения задач. Названия некоторых из таких методов — методы Ньютона, Эйлера, Лобачевского, Гаусса, Чебышева, Эрмита, Крылова — свидетельствуют о том, что их разработкой занимались крупнейшие ученые своего времени.

Настоящее время характерно резким расширением приложений математики, во многом связанным с созданием и развитием средств вычислительной техники. В результате появления ЭВМ (электронно-вычислительных машин или, как часто говорят, компьютеров) с программным управлением менее чем за пятьдесят лет скорость выполнения арифметических операций возросла от 0,1 операции в секунду при ручном счете до 10^{12} операций на современных серийных ЭВМ, т.е. примерно в 10^{13} раз.

Рост возможностей в связи с созданием вычислительной техники носит качественный характер и иногда сравнивается с промышленной революцией, вызванной изобретением паровой машины. Уместно вспомнить, что в итоге промышленной революции и последующего на протяжении двух веков развития науки и техники скорость передвижения возросла от скорости пешехода 6 км/ч до скорости космонавта 30 000 км/ч, т.е. в 5 000 раз.

Распространенное мнение о всемогуществе современных ЭВМ часто порождает впечатление, что математики избавились почти от всех хлопот, связанных с численным решением задач, и разработка новых методов для их решения уже не столь существенна. В действительности дело обстоит иначе, поскольку потребности эволюции, как правило, ставят перед наукой задачи, находящиеся на грани ее возможностей. Расширение возможностей приложения математики обусловило математизацию химии,

экономики, биологии, геологии, географии, психологии, экологии, метеорологии, медицины, конкретных разделов техники и др. Суть математизации состоит в построении математических моделей процессов и явлений и в разработке методов их исследования.

В физике или механике, например, построение математических моделей для описания различных явлений и изучение этих моделей с целью объяснения старых или предсказания новых эффектов являются традиционными.

Однако в целом работа в этом направлении зачастую продвигалась относительно медленно, поскольку обычно не удавалось получить решение возникающих математических задач и приходилось ограничиваться рассмотрением простейших моделей. Применение ЭВМ и расширение математического образования резко увеличило возможности построения и исследования математических моделей. Все чаще результаты расчетов позволяют обнаруживать и предсказывать ранее никогда не наблюдавшиеся явления; это дает основание говорить о математическом эксперименте. В некоторых исследованиях доверие к результатам численных расчетов так велико, что при расхождении между результатами расчетов и экспериментов в первую очередь ищут погрешность в результатах экспериментов.

Современные успехи в решении таких, например, проблем, как атомные и космические, вряд ли были бы возможны без применения ЭВМ и численных методов.

Требование численного решения новых задач привело к появлению большого количества новых методов. Наряду с этим последние полвека происходило интенсивное теоретическое переосмысливание и старых методов, а также систематизация всех методов. Эти теоретические исследования оказывают большую помощь при решении конкретных задач и играют существенную роль в наблюдаемом сейчас широком распространении сферы приложений ЭВМ и математики вообще.

Как уже отмечалось, с помощью современных ЭВМ удалось успешно решить ряд важных научно-технических задач. У непосвященного человека может возникнуть превратное впечатление, что успехи в применении ЭВМ обусловлены только повышением их быстродействия. Реально дело обстоит иначе и сложнее.

Правильнее будет сказать, что достижения в области использования ЭВМ обусловлены сочетанием ряда существенных факторов, без пропорционального развития которых они были бы много скромнее:

1) увеличение быстродействия ЭВМ, расширение памяти, совершенствование структуры ЭВМ, неуклонное снижение стоимости арифметической операции и единицы памяти;

2) разработка программных средств общения с ЭВМ, включающая создание операционных систем, языков программирования, библиотек и пакетов стандартных программ, снижение требований (в случае персональных ЭВМ) к математической и программистской культуре;

3) рост понимания процессов и явлений науки, техники, природы и общества и создание их математических моделей;

4) совершенствование методов решения традиционных математических и прикладных задач и создание методов решения новых задач;

5) рост понимания возможностей применения ЭВМ среди широких слоев общества; распространение так называемой компьютерной грамотности; координация усилий специалистов разного профиля по использованию вычислительной техники.

Достижения, перечисленные в пп. 3), 5), позволяют ответить на вопрос, какие задачи следует решать с помощью ЭВМ, и организовать их решение, в пп. 2), 4) — как их решать, а пп. 1), 2) дают для этого технические и программные средства.

Просмотр методов решения сложных прикладных задач показывает, что, как правило, эффект, достигаемый за счет совершенствования численных методов, по порядку сравним с эффектом, достигаемым за счет повышения производительности ЭВМ. Трудно сформулировать критерий, по которому можно было бы оценивать эффект применения новых численных методов, и еще труднее дать его достоверную количественную оценку. Все же, если сказать, что эффект от применения новых численных методов (при измерении эффекта в логарифмической шкале) при решении прикладных естественнонаучных задач дает 40% общего эффекта, достигаемого за счет применения новой вычислительной техники и новых численных методов, то эта оценка не будет завышенной.

Рассмотрим пример, иллюстрирующий это утверждение. Решение дифференциальных уравнений в частных производных сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с матрицей, в каждой строке которой имеется 5–10 ненулевых элементов. Накануне появления ЭВМ такие системы уравнений решали в случае числа неизвестных порядка $10 - 10^2$; сейчас нередки случаи, когда решаются системы с числом неизвестных порядка $10^5 - 10^6$. В гипотетическом случае решения этих задач на современных ЭВМ методами, известными тридцать лет назад, пришлось бы ограничиться системами уравнений с числом неизвестных порядка $10^3 - 10^4$ (при тех же затратах времени ЭВМ). Конечность скорости распространения сигнала — 300 000 км/с — ставит уже сейчас существенное ограничение на возможный рост быстродействия однопроцессорных ЭВМ, поэтому значение дальнейшего развития теории численных методов трудно переоценить. В частности, становится все более актуальной проблема разработки численных методов и программных средств для многопроцессорных ЭВМ.

Быстрое проникновение математики во многие области знания, в частности, объясняется тем, что математические модели и методы их исследования применимы сразу ко многим явлениям, сходным по своей формальной структуре. Часто математическая модель, описывающая какое-либо явление, появляется при изучении других явлений или при абстрактных математических построениях задолго до конкретного рассмотрения дан-

ного явления. В частности, и в теории численных методов, так же как в «чистой» математике, полезна разработка общих построений. Однако есть разница в подходе «чистого» и «прикладного» математика к решению какой-либо проблемы. На языке первого понятие «решить задачу» означает доказать существование решения и предложить процесс, сходящийся к решению. Сами по себе эти результаты полезны для прикладника, но, кроме этого, ему нужно, чтобы процесс получения приближения не требовал больших затрат, например времени или памяти ЭВМ. Ему важно не только то, что процесс сходится, но и то, как быстро он сходится. При численном решении задач возникают также новые вопросы, связанные с устойчивостью результата относительно возмущений исходных данных и округлений при вычислениях.

Наряду с теорией численных методов период бурного развития переживает и ряд других разделов математики, непосредственно обязанных ЭВМ своим возникновением. Применение численных методов и ЭВМ к решению естественнонаучных задач оказывает влияние и на традиционные разделы математики.

Математика возникла и развивается как часть естествознания, и долгое время ее развитие существенным образом определялось потребностями физики и механики. Требование математизации новых разделов науки неизбежно приводит к обратному влиянию этих разделов на развитие математики и должно существенно изменить лицо самой математики.

Развитие как теоретических, так и прикладных разделов математики в конечном счете определяется потребностями общества и его материальным вкладом в развитие науки, в частности в образование. Несколько десятилетий назад отношение вложений в науку к общим вложениям в народное хозяйство составляло доли процента. Сейчас в индустриально развитых странах это отношение настолько велико, что его дальнейший существенный рост невозможен. Поэтому происходит перераспределение вложений в различные направления науки. Это обуславливает еще один канал влияния прикладной стороны математики на развитие ее теоретических разделов. Прикладные исследования имеют непосредственную отдачу; это усиливает доверие общества к математике, расширяет понимание ее проблем и, как следствие, способствует увеличению вложения средств с целью ее развития.

При реальной работе в области приложений математики возникает большое количество осложнений самого различного, зачастую нематематического характера.

Хотя трудно надеяться, что какие-либо теоретические нравоучения могут заменить собственный опыт работы, попытаемся обратить внимание на некоторые вопросы общего характера, важные для работы в области приложений математики. Проводимая ниже систематизация этих вопросов является довольно случайной, условной; по-видимому, можно предложить еще добрый десяток подобных классификаций, имеющих не меньшее право на существование.

1. Первостепенное значение имеет выбор направления исследования. Свобода выбора обычно довольно невелика, так как основные контуры направления исследования обычно задаются «извне».

При выборе направления исследования в пределах имеющихся возможностей полезно иметь в виду следующее «правило трех частей», по своему внешнему виду похожее на шутку. Проблемы делятся на: I — легкие, II — трудные, III — очень трудные. Проблемами I заниматься не стоит, они будут решены в ходе событий и без вашего вмешательства, проблемы III вряд ли удастся решить в настоящее время, поэтому стоит обратиться к проблемам II.

2. Нужно уметь сформулировать на языке математики конкретные задачи физики, механики, экономики, инженерные задачи и т. д., т. е. построить математическую модель рассматриваемого явления.

В теоретической науке исследователь, умеющий правильно формулировать, как говорят, ставить новые задачи, как правило ценится выше, чем исследователь, умеющий решать кем-то поставленные задачи. Еще более возрастает роль таких ученых в прикладной науке.

Начинающий работу математик часто жалуется на трудности контактов с представителями других наук, которые «даже» не могут сформулировать стоящих перед ними задач. Правильное формулирование задачи — это научная проблема, не менее сложная, чем само решение задачи, и не нужно надеяться, что кто-то другой целиком сделает это за вас. При постановке проблемы первостепенное внимание должно быть уделено выяснению цели исследования; принимаемая математическая модель явления не есть что-то однозначное, раз навсегда связанное с этим явлением, а зависит от цели исследования. Прежде чем выписывать дифференциальные уравнения, выбирать метод решения и обращаться к ЭВМ, стоит подумать, а не будут ли бесполезны все результаты вычислений? В то же время надо воспринимать как должное, что большая часть результатов вычислений будет выброшена сразу же после их получения. Дело в том, что производимая работа зачастую носит исследовательский характер и трудно заранее предсказать, что и в какой форме следует получить, на каком пути нужно искать численное решение задачи. Цель исследования и описание проблемы обычно уточняются в процессе контактов представителей конкретных наук или руководства организаций (заказчиков) и математиков (исследователей или исполнителей).

3. Успех в прикладной науке требует широкой математической подготовки, поскольку только такая подготовка может обеспечить приспособляемость к непрерывно меняющимся типам задач, предъявляемых к решению. Одной из причин необходимости изучения на первый взгляд «бесполезных» для практики разделов математики является достижение более уверенного и более свободного владения «нужными» разделами математики.

При построении и анализе математических моделей привычка математика «докапываться до конца», подвергать все сомнению, обусловленная его строгим математическим образованием, часто не менее важна, чем интуиция и соображения здравого смысла. Типичное для человека с математическим образованием стремление к общности охвата различных явлений часто помогает выделить наиболее существенные черты явления и отбросить второстепенные.

4. Не следует думать, что совершенное знание математики, численных методов и навыки работы с ЭВМ позволяют сразу решить любую прикладную математическую задачу. Во многих случаях требуется «доводка» методов, приспособление их к решению конкретных задач. При этом типична обстановка, когда используются методы, применение которых теоретически не обосновано, или теоретические оценки погрешности численного метода неприемлемы для практического использования вследствие их громоздкости; при выборе метода решения задачи и анализе результатов приходится полагаться на опыт предшествующего решения задач, на интуицию и сравнение с экспериментом и при этом приходится отвечать за достоверность результата. Поэтому для успеха в работе необходимы развитое неформальное мышление, умение рассуждать по аналогии, дающие основания ручаться за достоверность результата там, где с позиций логики и математики, вообще говоря, ручаться нельзя.

В рассматриваемом вопросе есть и другая сторона. При численном решении конкретных трудных задач, возникающих в других областях знаний, математик действует как естествоиспытатель, полагаясь во многом лишь на опыт и «правдоподобные» рассуждения. Крайне желательно, чтобы такая эмпирическая работа подкреплялась теоретическими разработками методов, аккуратной проверкой качества методов на контрольных задачах с известным решением или частным сравнением с экспериментом. При длительном продвижении в каком-то направлении без такого подкрепления может теряться перспектива работы, уверенность в правильности получаемых результатов. Известное высказывание, что хороший теоретик может истолковать в желаемом направлении любые результаты как расчетов, так и эксперимента, содержит большую долю истины.

5. После завершения расчетов наступает этап использования результатов вычислений в практической деятельности, или, как часто говорят, этап внедрения результатов. Правильнее будет сказать, что подготовка к использованию результатов начинается уже с анализа постановки задачи и в процессе ее решения и, по существу, все моменты решения задачи и внедрения результатов неразрывно связаны между собой; в процессе формулирования задачи и ее решения заказчик и исполнитель взаимно уточняют постановку задачи и тем самым подготавливают почву для приложения полученных результатов. Поскольку математика в сочетании с ЭВМ используется в самых разнообразных областях, то часто приходит-

ся иметь дело с заказчиками, не имеющими опыта применения ЭВМ. В процессе контакта с такими «начинающими» заказчиками особенно важно преодолеть их первоначальное недоверие к вторжению математики в их области исследования; результаты вычислений будут использоваться только тогда, когда заказчик осмыслит их со своих позиций и убедится в том, что их действительно можно и нужно использовать. При правильном подходе к взаимным контактам к концу процесса решения задачи «начинающий» заказчик приходит к пониманию, что ЭВМ и математика могут дать ему не все, но довольно много, а «начинающий» математик — к пониманию того, что он дает заказчику кое-что, но далеко не все нужное для реального решения задачи.

Большое значение имеет наглядность, доступность представления заказчику промежуточных и окончательных результатов исследования: таблицы, графики, вывод информации на экран: нельзя предполагать наличия или требовать от заказчика большого объема знаний, чем это требуется существом дела. Целесообразнее, чтобы биолог использовал свое умение дифференцировать для построения и исследования математической модели, а не для оценки погрешности метода численного интегрирования.

Математик должен принять во внимание образование и психологию людей, применяющих разработанные им методы и программы. Например, простейшая программа численного интегрирования, предназначенная для широкого круга нематематиков, использующих ЭВМ в своих конкретных исследованиях, должна быть рассчитана на человека, потолок математических знаний которого находится на интуитивном понимании того, что интеграл — это площадь. Чтобы не затруднять пользователя, в описании простейших программ даже ничего не говорится о точности результата. Предполагается, что пользователя удовлетворит невысокая точность результата, и программа реализуется, например, так, чтобы в большинстве случаев относительная погрешность результата не превосходила 1% (так называемая графическая точность).

6. Существенным моментом в прикладной работе является необходимость получения результатов в установленный срок. Заказчик, для которого проводятся исследования, расчеты, часто ограничен сроком завершения исследований и принятия решения на их основе. Если исследования не будут завершены к сроку, то решение все равно будет принято, но на основе более грубого, эмпирического или просто «волевого» подхода. Потерянное в таком случае доверие со стороны заказчика часто бывает невозможно восстановить.

В такой ситуации лучше найти по возможности удовлетворительное решение задачи, но в срок, чем получить полное решение задачи к тому времени, когда оно станет бесполезным. Поэтому, в частности, целесообразно начинать исследование новых задач с рассмотрения простейших моделей, применяя при численном решении испытанные методы.

7. Также существенным моментом в прикладной работе является то обстоятельство, что работа, как правило, проводится коллективом. Одна из причин этого состоит в том, что построение математической модели, выбор метода решения, непосредственное общение с ЭВМ и анализ результатов требуют различных знаний и квалификации. Другая причина кроется в упомянутой уже необходимости решения задачи в установленный срок. Это требование приводит к необходимости распараллеливания даже однотипной работы между большим числом исполнителей, например путем независимого написания различных блоков программы отдельными исполнителями. Параллельно могут идти отработка различных методов на модельных задачах, обсчет упрощенных моделей, подготовительная работа по написанию окончательной программы решения задачи.

Можно привести много реальных примеров неудачного решения больших вычислительных задач и работ по созданию программного обеспечения, вызванных следующей причиной. Распределение обязанностей между исполнителями не было в достаточной степени формализовано, т.е. не было выдано однозначного описания окончательного результата работы каждого исполнителя. В результате или основная доля времени уходила на непрерывное согласование отдельных частей работы, или после истечения существенного промежутка времени оказывалось, что эти части работы не стыкуются. Поэтому организаторские способности ученого, осуществляющего общее руководство решением задачи, зачастую не менее важны, чем его математические способности.

Приведенные выше рассуждения в определенной степени иллюстрируют специфику работы в области прикладной математики и показывают, что специалисты в этой области кроме широкой математической эрудиции должны обладать также другими важными свойствами человеческого интеллекта и характера.

Погрешность результата численного решения задачи



В этой главе объясняются источники возникновения погрешности решения задачи, даются основные правила задания приближенных величин и оценивается погрешность как простейших, так и более сложных функций от приближенно заданных величин.

В дальнейшем конкретные оценки этой главы по существу не используются, но сам разговор о них необходим для понимания реальной обстановки, в которой используются рассматриваемые в книге методы решения задач.

§ 1. Источники и классификация погрешности

Погрешность решения задачи обуславливается следующими причинами:

- 1) математическое описание задачи является неточным, в частности неточно заданы исходные данные описания;
- 2) применяемый для решения метод часто не является точным: получение точного решения возникающей математической задачи требует неограниченного или неприемлемо большого числа арифметических операций; поэтому вместо точного решения задачи приходится прибегать к приближенному;
- 3) при вводе данных в машину, при выполнении арифметических операций и при выводе данных производятся округления.

Погрешности, соответствующие этим причинам, называют:

- 1) *неустранимой погрешностью*,
- 2) *погрешностью метода*,
- 3) *вычислительной погрешностью*.

Часто неустранимую погрешность подразделяют на две части:

- а) *неустранимой погрешностью* называют лишь погрешность, являющуюся следствием неточности задания числовых данных, входящих в математическое описание задачи;
- б) погрешность, являющуюся следствием несоответствия математического описания задачи реальности, называют, соответственно, *погрешностью математической модели*.

Дадим иллюстрацию этих определений. Пусть у нас имеется маятник (рис. 1.1.1)¹⁾, начинающий движение в момент $t = t_0$. Требуется предсказать угол отклонения φ от вертикали в момент t_1 .

Дифференциальное уравнение, описывающее колебание этого маятника, берется в виде

$$l \frac{d^2 \varphi}{dt^2} + g \sin \varphi + \mu \frac{d\varphi}{dt} = 0, \quad (1)$$

где l — длина маятника, g — ускорение силы тяжести, μ — коэффициент трения.

Как только принимается такое описание задачи, решение уже приобретает неустранимую погрешность, в частности, потому, что реальное трение зависит от скорости не совсем линейно; другой источник неустранимой погрешности состоит в погрешностях определения $l, g, \mu, t_0, \varphi(t_0), \varphi'(t_0)$. Название этой погрешности — «неустранимая» — соответствует ее существу: она неконтролируема в процессе численного решения задачи и может уменьшиться только за счет более точного описания физической задачи и более точного определения параметров. Дифференциальное уравнение (1) не решается в явном виде; для его решения требуется применить какой-либо численный метод. Вследствие этой причины и возникает погрешность метода.

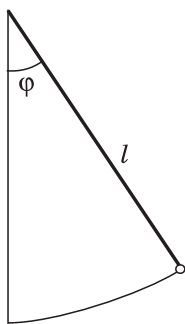


Рис. 1.1.1

Вычислительная погрешность может возникнуть, например, из-за конечности количества разрядов чисел, участвующих в вычислениях.

Введем формальные определения.

Пусть I — точное значение отыскиваемого параметра (в данном случае — реальный угол отклонения маятника φ в момент времени t_1), \tilde{I} — значение этого параметра, соответствующее принятому математическому описанию (в данном случае — значение $\varphi(t_1)$ решения уравнения (1)), \tilde{I}_h — решение задачи, получаемое при реализации численного метода в предположении отсутствия округлений, \tilde{I}_h^* — приближение к решению задачи, получаемое при реальных вычислениях. Тогда

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \tilde{I} - I && \text{— неустранимая погрешность,} \\ \rho_2 &= \tilde{I}_h - \tilde{I} && \text{— погрешность метода,} \\ \rho_3 &= \tilde{I}_h^* - \tilde{I}_h && \text{— вычислительная погрешность.} \end{aligned} \quad (2)$$

¹⁾ Тройная нумерация рисунков и формул указывает главу, параграф, номер формулы или рисунка; двойная, применяемая только для формул, — параграф и номер (в данной главе); одинарная, применяемая также только для формул, — только номер (в данном параграфе).

Полная погрешность $\rho_0 = \tilde{I}_h^* - I$, равная разности между реально получаемым и точным решениями задачи, удовлетворяет равенству

$$\rho_0 = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3. \quad (3)$$

Во многих случаях под термином *погрешность* того или иного вида понимают не рассмотренные выше разности между приближениями, а некоторые меры близости между ними. Например, в скалярном случае полагают

$$\rho_0 = \left| \tilde{I}_h^* - I \right|, \quad \rho_1 = \left| \tilde{I} - I \right|, \quad \rho_2 = \left| \tilde{I}_h - \tilde{I} \right|, \quad \rho_3 = \left| \tilde{I}_h^* - \tilde{I}_h \right|;$$

при таких обозначениях вместо (3) получаем

$$\rho_0 \leq \rho_1 + \rho_2 + \rho_3. \quad (4)$$

В других случаях решение I и приближения \tilde{I} , \tilde{I}_h , \tilde{I}_h^* оказываются элементами некоторых функциональных пространств, часто различных. Например, \tilde{I} может быть элементом пространства F непрерывных на $[0, 1]$ функций, а \tilde{I}_h — элементом пространства F_h сеточных функций f_h , определенных в точках $x_n = nh$, $n = 0, 1, \dots, h^{-1}$; h^{-1} — целое. Тогда в качестве меры погрешности вводят некоторую меру близости $\rho(z_1, z_2)$, где z_1 и z_2 могут быть элементами как одного, так и различных пространств. Требования на эту меру близости — возможность принять ее за естественную меру погрешности и выполнение неравенства треугольника

$$\rho(z_1, z_3) \leq \rho(z_1, z_2) + \rho(z_2, z_3) \quad (5)$$

при любых $z_1, z_2, z_3 \in F, F_h$. При этом не накладывается условие: если $\rho(z_1, z_2) = 0$, то $z_1 \equiv z_2$; таким образом, функция $\rho(z_1, z_2)$ не обязательно является расстоянием в некотором метрическом пространстве.

Например, можно положить

$$\rho(f_1, f_2) = \max_{0 \leq n \leq h^{-1}} |f_1(nh) - f_2(nh)|$$

независимо от того, каким пространствам принадлежат f_1 и f_2 .

Может возникнуть такой вопрос по поводу проблемы исследования неустранимой погрешности: зачем изучать неустранимую погрешность решения задачи, если она «неустранима»? По крайней мере такая точка зрения кажется оправданной, если математик получает для численного решения задачи уже готовые уравнения, не участвуя в обсуждении физической постановки задачи.

Это возражение нельзя признать разумным. Часто математик сам занимается исследованием постановки задачи, анализом и упрощением рассматриваемых уравнений. Поскольку все явления в природе взаимосвязаны, в принципе невозможно математически точно описать никакой реальный процесс, происходящий в природе. Однако анализ влияния различных факторов на погрешность решения может позволить получить

простейшее описание процесса с допустимой погрешностью. Обычно математик имеет представление о требуемой окончательной точности результата, и, исходя из этого, он может производить необходимые упрощения исходной задачи.

Если математик не участвует в обсуждении физической постановки задачи, то представление о величине неустранимой погрешности ему все равно необходимо по следующей причине. При решении большинства задач нет особого смысла применять метод решения задачи с погрешностью, существенно меньшей, чем величина неустранимой погрешности. Поэтому, имея представление о величине неустранимой погрешности, можно разумно сформулировать требования к точности результата численного решения задачи.

Непомерные требования заказчика к точности результата часто вызваны тем, что он имеет преувеличенные представления о возможностях ЭВМ и поэтому серьезно не продумывает, что все-таки ему нужно.

Такие требования часто снимаются в процессе обсуждения задачи на основе следующих соображений:

1) при более детальном подходе к изучению задачи в целом оказывается, что столь высокая точность и не нужна;

2а) математическая модель явления настолько груба, что требовать столь высокую точность бессмысленно;

2б) параметры модели не могут быть определены с высокой точностью;

3) заказчику нужен вообще не количественный, а качественный результат, например такого типа: будет ли работать данное устройство в заданном режиме или нет.

Разберем некоторые встретившиеся нам реальные задачи. К решению была предъявлена система интегральных уравнений с сильно осциллирующими ядрами с числом перемен у ядер порядка $\lambda^{-1} = N = 10^6$. Требовалось получить решение с относительной погрешностью (определение см. далее) порядка 10^{-6} . Эта система описывала режим работы некоторого оптического устройства. Решение такой системы интегральных уравнений непомерно сложно даже для современных ЭВМ, поэтому был предпринят ее подробный анализ. Оказалось, что относительные погрешности характеристик системы, обусловленные технологией изготовления устройства, являются величинами порядка 10^{-4} , поэтому нет смысла решать задачу со столь высокой точностью, как требовалось вначале. В результате требования к точности искомого решения были снижены до относительной погрешности 10^{-4} . Однако и такая точность все равно еще требовала непомерных затрат машинного времени.

Дальнейший анализ задачи показал, что по существу заказчика интересовал ответ только на один вопрос — будет ли данное устройство устойчиво функционировать или нет?

Естественно было предположить две возможности:

1) при малых значениях параметра $\lambda = 1/N$ решение плавно зависит от этого

параметра, поэтому при λ , меньших достаточно малого λ_0 , система будет работать в одном режиме — или всегда устойчиво, или всегда неустойчиво;

2) при малых значениях λ решение существенно меняется при изменении этого параметра, и интервалы значений параметра λ , где режим работы устойчив, перемежаются с интервалами значений, где режим работы неустойчив.

В связи с этим были предприняты расчеты при довольно крупном значении $\lambda = 1/10$ с последующим уменьшением значений λ с тем, чтобы понять, какая из двух указанных выше возможностей реализуется.

Расчеты показывали, что при изменении λ в пределах от 10^{-1} до 10^{-2} имел место устойчивый режим работы устройства и был сделан вывод (подтвержденный потом экспериментально, после конструирования реального устройства) об устойчивости его работы при $\lambda = 10^{-6}$. В случае второй возможности, вследствие грубости изготовления устройства, вряд ли удалось бы вообще исследовать вопрос об устойчивости его работы при $\lambda = 10^{-6}$.

Другой, на первый взгляд выглядящий курьезным, но на самом деле весьма типичный пример реальной ситуации. Перед математиками была поставлена задача создания алгоритма и программы быстрого (менее чем за 1 с машинного времени) вычисления интегралов специального вида с относительной погрешностью 10^{-4} . Эта задача была ими успешно решена, т. е. был разработан метод вычисления таких интегралов и на его основе создана стандартная программа. В свою очередь исследователи, поставившие задачу, не скупясь на затраты машинного времени, для проверки качества предложенного математиками метода и надежности программы сами вычислили приближенно один из таких интегралов с относительной погрешностью, по их мнению, 10^{-6} . Но оказалось, что все попытки решить эту, так называемую *тестовую* задачу с погрешностью, лучшей, чем 10^{-2} , с помощью созданной математиками программы оканчивались неудачей. Возникло предположение о погрешности в самой тестовой задаче. Оказалось, что число π было взято равным 3,14, что вносило в тестовый пример *неустранимую* погрешность, которая, естественно, не могла быть устранена никакими усилиями математиков, создававших алгоритм и программу.

§ 2. Запись чисел в ЭВМ

Современные ЭВМ оперируют с числами, записанными в одной из приведенных ниже форм.

Первая форма записи — с фиксированной запятой: все числа в ЭВМ имеют модуль, меньший 1; число знаков после запятой фиксировано. Таким образом, машина оперирует с числами

$$x = \pm \sum_{k=1}^t \alpha_k q^{-k} = \pm(\alpha_1, \dots, \alpha_t); \quad (1)$$

здесь q — целое — основание системы счисления, $\alpha_1, \dots, \alpha_t$ — целые в пределах $0 \leq \alpha_k < q$.

[. . .]

Распространенное мнение о всемогуществе современных ЭВМ часто порождает впечатление, что математики избавились почти от всех хлопот, связанных с численным решением задач, и разработка новых методов для их решения уже не столь существенна. В действительности дело обстоит иначе, поскольку потребности эволюции, как правило, ставят перед наукой задачи, находящиеся на грани ее возможностей. Расширение возможностей приложения математики обусловило математизацию химии, экономики, биологии, геологии, географии, психологии, экологии, метеорологии, медицины, конкретных разделов техники и др. Суть математизации состоит в построении математических моделей процессов и явлений и в разработке методов их исследования.

