# Компьютерная обработка результатов измерений

## Лекция 4. Системы уравнений. Интегрирование. Дифференцирование.

Емельянов Эдуард Владимирович

Специальная астрофизическая обсерватория РАН
Лаборатория физики оптических транзиентов

# Системы уравнений

**Система линейных уравнений** для $n$ неизвестных имеет вид:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n & = b_1; \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n & = b_2; \\ \qquad\qquad \ldots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = b_n. \end{cases}$$

Если существует вектор–столбец $\mathbf{x}$, обращающий выражение $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ в тождество, говорят, что $\mathbf{x}$ является **решением** данной системы уравнений. $\det A \equiv |\mathbf{A}| \neq 0$.

# Методы решений

$\delta = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}$. Приближенные методы: $\min(\delta)$. Точные методы: $\delta = 0$.

## Матричный метод

$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{E}$. Нахождение обратной матрицы:

- с помощью присоединенной: $(\mathbf{A}|\mathbf{E}) \Longrightarrow (\mathbf{E}|\mathbf{A}^{-1})$;
- $\mathbf{A}^{-1} = \dfrac{\mathrm{adj}\,\mathbf{A}}{|\mathbf{A}|}$, присоединенная матрица $\mathrm{adj}\,\mathbf{A}$ является транспонированной матрицей алгебраических дополнений $((-1)^{i+j}M_{ij}$, $M_ij$ – соответствующий дополнительный минор — определитель матрицы с вычеркнутыми $i$-й строкой и $j$-м столбцом).
- и т.д., и т.п.

Формулы Крамера: $x_j = |A_j|/|A|$, $A_j$ получается из $A$ заменой $j$-го столбца на $\mathbf{b}$.

# Методы решений

## Метод Гаусса

$$\mathbf{A}_d\mathbf{x} = \boldsymbol{\beta}, \quad \mathbf{A}_d = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \cdots & \alpha_{1m} \\ 0 & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{mm} \end{pmatrix}.$$

Прямой ход — преобразование к диагональной форме:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \cdots & \alpha_{1m} & \beta_1 \\ 0 & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2m} & \beta_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{mm} & \beta_m \end{array}\right).$$

Обратный ход — последовательное нахождение $x_m, x_{m-1}, \ldots, x_1$.
$N \propto n^3$ — прямой, $N \propto n^2$ — обратный ход.

# Методы решений

## Метод Зейделя

$$\mathbf{B}\mathbf{x}_{n+1} + \mathbf{C}\mathbf{x}_n = \mathbf{b},$$

где

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\ 0 & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Отсюда получаем

$$\mathbf{x}_{n+1} = -\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{x}_n + \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}.$$

# Методы решений

## LU-метод

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U},$$

где

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & l_{m2} & l_{m3} & \cdots & l_{mm} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1m} \\ 0 & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Прямой ход: $\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{x} \equiv \mathbf{L} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{b}$, находим $\mathbf{y}$, из $\mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$ находим $\mathbf{x}$.

$$\begin{cases} l_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{s=1}^{j-1} l_{is} u_{sj}, & i \geqslant j; \\ u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}} \left( a_{ij} - \sum\limits_{s=1}^{j-1} l_{is} u_{sj} \right), & i < j. \end{cases}$$

LU-разложение возможно для матриц с преобладанием диагональных элементов

# Методы решений

## Разложение Холецкого

$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}^T$, либо $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{U}$, где $\mathbf{L}$ – нижняя треугольная матрица со строго положительными элементами на диагонали, $\mathbf{U}$ – верхняя треугольная матрица. Разложение Холецкого всегда существует и единственно для любой симметричной (относительно главной диагонали) положительно-определенной матрицы (все диагональные миноры положительны).

$$\begin{cases} l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum\limits_{s=1}^{i-1} l_{is}^2}; \\ l_{ij} = \frac{1}{l_{ii}}\left(a_{ij} - \sum\limits_{s=1}^{j-1} l_{is} l_{js}\right), \quad j < i. \end{cases}$$

Прямой и обратный ходы аналогичны LU-разложению.

# Методы решений

Если $\mathbf{A}$ содержит $m$ строк и $n$ столбцов, то:

- $m = n$ квадратная матрица, возможно существование точного решения;
- $m < n$ недоопределенная система, решение возможно лишь в общем виде с по крайней мере $n - m$ свободных коэффициентов;
- $m > n$ переопределенная система, приближенное решение которой находится при помощи метода наименьших квадратов (в случае линейной зависимости строк данной системы может существовать и точное решение).

# Методы решений

### Метод наименьших квадратов ($m > n$)

$\mathbf{x} = \mathbf{A}\backslash\mathbf{b}$, $S = \sum_i(\sum_j a_{ij}x_j - b_i)^2$, $\dfrac{\partial S}{\partial x_j} = 0 \Longrightarrow \mathbf{Cx} = \mathbf{d}$, где $c_{kj} = \sum_i a_{ik}a_{ij}$, $k, j = \overline{1, n}$, $d_k = \sum_i a_{ik}b_i$. Т.о. $\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$, $\mathbf{d} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$.

### Метод простой итерации

$\mathbf{x} = \mathbf{Bx} + \mathbf{c}$, $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{Bx}_n + \mathbf{c}$.
Сложностью метода простой итерации при решении матриц больших размерностей является особое свойство таких матриц — существование *почти собственных значений*, $\lambda$: $||\mathbf{Ax} - \lambda\mathbf{x}|| \leqslant \varepsilon||\mathbf{x}||$ при $||\mathbf{x}|| \neq 0$.

# Число обусловленности матрицы

## Оценка ошибки решения

Пусть $\mathbf{x}'$ – приближенное решение. Абсолютная и относительная ошибки: $||\mathbf{x}-\mathbf{x}'||$ и ${||\mathbf{x}-\mathbf{x}'||}/{||\mathbf{x}||}$. Нам известна невязка $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$:

$$\mathbf{r} = A\mathbf{x} - A\mathbf{x}' = A(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \Longrightarrow ||\mathbf{x}-\mathbf{x}'|| = ||A^{-1}\mathbf{r}|| \leqslant ||A^{-1}||\,||\mathbf{r}||,$$

а т.к. $||\mathbf{b}|| \leqslant ||A||\,||\mathbf{x}||$, ${1}/{||\mathbf{x}||} \leqslant {||A||}/{||\mathbf{b}||}$:

$$\frac{||\mathbf{x}-\mathbf{x}'||}{||\mathbf{x}||} \leqslant ||A^{-1}||\,||\mathbf{r}||\,\frac{||A||}{||\mathbf{b}||} = k(A)\frac{||\mathbf{r}||}{||\mathbf{b}||}.$$

**Число обусловленности**: $k(A) = ||A||\,||A^{-1}||$. Чем оно больше, тем больше флуктуации $\mathbf{x}$ влияют на общее решение. У хорошо обусловленных матриц $K(A) \equiv 1$ (напр., ортогональные матрицы, у которых $A^T = A^{-1}$).

# Степенные уравнения

**Степенное уравнение** имеет вид $p_n(x) = 0$, где $p_n(x)$ – полином $n$ -й степени вида $p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} C_n x^n$.

## Методы решения

Точные — до третьей степени включительно (в общем случае) и итерационные:

**бисекция** деление пополам отрезка, где находится корень;

**метод хорд** замена полинома хордой, проходящей через точки $(x_1, p_n(x_1))$ и $(x_2, p_n(x_2))$;

**метод Ньютона** имеет быструю сходимость, но требует знакопостоянства $f'(x)$ и $f''(x)$ на выбранном интервале $(x_1, x_2)$.

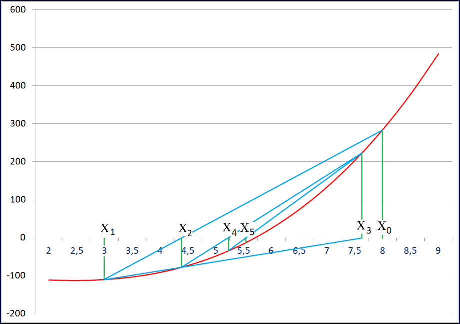
# Бисекция (дихотомия)

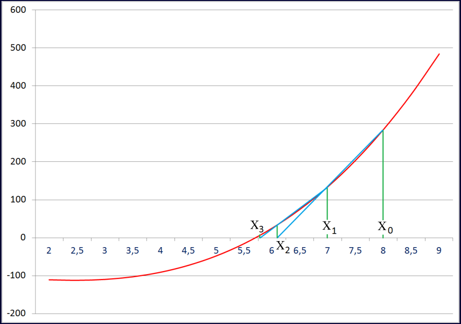

Отрезок делится вплоть до заданной точности $b_n - a_n \leqslant \varepsilon$, корень $x \approx (b_n + a_n)/2$.

Применяется и для поиска значений в упорядоченном ряду.

# Метод хорд (секущих)

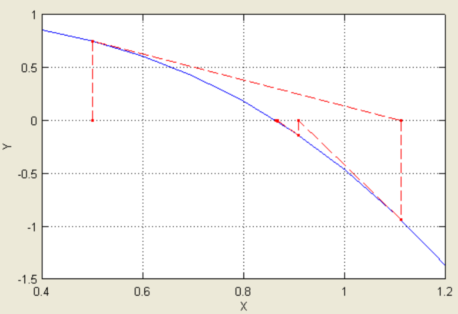
$$x_{i+1} = x_{i-1} + \frac{y_{i-1}\cdot(x_i - x_{i-1})}{y_i - y_{i-1}}.$$

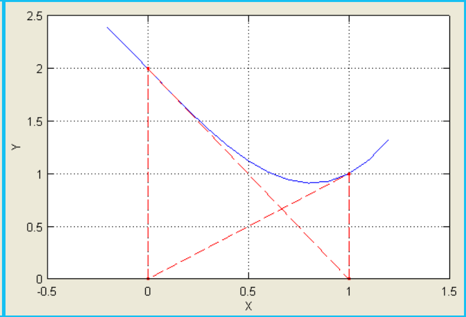


# Метод Ньютона

$$x_{i+1} = x_i + \frac{y_i}{y_i'}.$$



# Численное интегрирование

Для численного решения уравнения $I = \int\limits_a^b f(x)\,dx$ наиболее популярны:

**метод прямоугольников** $I \approx \sum_{i=1}^n f(x_i)[x_i - x_{i-1}]$;

**метод трапеций** $I \approx \sum_{i=1}^n \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}[x_i - x_{i-1}]$;

**метод Симпсона** $\int\limits_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{1}{3}\bigl(f(-1) + 4f(0) + f(1)\bigr) \Longrightarrow$

$$I \approx \frac{b-a}{6n}\left(f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i}) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1})\right).$$

и многие другие.

# Метод прямоугольников

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

$$\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)(x_{i+1}-x_i);$$

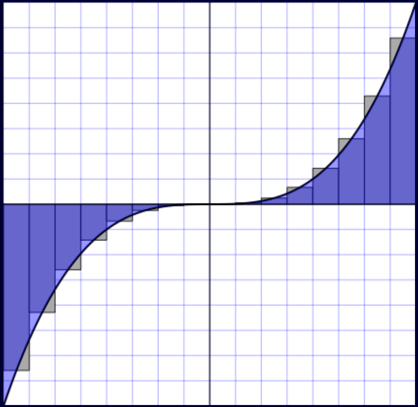
$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i)(x_i-x_{i-1});$$

$$\sum_{i=0}^{n-1} f\Big(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\Big)(x_{i+1}-x_i).$$

Для равномерных сеток:

$$h\sum_{i=0}^{n-1} f_i;\ h\sum_{i=1}^{n} f_i;$$

$$h\Big(\sum_{i=1}^{n-1} f_i + \frac{f_0+f_n}{2}\Big).$$



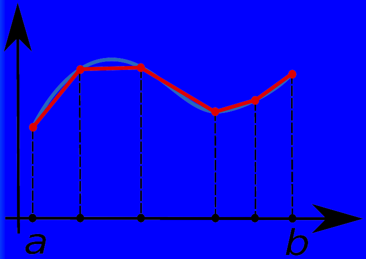
# Метод трапеций

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}(x_{i+1}-x_i).$$

Для равномерных сеток — формула Котеса:

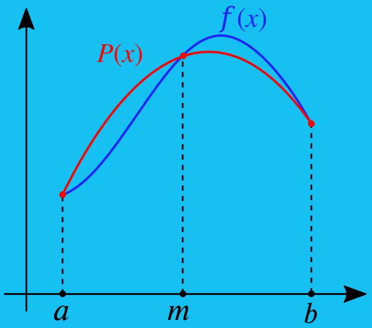
$$\int_a^b f(x)\,dx = h\left(\frac{f_0+f_n}{2}+\sum_{i=1}^{n-1} f_i\right)+E_n(f),$$

$$E_n(f) = -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)h^2, \xi \in [a,b].$$



# Метод Симпсона

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\big(\frac{a+b}{2}\big)\right)$$




Формула Котеса:

$$I \approx \frac{h}{3}\Big(f(x_0)+2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(x_{2i})+4\sum_{i=1}^{N/2} f(x_{2i-1}+f(x_N)\Big).$$

# Численное дифференцирование

Аппроксимация функции интерполяционным многочленом (Ньютона, Стирлинга и т.п.), разделенные разности.

## Аппроксимация многочленом

$$f(x) \approx P_N(x) \quad \Rightarrow \quad f^{(r)}(x) \approx P_N^{(r)}(x).$$

Полином Ньютона:

$$P_N(x) = \sum_{m=0}^{N} C_x^m \sum_{k=0}^{m} (-1)^{m-k} C_m^k f(k).$$

Полином Лагранжа:

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^{N} y_k \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\dots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\dots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\dots(x_k-x_n)}.$$

А также: интерполяция кубическими сплайнами, разложение по базису тригонометрических функций и т.п.

## Разделенные разности

В нулевом приближении можно заменить производную $f^{(n)}$ разделенной разностью $n$-го порядка.

$$f(x_0;\ x_1;\ \ldots;\ x_n) = \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{\prod\limits_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n} (x_j - x_i)}.$$

В частности:

$$f(x_0;\ x_1) = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} + \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1},$$

$$f(x_0;\ x_1;\ x_2) = \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_0)} + \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_2)(x_0 - x_1)} \ldots$$

# Дифференциальные уравнения

**Обыкновенные дифференциальные уравнения** (ОДУ) порядка $n$ задаются в виде функции $f(x, y, y', \ldots, y^{(n)}) = 0$.

Разделение переменных:

$$y' = f(x, y) \Longrightarrow \varphi(y)\,dy = \psi(x)\,dx \Longrightarrow y = y_0 + \int\limits_0^x \psi(x)\,dx.$$

ОДУ второго порядка:

$$Ay'' + By' + Cy + Dx = 0.$$

Если $D \equiv 0$, а множители $A$, $B$ и $C$ — константы, имеем однородное ОДУ. $y = \mathfrak{C}_1 \exp(k_1 x) + \mathfrak{C}_2 \exp(k_2 x)$, где $k_1$ и $k_2$ – корни *характеристического уравнения* $Ak^2 + Bk + C = 0$.

# Дифференциальные уравнения

**Дифференциальные уравнения в частных производных** (ЧДУ) для функции $y = y(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ имеют вид

$$f(y, x_1, \ldots, x_n; \frac{\partial y}{\partial x_1}, \ldots; \frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2}, \ldots; \cdots; \frac{\partial^m y}{\partial x_1^m}, \ldots) = 0.$$

Однако, наиболее часто встречаются ЧДУ первого порядка для функции двух переменных $z = z(x, y)$ вида

$$f(z, x, y, \frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}) = 0.$$

# Дифференциальные уравнения

Нелинейные дифференциальные уравнения содержат некоторые производные функции $y$ не как простые множители, а как аргументы функций (чаще всего — степенных), например: $(y'')^3 - \sin y' = \mathrm{tg}(xy)$. Обычные физические задачи никогда не приводят к таким уравнениям, однако, и их решения вполне можно найти при помощи численных методов.

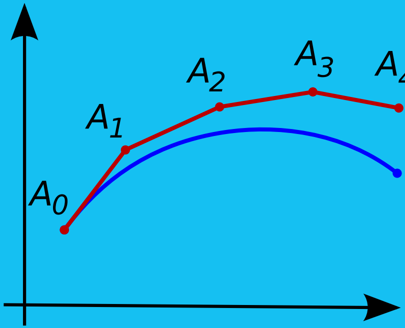
## Методы решения

Рунге–Кутты, Эйлера, Адамса, конечных разностей и т.п.
Дифференциальные уравнения высших порядков сводят путем замены переменных к системе ОДУ первого порядка.

## Метод Эйлера

Аппроксимация интегральной кривой кусочно-линейной функцией. Задача Коши в простейшем виде: $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, $y|_{x=x_0} = y_0$. Решение ищется на интервале $(x_0, b]$.

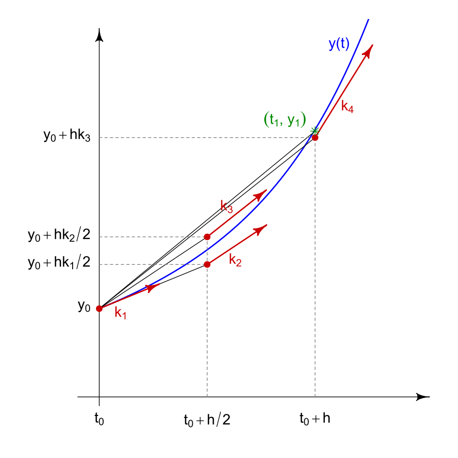
$$y_i = y_{i-1} + (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1}, y_{i-1}), \qquad i = \overline{1, n}.$$



## Метод Рунге-Кутты

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right), \qquad \text{где}$$

$k_1 = f(x_n, y_n)$, $k_2 = f\left(x_n + {}^h/_2, y_n + {}^h/_2 k_1\right)$, $k_3 = f\left(x_n + {}^h/_2, y_n + {}^h/_2 k_2\right)$, $k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3)$ ($h$ – шаг сетки по $x$).



# Спасибо за внимание!

**mailto**

eddy@sao.ru
edward.emelianoff@gmail.com