

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
"ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ"

О. С. МАЗМАНІШВІЛІ

Ч И С Е Л Ь Н І М Е Т О Д И
НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК ДО ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

Рекомендовано Міністерством освіти і науки України
як навчальний посібник для студентів спеціальностей
7.080201 "Інформатика" та 7.080202 "Прикладна математика"

Затверджено Редакційно-видавничою
Радою НТУ "ХПІ"

Харків НТУ "ХПІ" 2010

ББК 22.171

М12

УДК 519.2

Рецензенти :

Є.В. Бодянський, д-р техн. наук, проф., Харківський національний університет радіоелектроніки

Г.І. Загарій, д-р техн. наук, проф., Харківська державна академія залізничного транспорту

*Гриф привласнено Міністерством освіти і науки України,
лист № @@@@ від """"*

М12 Чисельні методи: Навчальний посібник до лабораторних занять /
Мазманішвілі О.С. — Харків: НТУ "ХП", 2010. — 219 с.
— Укр. мова.

ISBN 966–593–374–8

Підготовлений для виконання практикуму з курсу "Чисельні методи". У посібнику систематизовано матеріали з основних тем дисципліни: теоретичні відомості, необхідні для розв'язування задач, приклади таких розв'язувань.

Призначений для студентів, що навчаються за спеціальністю "Прикладна математика". Буде корисний студентам фізико-математичних, інженерно-технічних і економічних спеціальностей університетів, а також фахівцям.

Подготовлено для выполнения практикума по курсу "Численные методы". В пособии систематизированы материалы по основным темам дисциплины: теоретические сведения, необходимые для решения задач, примеры таких решений.

Предназначено для студентов, обучающихся по специальности "Прикладная математика". Будет полезно студентам физико-математических, инженерно-технических и экономических специальностей университетов, а также специалистам.

This textbook contains tasks on Numerical Methods sorted according to the topics of the course: theoretical information that is necessary for solving the tasks, examples of the solutions.

This textbook is created for students on Applied Mathematics. It can also be useful for students on Mathematics, Physics, Engineering and Economy.

Іл. 48. Табл. 12. Бібліогр. 44 назв.

ББК 22.171

ISBN 966–593–374–8

© О.С. Мазманішвілі, 2010 р.

Зміст

Вступ	6
1. Наближене обчислення функцій	7
1.1. Основні теоретичні відомості	7
1.2. Інтерполяційний поліном Лагранжа	9
1.3. Інтерполяційний поліном Ньютона	11
1.4. Обернене інтерполювання	12
1.5. Сплайн-інтерполювання	12
1.6. Інтерполювання в таблицях	13
1.7. Математичне опрацювання даних	14
1.8. Метод найменших квадратів	16
1.9. Лінійна та квадратична апроксимація	18
1.10. Поліноміальна апроксимація	21
1.11. Приближення тригонометричними багаточленами	21
1.12. Вибір виду емпіричної формули	22
1.13. Двопараметрична апроксимація	24
1.14. Виявлення та виключення похибок із серії спостережень	25
1.15. Лінійне згладжування даних	27
1.16. Завдання на лабораторну роботу	30
1.17. Завдання для перевірки	32
2. Знаходження нулів функцій	34
2.1. Основні теоретичні відомості	34
2.2. Метод половинного ділення	35
2.3. Метод хорд	35
2.4. Метод Ньютона	37
2.5. Комбінований метод хорд і дотичних	38
2.6. Метод ітерацій (метод послідовних наближень)	39
2.7. Приклад знаходження нулів нелінійного рівняння	40
2.8. Розв'язування систем нелінійних рівнянь	42
2.9. Метод Ньютона для системи двох рівнянь	44
2.10. Нулі поліномів	46
2.11. Загальні властивості алгебраїчних рівнянь	48
2.12. Чисельне знаходження нулів поліномів	50
2.13. Завдання на лабораторну роботу	53
2.14. Завдання для перевірки	55
3. Чисельні методи лінійної алгебри	56
3.1. Основні теоретичні відомості	56
3.2. Чисельні методи розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР)	56
3.3. Метод Крамера розв'язування СЛАР	57
3.4. Метод Гаусса з вибором головного елемента	58

3.5.	Обчислення визначника і оберненої матриці за допомогою прямих методів розв'язування СЛАР	61
3.6.	Метод послідовних наближень	61
3.7.	Метод Зейделя розв'язання СЛАР	64
3.8.	Порівняння методів знаходження розв'язку СЛАР	66
3.9.	Ітераційне уточнення розв'язку СЛАР	66
3.10.	Знаходження власних чисел і векторів матриці	67
3.11.	Чисельне визначення функції від матриці	69
3.12.	Операції з блочними матрицями	74
3.13.	Операції з трикутними матрицями	79
3.14.	Однорідні системи лінійних алгебраїчних рівнянь	81
3.15.	Завдання на лабораторну роботу	84
3.16.	Завдання для перевірки	86
4.	Чисельне диференціювання таблично заданої функції	87
4.1.	Основні теоретичні відомості	87
4.2.	Алгоритми диференціювання таблично заданої функції	87
4.3.	Диференціювання заданої функції за допомогою інтерполяції	88
4.4.	Алгоритми диференціювання за допомогою інтерполяції	88
4.5.	Алгоритми диференціювання за допомогою апроксимації	91
4.6.	Знаходження вищих похідних аналітичної функції	93
4.7.	Завдання на лабораторну роботу	95
4.8.	Завдання для перевірки	96
5.	Чисельне інтегрування	98
5.1.	Основні теоретичні відомості	98
5.2.	Квадратурні формули прямокутників	99
5.3.	Метод трапецій	100
5.4.	Метод парабол	100
5.5.	Квадратурні формули Ньютона-Котеса	101
5.6.	Квадратурна формула Чебишева	103
5.7.	Квадратурна формула Гаусса	105
5.8.	Розгорнутий приклад застосування квадратурних алгоритмів	106
5.9.	Обчислення інтегралів з особливостями	110
5.10.	Обчислення інтегралів, підінтегральні функції яких містять ваговий множник	111
5.11.	Комплексновизначені інтеграли	112
5.12.	Двократні та трикратні інтеграли	113
5.13.	Багатократні інтеграли	113
5.14.	Завдання на лабораторну роботу	114
5.15.	Завдання для перевірки	116
6.	Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь	118
6.1.	Основні теоретичні відомості	118
6.2.	Метод Ейлера	119
6.3.	Модифікований метод Ейлера	121
6.4.	Метод Рунге-Кутти	122

6.5.	Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь з автоматичною зміною кроку	125
6.6.	Розв'язування систем звичайних диференціальних рівнянь	126
6.7.	Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь другого та вищих порядків	130
6.8.	Завдання на лабораторну роботу	133
6.9.	Завдання для перевірки	135
7.	Метод Монте-Карло	136
7.1.	Основні теоретичні відомості	136
7.2.	Побудова методу Монте-Карло	136
7.3.	Побудова квадратурних алгоритмів на прикладі задачі оцінки числа π	138
7.4.	Застосування випадкових величин при побудові квадратурних алгоритмів	138
7.5.	Розподіли випадкових величин	140
7.6.	Рівномірно розподілені випадкові числа	141
7.7.	Нормально розподілені випадкові числа	141
7.8.	Основні закони розподілу та моделювання випадкових величин	143
7.9.	Статистичний аналіз датчиків випадкових чисел	147
7.10.	Застосування методу Монте-Карло для обчислення інтегралів	149
7.11.	Обчислення багатократних інтегралів	150
7.12.	Застосування методу Монте-Карло для оцінки об'єму циліндра	153
7.13.	Завдання на лабораторну роботу	156
7.14.	Завдання для перевірки	157
8.	Розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних	159
8.1.	Основні теоретичні відомості	159
8.2.	Параболічні диференціальні рівняння в частинних похідних	159
8.3.	Метод сіток розв'язування параболічного диференціального рівняння в частинних похідних	160
8.4.	Апроксимаційні шаблони для перших та других частинних похідних	162
8.5.	Стійкість кінцево-різницевої схеми для розв'язування параболічного рівняння в частинних похідних	165
8.6.	Похибка методу сіток	166
8.7.	Різницева схема для розв'язування рівняння Шредінгера	167
8.8.	Завдання на лабораторну роботу	169
8.9.	Завдання для перевірки	171
Додаток	173
Д.1.	Фонд залікових завдань для самостійної роботи	173
Д.2.	Фонд завдань для курсової роботи	191
Список літератури	218

Вступ

Пропонований навчальний посібник має дві головні цілі. По–перше, надати студентам зручний для роботи та практично апробований матеріал, для вивчення методів і техніки розв’язування різноманітних обчислювальних задач прикладної математики. По–друге, методи прикладної математики повинні бути обов’язково орієнтовані на сучасний робочий інструмент математика — персональний комп’ютер. У результаті частково видозмінюється навчання ”техніці” обчислень і розширюється сфера застосувань чисельних методів. Тому в практикум включені методи чисельного розв’язання диференціальних рівнянь в частинних похідних, метод Монте–Карло.

Посібник, таким чином, систематизує та організовує навчальний матеріал з практичних аспектів освоєння методів як обчислювальної математики, так і чисельного аналізу. Для зручності роботи, а також можливості самостійного поглибленого вивчення та контролю засвоєного матеріалу, посібник скомпонований з окремих самостійних тем, адаптованих до відповідних розділів дисципліни ”Чисельні методи”. Ці теми містять :

1. Методи наближеного обчислення функцій.
2. Методи знаходження нулів функцій та розв’язування трансцендентних рівнянь.
3. Методи лінійної алгебри (знаходження розв’язків систем лінійних алгебраїчних рівнянь, визначення власних чисел та власних векторів заданої матриці, обчислення аналітичної функції від матриці).
4. Методи чисельного диференціювання таблично заданої функції.
5. Чисельні методи знаходження значень визначених інтегралів.
6. Чисельні методи знаходження розв’язків звичайних диференціальних рівнянь.
7. Метод Монте–Карло.
8. Чисельні методи розв’язування параболічних диференціальних рівнянь у частинних похідних.

У кожному розділі наведені необхідні початкові та довідкові дані, принципи побудови чисельних методів розв’язування відповідних задач, типові алгоритми, сформульовані завдання для самостійної роботи, а також контрольні запитання. Лабораторний практикум ґрунтується на знаннях, що їх отримують студенти в дисциплінах в стандартному обсязі спеціальності ”Прикладна математика”.

Весь матеріал посібника сформовано таким чином, аби він був адаптований до персональних ЕОМ.

Основний матеріал посібника доповнений двома фондами — для самостійної роботи та для контрольних перевірок знань студентів. Цей матеріал може бути корисним при організації навчальних програм різноманітної насиченості, зокрема, для контрольних і самостійних позааудиторних занять, а також курсового проектування.

1. Наближене обчислення функцій

1.1. Основні теоретичні відомості

При проведенні фізичних чи технічних експериментів, обробці даних економічних спостережень та багатьох інших видів робіт виконавець одержує результати у вигляді числових даних. Для зручності роботи дані зводяться у *таблиці*. Тим самим завершується перший етап роботи – *етап доставання та оформлення результатів*. Метою другого етапу – *етапу обробки та прийняття рішення* – є осмислення одержаних числових даних і розробка стратегії подальшої дії.

Функціональні залежності можна подати: *аналітично, графічно та таблично*.

Аналітичний спосіб задання функції (у вигляді формули) відрізняється точністю, лаконічністю, можливістю проведення обчислень для будь-яких значень аргумента і застосуванням різноманітних прийомів дослідження. Але він недостатньо наочний.

Графічний спосіб задання функції дає наочну інформацію про властивості і характер поведінки функції та дозволяє в разі потреби знаходити (приблизно) потрібні чисельні дані. Однак точність такої чисельної інформації невелика.

Табличне задання функції подає готову чисельну інформацію про функцію, яку можна взяти з таблиці, без використання допоміжних вимірювань і обчислень. Таблиці функцій відрізняються простотою, зручністю зберігання (табл. 1.1). Але цей спосіб задання не відрізняється наочністю і достатньою точністю.

Таблиця 1.1 — Таблиця чисельних даних

n	x_n	f_n
0	2,1	-0,71
1	2,1	-0,64
2	2,2	-0,57
...
...
k	x_k	f_k
...
...
$N - 1$	2,8	0,55
N	2,9	0,59

На практиці поширений спосіб оформлення чисельних даних у вигляді *таблиці*, в якій упорядкований для набору значень аргументів x_0, x_1, \dots, x_N заданий відповід-

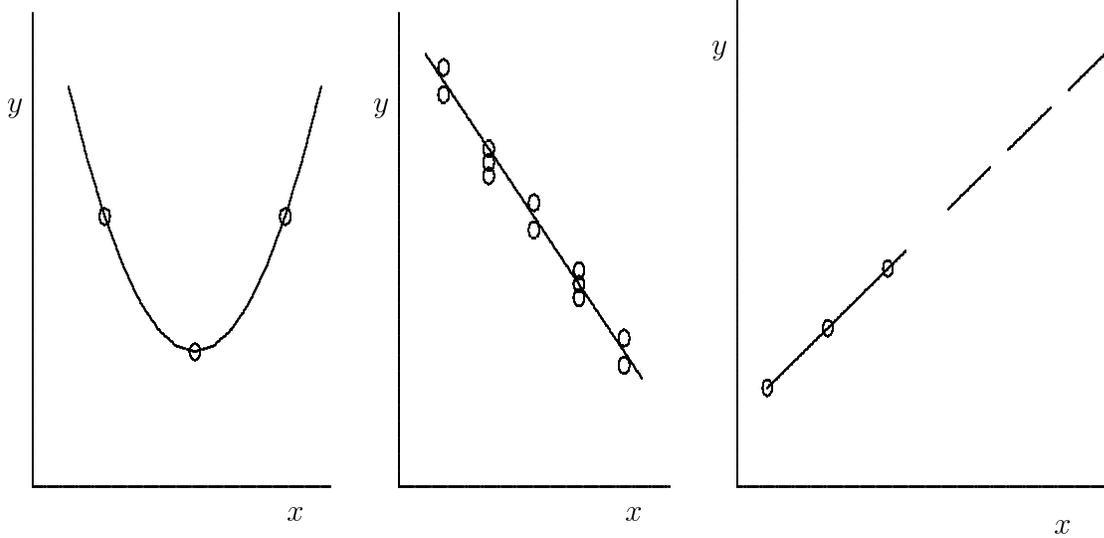


Рисунок 1.1 — Методи обробки чисельних даних: *a* – інтерполяція; *б* – апроксимація; *в* – екстраполяція

ний набір значень функцій $f_0 = f(x_0)$, $f_1 = f(x_1)$, \dots , $f_N = f(x_N)$. Кожна пара значень (x_n, f_n) називається *вузлом*. Для зручності кожний рядок нумерують поточним індексом, як правило, цілим. При такому способі зображення даних відзначають, що функція є *таблично заданою*.

На другому етапі роботи з числовими даними можливі три варіанти обробки: інтерполяція, апроксимація та екстраполяція (рис. 1.1).

Інтерполяція – чисельна процедура, при виконанні якої графік функції, що визначається, проводиться безпосередньо через сукупність заданих вузлів. При цьому в кожному вузлі за номером n значення аргументу і полінома точно дорівнюють заданим x_n і f_n . Інтерполяція застосовується для знаходження значення функції в точках, відмінних від вузлів. Побудова такої функції називається *інтерполюванням*. Найпоширенішою є алгебраїчна інтерполяція, коли за інтерполюючу функцію використовується багаточлен відповідного степеня.

Апроксимація – наближення табличних даних функційною залежністю відповідно вибраному критерію близькості. Апроксимація застосовується для обробки збурених табличних даних або даних одного походження великого об'єму. За апроксимуючі функції намагаються підібрати такі залежності, які адекватно відповідають природі наявних даних.

Екстраполяція – продовження значень вибраної інтерполяційної чи апроксимуючої функції зовні таблично заданого інтервалу. Екстраполяція застосовується в тих випадках, коли ставиться задача отримання прогнозу наперед чи відтворення більш ранніх залежностей.

В результаті вказаних процедур обробки за числовими даними відтворюються *функціональні залежності*, що дозволяють запропонувати певні практичні висновки. У процесі роботи таблиця даних доповнюється і тим самим розширюється. Залежності, отримані на основі попередніх даних, називаються *апріорними*. Функціональні залежності, отримані внаслідок врахування додаткових відомостей, називаються *апостеріорними*.

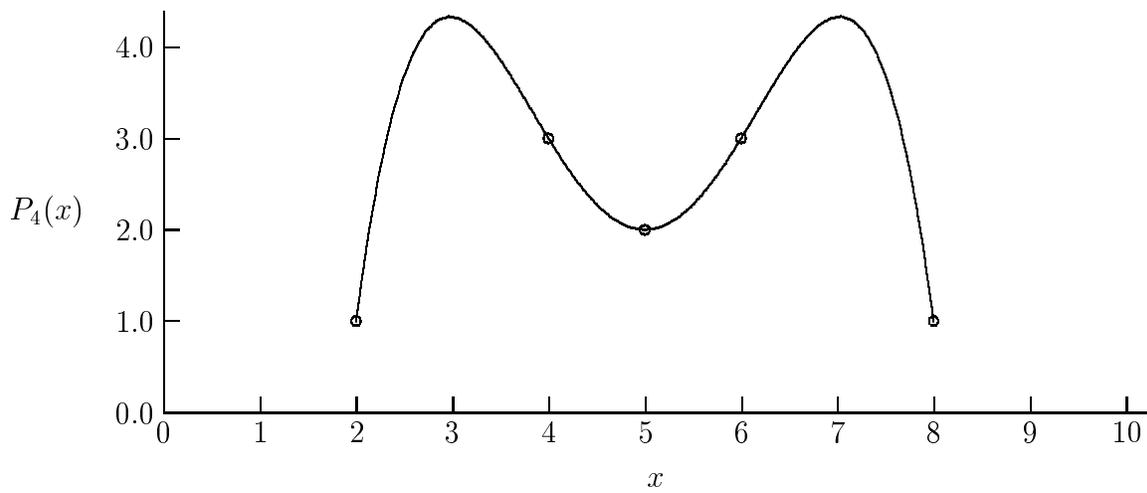


Рисунок 1.3 — Інтерполяційний поліном $P_4(x)$.

Оцінка похибки інтерполяції в поточній точці x визначається виразом

$$R(x) = \frac{M}{(n+1)!} (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_N), \quad M = \max_x |f^{(n+1)}(x)|. \quad (1.2)$$

Приклад

Нехай задані координати 5 вузлів (див. таблицю). Необхідно побудувати інтерполяційний поліном.

n	x_n	$f(x_n)$
0	2,0	1,0
1	4,0	3,0
2	5,0	2,0
3	6,0	3,0
4	8,0	1,0

Розв'язання

Згідно з формулою (1.1) інтерполяційний поліном буде мати степінь $N = 4$.

Запишемо цей поліном в явному вигляді:

$$\begin{aligned}
 P_4(x) = & f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)(x_0-x_4)} + \\
 & + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} + \\
 & + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)} + \\
 & + f(x_3) \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_4)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} + \\
 & + f(x_4) \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_4-x_0)(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)}.
 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Результат побудови інтерполяційного полінома наведено на рис. 1.3.

Нехай потрібно задати набір з m кубічних функцій $q_1(x), q_2(x), \dots, q_m(x)$. У найбільш загальному вигляді ці багаточлени мають вигляд

$$q_i(x) = k_{1i} + k_{2i}x + k_{3i}x^2 + k_{4i}x^3, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.11)$$

де $\{k_{1i}, k_{2i}, k_{3i}, k_{4i}\}$ – набір з $4m$ сталих, які однозначно визначають сплайн-інтерполювання сукупністю даних $m + 1$ вузлів $\{(x_i, y_i)\}$.

Перші $2m$ умови вимагають, аби сплайни стикалися в заданих точках:

$$q_i(x_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (1.12, a)$$

$$q_{i+1}(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, m - 1.$$

Другі $(2m - 2)$ умови вимагають, аби в місцях стикання сплайнів були рівними перші та другі похідні:

$$q'_i(x_j) = q'_{i+1}(x_j), \quad i = 1, 2, \dots, m - 1, \quad j = 4, 7, 10, \dots; \quad (1.12, b)$$

$$q''_i(x_j) = q''_{i+1}(x_j), \quad i = 1, 2, \dots, m - 1, \quad j = 4, 7, 10, \dots$$

Необхідною умовою існування розв'язку системи алгебраїчних рівнянь є відповідність кількості рівнянь кількості невідомих. Тому необхідні ще дві умови. Як правило, використовуються наступні дві умови:

$$q''_1(x_0) = 0; \quad (1.12, c)$$

$$q''_m(x_m) = 0.$$

Здобутий таким чином сплайн називається *природним кубічним сплайном*. Діставши коефіцієнти сплайну, використовують кусково-гладку поліноміальну функцію для подання даних при інтерполюванні.

У багатьох випадках метод сплайнів є достатньо зручним, оскільки дозволяє отримати аналітичну кусково-поліноміальну функцію.

Існують сплайни більш високих порядків. Застосування цього методу можливе і в інших областях обчислювальної математики, наприклад, у чисельному інтегруванні та знаходженні розв'язків диференціальних рівнянь.

1.6. Інтерполювання в таблицях

При знаходженні значень в таблицях за допомогою інтерполювання, як правило, користуються лінійним та квадратичним інтерполюванням.

У випадку лінійного інтерполювання значення функції в точці, що відрізняється від вузлів інтерполяції, визначається за двома відомими значеннями табульованої функції $y_i = f(x_i)$ та $y_{i+1} = f(x_{i+1})$ у вузлах інтерполяції x_i та x_{i+1} , між якими розміщено потрібне значення аргументу $x_i < x < x_{i+1}$.

Інтерполяційна формула Лагранжа у випадку лінійного інтерполювання ($N = 1$) прийме вигляд

$$L_1(x) = y_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + y_{i+1} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad (1.13)$$

а перша інтерполяційна формула Ньютона

$$P_1(x) = y_i + \frac{\Delta y_i}{h} (x - x_i), \quad (1.14)$$

де $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ – перша кінцева різниця в точці x_i , а $h = x_{i+1} - x_i$ – крок інтерполювання.

Отже, для отримання приблизного значення функції y за формулою Ньютона достатньо до табличного значення y_i додати поправку, що дорівнює $\Delta y_i (x - x_i)/h$.

При квадратичному інтерполюванні ($N = 2$) необхідно знати три значення табулюємої функції: $y_{i-1} = f(x_{i-1})$, $y_i = f(x_i)$ та $y_{i+1} = f(x_{i+1})$. Тоді формула Лагранжа прийме вигляд

$$L_2(x) = y_{i-1} \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} + \quad (1.15)$$

$$+ y_i \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} + y_{i+1} \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)},$$

а перша інтерполяційна формула Ньютона

$$P_2(x) = y_{i-1} + \frac{\Delta y_{i-1}}{h} (x - x_{i-1}) + \frac{\Delta^2 y_{i-1}}{2h^2} (x - x_{i-1})(x - x_i). \quad (1.16)$$

1.7. Математичне опрацювання даних

Аналіз даних є одним із найбільш розповсюджених методів обробки результатів спостережень при вивченні залежностей в економіці, техніці та інших галузях.

Відомо багато прикладів, коли розходження між експериментальними та теоретичними результатами давало імпульс для нового важливого відкриття. Після проведення вимірювальної процедури виникає одна і та ж головна задача – виявити форму зв'язку та визначити формульну залежність, що задає змінну y як функцію змінної x , тобто

$$y = f(x). \quad (1.17)$$

Можна, зрозуміло, використовувати метод інтерполювання: побудувати інтерполяційний багаточлен (наприклад, Лагранжа чи Ньютона), значення якого в точках x_1, x_2, \dots, x_n збігаються з відповідними значеннями y_1, y_2, \dots, y_n . Однак збіг значень у вузлах інтерполювання може не відображати характер поведінки вхідної функції $f(x)$ та інтерполяційної функції, оскільки в будь-яких практичних експериментах значення x та $y = f(x)$, здобуті в результаті вимірювань, є приблизними і містять похибки.

Тому інтерполяційна формула, що повторює ці похибки, не є ідеальним розв'язком поставленої задачі, а вимага точного збігу значень $f(x_n)$ у вузлах (x_n, y_n) не є обгрунтованим.

Проблема аналізу даних, наприклад в економіці чи техніці, характерна тим, що про розподіл величин, що вивчаються, немає достатньої ймовірносної інформації. Метою аналізу даних, зокрема регресійного аналізу, є визначення загального вигляду рівнянь функціонального зв'язку між величинами, що розглядаються, побудова статистичних оцінок невідомих параметрів, які входять у модельні рівняння зв'язку, та перевірка статистичних гіпотез. При вивченні зв'язку між двома величинами за результатами спостережень $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_{n-1}, y_{n-1}), \dots, (x_n, y_n)$ вважається, що одна з них має деякий розподіл імовірностей при фіксованому значенні іншої.

У загальному випадку одержані результати спостережень $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_n, y_n)$ є вибіркою із сукупності з деяким двовимірним розподілом імовірностей. Використання, наприклад, регресії, як правило, виконується методами, що ґрунтуються на принципах середньої квадратичної регресії. Оцінка коефіцієнтів регресії виконується методом найменших квадратів. Цей метод при нормальному розподілі результатів спостережень приводить до оцінок, які збігаються з оцінками найбільшої правдоподібності.

Оцінки, які одержуються цим методом, виявляються в деякому розумінні найкращими й у випадку відхилення від нормальності, якщо тільки об'єм вибірки достатньо великий.

На практиці строга функціональна залежність для експериментальних даних може бути отримана досить рідко, оскільки кожна з величин x та y , як правило, залежить від багатьох випадкових і неконтрольованих чинників.

Формула (1.17) є емпіричним *рівнянням регресії y на x* . Вона дозволяє знаходити значення функції $y = f(x)$ для проміжних (нетабличних) значень величини x , "згладжуючи" результати вимірювань величини y . Такий підхід і визначає практичну корисність формули (1.17) при математичній обробці даних.

У загальному випадку задача математичної обробки формулюється таким чином. Нехай в результаті деякого дослідження значенням x_1, x_2, \dots, x_n величини x поставлені відповідні значення y_1, y_2, \dots, y_n величини y . Потрібно підібрати вид аналітичної залежності $y = f(x)$, що пов'язує змінні x та y .

Аналітичні залежності, здобуті в результаті спостережень, називаються *емпіричними*.

Процес виявлення емпіричних залежностей можна розділити на два головні етапи:

- 1) з'ясування та вибір загального виду емпіричної формули;
- 2) уточнення коефіцієнтів вибраної робочої формули, визначення найкращих її параметрів.

На *першому етапі* цієї роботи користуються апіорними залежностями про об'єкт досліджень, досвідом попередніх досліджень та ін.

Якщо характер залежності між величинами x та y не є відомим, то вид емпіричної формули є певною мірою довільним. Тут перевага віддається простим формулам, які мають достатню точність. Якщо відсутні відомості про проміжні дані, то, як правило, вважається, що емпірична функція – аналітична без точок розриву,

а її графік – плавна крива. Практично, є неможливим вказати загальний метод для знаходження найкращого виду формули, що відповідає дослідним даним. Емпіричні формули є тільки гіпотезами, які більш–менш задовільно узгоджуються з дослідними даними.

На *другому етапі*, користуючись вибраним критерієм якості, знаходять (оцінюють) коефіцієнти вибраної емпіричної формули.

Проблема визначення найкращих значень параметрів є задачею більш легкою й розв'язується регулярними методами.

З множини різноманітних критеріїв якості для чисельних алгоритмів обробки даних найбільшого розповсюдження здобули:

- 1) *метод найменших квадратів*,
- 2) *метод вибраних точок*,
- 3) *метод середніх*.

Метод, що найбільш часто використовується, є *метод найменших квадратів (МНК)*. В основі цього методу міститься *критерій найменших квадратів Гаусса*, що полягає в мінімізації суми квадратів відхилень табличних значень y_1, y_2, \dots, y_n від емпіричних.

1.8. Метод найменших квадратів

Визначення конкретного виду функціональної залежності має свої особливості. Якщо поєднати експериментальні точки відрізками прямих на графіку, дістанеться ламана лінія, вигляд якої є мало спільного з відшукуваною функціональною залежністю. Оскільки кожний результат супроводжується помилками вимірювання, форма ламаної лінії не відтворюється при повторенні досліду. Відстань цієї лінії від точки в кожний бік по горизонталі й вертикалі вказує значення похибки відповідно по осі абсцис та ординат.

Якщо поставити вимогу, аби середньоквадратичне відхилення здобутої функції від експериментальних точок було мінімальним, можна отримати рівняння для параметрів функції. В цьому і полягає метод найменших квадратів.

Нехай існує сукупність із N значень функції y_i в заданих точках x_i , отриманих в результаті досліду. Будемо апроксимувати її аналітичною функцією $\varphi(x)$, в яку входить певна кількість K констант (параметрів) $\{a_k\}$. Необхідною умовою найліпшого середньоквадратичного наближення є мінімум *критерію нев'язки* – сума квадратичних відхилень

$$S = \sum_{i=1}^N [y_i - \varphi(x_i)]^2 \Rightarrow \min. \quad (1.18)$$

Виберемо *лінійну апроксимацію*

$$\varphi(x) = \sum_{k=1}^K a_k \varphi_k(x). \quad (1.19)$$

На практиці широке розповсюдження знайшла поліноміальна апроксимація методів найменших квадратів. В цьому випадку

$$\varphi(x) = \sum_{k=1}^K a_k x^{k-1}. \quad (1.23)$$

Підставивши (1.23) в (1.20), дістаємо:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K a_k x_i^{k-1} &= \sum_{i=1}^N y_i, \\ \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K a_k x_i^k &= \sum_{i=1}^N x_i y_i, \\ \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K a_k x_i^{k+1} &= \sum_{i=1}^N x_i^2 y_i, \\ &\dots \\ \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K a_k x_i^{k+K-2} &= \sum_{i=1}^N x_i^{K-1} y_i. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Визначник Грама цієї системи відрізняється від нуля, тому існує єдиний розв'язок для невідомих параметрів $\{a_k\}$. Як правило, обмежуються невеликими степенями, а при більш високих порядках як апроксимуючі функції $\{\varphi_k(x)\}$ використовують ортогональні багаточлени.

1.9. Лінійна та квадратична апроксимація

У практичних розрахунках вивчення експериментального матеріалу починають з прикладів простих поліноміальних апроксимацій, якими є лінійна та квадратична залежності.

А. Знаходження параметрів лінійної залежності $y(x) = a + bx$

Нехай в результаті дослідження в нашому розпорядженні є масив експериментальних даних, утворений з N вузлів $\{(x_n, y_n)\}$, $n = 1, 2, \dots, N$. Лінійна регресійна залежність полягає у визначенні значень параметрів a та b емпіричної лінійної залежності $y(x) = a + bx$, що описує зв'язок між значеннями $\{(x_n, y_n)\}$ функції $y(x)$. Ця залежність буде побудованою, якщо на підставі експериментального матеріалу отримані значення параметрів a та b .

Вважаємо, щоб критерій нев'язки – сума всіх квадратичних відхилень –

$$S = \sum_{n=1}^N [y_n - y(x_n)]^2 \quad (1.25)$$

досягає мінімуму ($S \Rightarrow \min$). На підставі цього знайдемо ті значення параметрів a й b , які забезпечують виконання цієї умови.

У точці екстремума критерію S як функції a та b виконується

$$\begin{cases} \partial S(a,b)/\partial a = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^N (y_n - a - bx_n) = 0, \\ \partial S(a,b)/\partial b = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^N (y_n - a - bx_n)x_n = 0, \end{cases} \quad (1.26)$$

звідси (тут $N = \sum_{n=1}^N 1$):

$$\begin{cases} a \sum_{n=1}^N 1 + b \sum_{n=1}^N x_n = \sum_{n=1}^N y_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n + b \sum_{n=1}^N x_n^2 = \sum_{n=1}^N x_n y_n. \end{cases} \quad (1.27)$$

Вирази (1.27) називаються *нормальними рівняннями*, або *нормальною системою*.

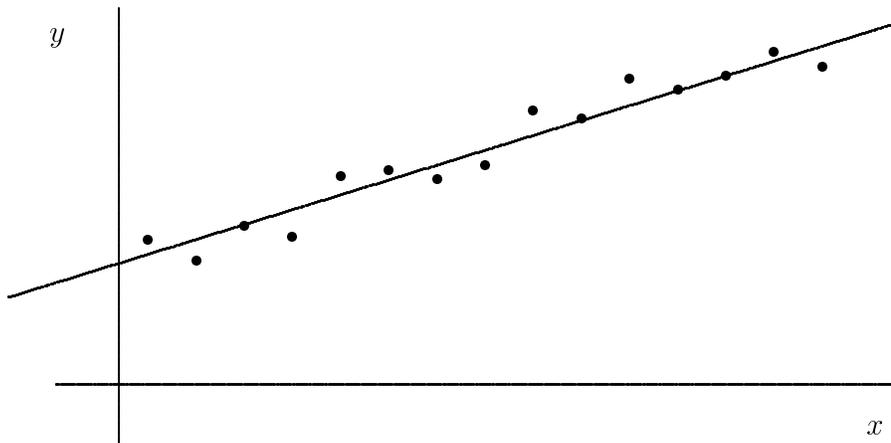


Рисунок 1.4 — Приклад лінійної регресії

Розв'язуючи здобуту нормальну систему (1.26), знаходяться вирази для параметрів a та b :

$$a = \frac{\left(\sum_{n=1}^N y_n\right) \left(\sum_{n=1}^N x_n^2\right) - \left(\sum_{n=1}^N x_n\right) \left(\sum_{n=1}^N x_n y_n\right)}{N \left(\sum_{n=1}^N x_n^2\right) - \left(\sum_{n=1}^N x_n\right)^2}; \quad (1.28, a)$$

$$b = \frac{N \left(\sum_{n=1}^N x_n y_n\right) - \left(\sum_{n=1}^N x_n\right) \left(\sum_{n=1}^N y_n\right)}{N \left(\sum_{n=1}^N x_n^2\right) - \left(\sum_{n=1}^N x_n\right)^2}. \quad (1.28, b)$$

Знайдені значення параметрів a та b дають найліпшу лінійну залежність у сенсі критерію найменших квадратів.

Приклад побудови лінійної регресії показаний на рис. 1.4.

Б. Знаходження параметрів квадратичної залежності $y = a + bx + cx^2$

Квадратична регресійна залежність полягає у визначенні значень параметрів a , b та c емпіричної квадратичної залежності $y(x) = a + bx + cx^2$, що описує зв'язок між значеннями $\{(x_n, y_n)\}$ функції $y(x)$. Ця залежність буде побудована, якщо на підставі експериментальних даних отримані значення параметрів a , b та c .

Нехай критерій нев'язки – сума усіх квадратичних відхилень

$$S = \sum_{n=1}^N \left[y_n - (a + bx_n + cx_n^2) \right]^2 \quad (1.29)$$

досягає мінімуму ($S \Rightarrow \min$); знайдемо ті значення параметрів a , b та c , які забезпечують виконання цієї умови.

У точці екстремуму критерію S як функції a , b та c виконується

$$\begin{cases} \partial S(a, b, c) / \partial a = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^N (y_n - a - bx_n - cx_n^2) = 0, \\ \partial S(a, b, c) / \partial b = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^N (y_n - a - bx_n - cx_n^2) x_n = 0, \\ \partial S(a, b, c) / \partial c = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^N (y_n - a - bx_n - cx_n^2) x_n^2 = 0. \end{cases} \quad (1.30)$$

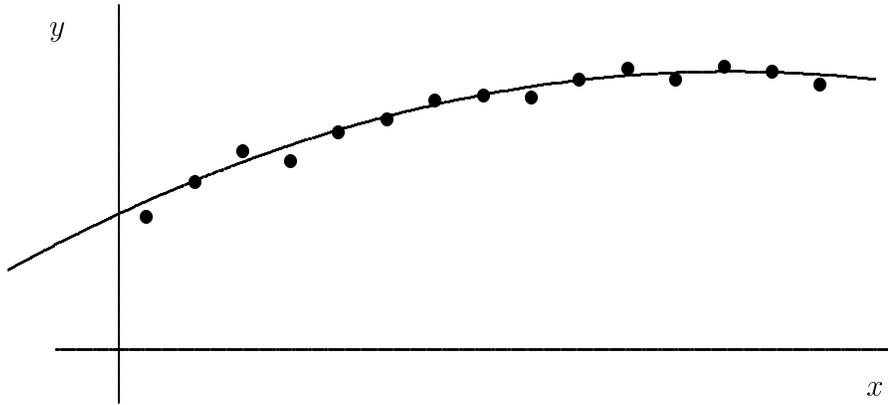


Рисунок 1.5 — Приклад квадратичної регресії

З виразу (1.30) отримаємо систему нормальних рівнянь

$$\begin{cases} a \sum_{n=1}^N 1 + b \sum_{n=1}^N x_n + c \sum_{n=1}^N x_n^2 = \sum_{n=1}^N y_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n + b \sum_{n=1}^N x_n^2 + c \sum_{n=1}^N x_n^3 = \sum_{n=1}^N y_n x_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n^2 + b \sum_{n=1}^N x_n^3 + c \sum_{n=1}^N x_n^4 = \sum_{n=1}^N y_n x_n^2. \end{cases} \quad (1.31)$$

Якщо всі аргументи $\{x\}$ є різними, то система (1.31) має відмінний від нуля визначник. Розв'язуючи нормальну систему (1.31), знаходимо вирази для параметрів a , b та c квадратичної залежності.

тригонометричного багаточлена M -го порядку

$$P_M(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{m=1}^M [a_m \cos(mx) + b_m \sin(mx)]. \quad (1.35)$$

Оскільки на практиці, як правило, функція $f(x)$ задається лише у вигляді таблиці, виникає задача наближеного пошуку коефіцієнтів Фур'є $\{a\}$ та $\{b\}$ за заданою кількістю значень функції. Тому задача практичного гармонійного аналізу може бути сформульована таким чином: методом найменших квадратів апроксимувати на інтервалі $(0, T)$ тригонометричним багаточленом M -го порядку функцію $y = f(x)$, для якої відомі N її значень $y_n = f(x_n)$ при $x_n = nT/N$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$).

Тригонометричний багаточлен для функції, яка визначена на інтервалі $(0, T)$, має вигляд

$$P_M(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^N \left[a_j \cos\left(\frac{2\pi}{T} jx\right) + b_j \sin\left(\frac{2\pi}{T} jx\right) \right], \quad 0 \leq x \leq T, \quad (1.36)$$

де $N < M/2$.

У (1.36) коефіцієнти a_j та b_j ($j = 0, 1, \dots, N$) визначаються наступними співвідношеннями:

$$a_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} y_k \cos\left(\frac{2\pi}{N} jk\right); \quad b_j = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} y_k \sin\left(\frac{2\pi}{N} jk\right), \quad (1.37)$$

де $0 \leq n \leq N/2$.

Багаточлен (1.36) при $N > 2M$ дає найкраще наближення до функції $f(x)$ згідно методу найменших квадратів. Іншими словами, коефіцієнти $\{a\}$ та $\{b\}$ мінімізують суму квадратів відхилень

$$\Delta^2 = \sum_{n=1}^N [P_M(x_n) - y_n]^2. \quad (1.38)$$

У окремому випадку, коли $M = N/2$, апроксимація тригонометричним багаточленом зводиться до тригонометричної інтерполяції, оскільки виконується співвідношення $P_M(x_n) = y_n$ для всіх x_n ($n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$).

1.12. Вибір виду емпіричної формули

Емпіричні лінійна або квадратична залежності можуть не дати задовільний опис отриманим експериментальним даним. Пряме графічне зображення даних не дає відповіді на запитання про те, який аналітичний вигляд має емпірична функція, тобто буде вона степеневою, логарифмічною і т.д.

Якщо відсутні апріорні відомості, то з усієї множини можливих функцій $y = f(x; a, b)$ обмежуються наступними:

- 1) лінійна функція $y = ax + b$;
- 2) показникова функція $y = ab^x$;

- 3) дробово-раціональна функція виду $y = 1/(a + bx)$;
- 4) логарифмічна функція $y = a + b \ln(x)$;
- 5) степенева функція $y = ax^b$;
- 6) гіперболічна функція $y = a + b/x$;
- 7) дробово-раціональна функція виду $y = x/(ax + b)$.

Для вибору найкращого виду двопараметричної аналітичної залежності $y = f(x; a, b)$, яка відповідає збудованому графіку, виконаємо наступні проміжні дії.

На заданому проміжку незалежної змінної x виберемо точки, які достатньо надійні та, наскільки можливо, віддалені одна від одної. Позначимо їх через x_1 та x_N .

Далі обчислимо середнє арифметичне $x_{\text{ариф}}$, середнє геометричне $x_{\text{геом}}$ та середнє гармонійне $x_{\text{гарм}}$:

$$x_{\text{ариф}} = \frac{x_1 + x_N}{2}; \quad x_{\text{геом}} = \sqrt{x_1 x_N}; \quad x_{\text{гарм}} = \frac{2 x_1 x_N}{x_1 + x_N}. \quad (1.39)$$

За обчисленими значеннями незалежної змінної x знайдемо з побудованого графіка відповідне значення залежної змінної y

$$x_{\text{ариф}} \Rightarrow y_1^*; \quad x_{\text{геом}} \Rightarrow y_2^*; \quad x_{\text{гарм}} \Rightarrow y_3^* \quad (1.40)$$

для поки ще невідомої залежності $y = f(x; a, b)$.

Далі виконують допоміжні обчислення для залежної змінної.

Обчислюють:

середнє арифметичне граничних значень

$$y_{\text{ариф}} = \frac{y_1 + y_N}{2}; \quad (1.41, a)$$

середнє геометричне граничних значень

$$y_{\text{геом}} = \sqrt{y_1 y_N}; \quad (1.41, b)$$

середнє гармонійне граничних значень

$$y_{\text{гарм}} = \frac{2 y_1 y_N}{y_1 + y_N}, \quad (1.41, c)$$

після чого порівнюють знайдені з графіку величини y_1^* , y_2^* та y_3^* з обчисленими значеннями $y_{\text{ариф}}$, $y_{\text{геом}}$ та $y_{\text{гарм}}$.

Далі складають набір відмінних ознак (похибок) між розрахунковими значеннями (1.40) та табличними значеннями (1.41) для залежної змінної

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= |y_1^* - y_{\text{ариф}}|; & \varepsilon_2 &= |y_1^* - y_{\text{геом}}|; & \varepsilon_3 &= |y_1^* - y_{\text{гарм}}|; \\ \varepsilon_4 &= |y_2^* - y_{\text{ариф}}|; & \varepsilon_5 &= |y_2^* - y_{\text{геом}}|; & \varepsilon_6 &= |y_2^* - y_{\text{ариф}}|; \\ \varepsilon_7 &= |y_3^* - y_{\text{гарм}}|, \end{aligned} \quad (1.42)$$

і знаходять з цих похибок мінімальну

$$\varepsilon_{\min} \Rightarrow \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6, \varepsilon_7\}. \quad (1.43)$$

Емпіричний критерій вибору типу наближеної двопараметричної залежності ґрунтується на порівнянні обчислених похибок (1.41) та мінімальної з них ε_{\min} .

При цьому можливі наступні сім варіантів прийняття рішень про вид емпіричної функції:

$$1) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_1 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = a + bx; \quad (1.44, a)$$

$$2) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_2 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = ab^x; \quad (1.44, b)$$

$$3) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_3 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = 1/(ax + b); \quad (1.44, c)$$

$$4) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_4 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = a \ln(x) + b; \quad (1.44, d)$$

$$5) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_5 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = ax^b; \quad (1.44, e)$$

$$6) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_6 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = a + b/x; \quad (1.44, f)$$

$$7) \varepsilon_{\min} = \varepsilon_7 \Rightarrow \text{обирається наближення } y = x/(ax + b). \quad (1.44, g)$$

Якщо вибрана залежність виявиться нелінійною, то при опрацюванні експериментальних даних використовують перетворення координат.

Нехай, наприклад, залежність виявилася показниковою, тобто $y = ab^x$. У цьому випадку, оскільки $\lg(y) = \lg(a) + x \lg(b)$, зручно перейти до нових змінних. Позначимо $A = \lg(a)$, $B = \lg(b)$ та введемо змінні $u = \lg(y)$ та $v = x$. Тоді в площині uOv одержимо рівняння прямої $u = A + Bv$, аналізувати яку найбільш зручно.

1.13. Двопараметрична апроксимація

У процесі опрацювання заданих експериментальних даних можна намагатися описати їх деякою простою двопараметричною залежністю вигляду $y = f(x; a, b)$, де a та b – сталі. Для цього використовують перетворення, що приводять до лінійного вигляду, і розглядають середньоквадратичне відхилення нової величини, мінімум якої відповідає вдалому підбору параметрів.

Наведемо системи нормальних рівнянь для розповсюджених наборів таких залежностей вигляду $y = f(x; a, b)$:

для залежності $y = a + b/x$

$$\begin{cases} aN + b \sum_{n=1}^N x_n^{-1} = \sum_{n=1}^N y_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n^{-1} + b \sum_{n=1}^N x_n^{-2} = \sum_{n=1}^N y_n/x_n; \end{cases} \quad (1.45)$$

для залежності $y = 1/(a + bx)$

$$\begin{cases} aN + b \sum_{n=1}^N x_n = \sum_{n=1}^N 1/y_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n + b \sum_{n=1}^N x_n^2 = \sum_{n=1}^N x_n/y_n; \end{cases} \quad (1.46)$$

для залежності $y = a/(b + x)$

$$\begin{cases} Na - b \sum_{n=1}^N y_n = \sum_{n=1}^N x_n y_n, \\ a \sum_{n=1}^N x_n - b \sum_{n=1}^N y_n^2 = \sum_{n=1}^N x_n y_n^2; \end{cases} \quad (1.47)$$

для залежності $y = a + \exp(bx)$

$$\begin{cases} N \ln(a) + b \sum_{n=1}^N x_n = \sum_{n=1}^N \ln(y_n), \\ \ln(a) \sum_{n=1}^N x_n + b \sum_{n=1}^N x_n^2 = \sum_{n=1}^N x_n \ln(y_n); \end{cases} \quad (1.48)$$

для залежності $y = ax^b$

$$\begin{cases} N \ln(a) + b \sum_{n=1}^N \ln(x_n) = \sum_{n=1}^N \ln(y_n), \\ \ln(a) \sum_{n=1}^N \ln(x_n) + b \sum_{n=1}^N \ln^2(x_n) = \sum_{n=1}^N \ln(x_n) \ln(y_n); \end{cases} \quad (1.49)$$

для залежності $y = a + b \ln(x)$

$$\begin{cases} Na + b \sum_{n=1}^N \ln(x_n) = \sum_{n=1}^N y_n, \\ a \sum_{n=1}^N \ln(x_n) + b \sum_{n=1}^N \ln^2(x_n) = \sum_{n=1}^N \ln(x_n) y_n. \end{cases} \quad (1.50)$$

1.14. Виявлення та виключення похибок із серії спостережень

Якщо серія з невеликої кількості вимірювань містить серйозну похибку, то присутність цієї похибки може змінити як середнє значення вимірюваної величини, так і межі довірчого інтервалу. Тому похибку необхідно локалізувати, а із залишкового результату її необхідно виключити. Як правило, похибка має значення, що різко відрізняється від інших вимірювань. Однак, це відхилення ще не дає права повністю виключати таке вимірювання як похибку, поки не перевірено, чи не є це відхилення наслідком статистичного розсіювання або впливу умов спостереження, що різко змінилися.

Приклад

В табл. 1.2 наведені значення величини x_n , $n = 1, 2, \dots, 9$, що отримані в результаті вимірювання однорідних $N = 9$ об'єктів.

Очевидно, що величина x_9 "випадає" з ряду спостережень (помилка, можливо, відбулася при запису 7 замість 1). Перевіримо, чи не є значення $x_9 = 729,47$ похибкою в цій вибірці даних.

З цією метою виконаємо наступні дії:

Таблиця 1.2 — Чисельні дані ($N = 9$)

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_n	129,47	129,46	129,43	129,41	129,40	129,41	129,42	129,41	729,47

1. Знайдемо середнє арифметичне відносно вибірки даних ($N = 9$)

$$\bar{x}^{(1)} = \frac{1}{9} \sum_{n=1}^9 x_n = 196,10. \quad (1.51)$$

2. Знайдемо середньовибіркове відхилення

$$\sigma^{(1)} = \left(\frac{1}{9} \sum_{n=1}^9 (x_n - \bar{x}^{(1)})^2 \right)^{1/2} = 188,58. \quad (1.52)$$

3. У теорії ймовірностей часто розглядається коридор значень $\bar{x}^{(1)} \pm 3\sigma^{(1)}$ (правило "трьох сігм"). Події, реалізації яких виявились поза цим коридором, вважаються практично неймовірними. В прикладі цей коридор складає

$$\bar{x}^{(1)} - 3\sigma^{(1)} = -369,65; \quad \bar{x}^{(1)} + 3\sigma^{(1)} = 761,83. \quad (1.53)$$

Видно, що коридор "три сігма" включає навіть від'ємне значення.

Виключемо тепер (табл. 1.3) значення x_9 , що "випадає".

З новими даними виконаємо ті ж дії:

Таблиця 1.3 — Чисельні дані ($N = 8$)

n	1	2	3	4	5	6	7	8
x_n	129,47	129,46	129,43	129,41	129,40	129,41	129,42	129,41

1. Знайдемо середнє арифметичне відносно нової вибірки даних ($N = 8$)

$$\bar{x}^{(2)} = \frac{1}{8} \sum_{n=1}^8 x_n = 129,43. \quad (1.54)$$

2. Знайдемо середньовибіркову дисперсію

$$\sigma^{(2)} = \left(\frac{1}{8} \sum_{n=1}^8 (x_n - \bar{x}^{(2)})^2 \right)^{1/2} = 0,0239. \quad (1.55)$$

3. Знайдемо границі нового коридору

$$\bar{x}^{(2)} - 3\sigma^{(2)} = 129,35; \quad \bar{x}^{(2)} + 3\sigma^{(2)} = 129,50. \quad (1.56)$$

Якщо порівняти $x_9 = 729,47$ з коридором $\bar{x}^{(2)} \pm 3\sigma^{(2)} = 129,43 \pm 0,0239$, що відповідає даним з $N = 8$ вимірювань, то можна прийти до висновку, що вимірювання $x_9 = 729,47$ вірогідно суперечить попереднім 8 вимірюванням. Можливо, воно

є результатом серйозної похибки або помилки при запису. Дійсно, врахування такого вимірювання ($\bar{x}^{(1)} = 196, 10$) може суттєво вплинути на загальну величину результату ($\bar{x}^{(2)} = 129, 43$).

Помилки такого виду розповсюджені у практиці, на програмному рівні їх помітити та локалізувати практично неможливо.

Тому :

1) при розгляді початкових даних повинна бути передбачена процедура перевірки їх на змістовну несуперечність;

2) кожна програма повинна бути поділеною на блоки таким чином, аби забезпечити можливість перевірки та подальшого відтворювання кожного проміжного результату;

3) для кожної обчислювальної процедури необхідно знайти (побудувати) інваріанти задачі; значення цих інваріантів необхідно використати для поточного контролю розв'язання.

1.15. Лінійне згладжування даних

В результаті похибок, що мають різне походження, вигляд отриманих даних дещо відрізняється від теоретичних (ідеальних). При акуратній постановці вимірювань похибки носять випадковий характер, при цьому на криву залежності двох величин накладаються осциляції, що ускладнюють аналіз функції. Аби звести до мінімуму відхилення, що викликані випадковою похибкою, використовують згладжування досліджуваних даних, замінюючи таблицю даних, що отримані на основі експерименту, новою таблицею приблизних даних, графік яких є більш наближеним до реальної кривої.

Практично згладжування даних здійснюють за допомогою багаточленів методом найменших квадратів. Найкраще згладжування здійснюється для значень функції, що розміщені в середині таблиці. Тому беруть непарну кількість даних. Числові значення на початку і в кінці таблиці згладжуються із меншою точністю.

Формули для результату Y_i лінійного згладжування в поточній точці за номером i для груп з трьох значень y_{i-1} , y_i , y_{i+1} мають вигляд :

$$\begin{aligned} Y_{i-1} &= \frac{1}{6} (5y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}); \\ Y_i &= \frac{1}{6} (2y_{i-1} + 2y_i + 2y_{i+1}); \\ Y_{i+1} &= \frac{1}{6} (-y_{i-1} + 2y_i + 5y_{i+1}). \end{aligned} \tag{1.57}$$

Для перших трьох значень y_1 , y_2 , y_3 згладжуємо значення y_1 та y_2 . Потім беремо наступну групу y_2 , y_3 , y_4 та згладжуємо значення функції y_3 і т.д.

Формули для результату Y_i лінійного згладжування в поточній точці за номером

i для груп із п'яти значень $y_{i-2}, y_{i-1}, y_i, y_{i+1}, y_{i+2}$ такі :

$$\begin{aligned}
Y_{i-2} &= \frac{1}{10} (6y_{i-2} + 4y_{i-1} + y_i - y_{i+2}); \\
Y_{i-1} &= \frac{1}{10} (4y_{i-2} + 3y_{i-1} + 2y_i + y_{i+1}); \\
Y_i &= \frac{1}{10} (2y_{i-2} + 2y_{i-1} + 2y_i + 2y_{i+1} + 2y_{i+2}); \\
Y_{i+1} &= \frac{1}{10} (y_{i-1} + 2y_i + 3y_{i+1} + 4y_{i+2}); \\
Y_{i+2} &= \frac{1}{10} (-y_{i-2} + y_i + 4y_{i+1} + 6y_{i+2}).
\end{aligned} \tag{1.58}$$

Для перших п'яти значень y_1, y_2, y_3, y_4, y_5 згладжуємо значення y_1, y_2 та y_3 . Потім беремо наступну групу y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 та згладжуємо значення функції y_4 і т.д.

Формули для результату Y_i згладжування в поточній точці за номером i для груп із семи значень $y_{i-3}, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i, y_{i+1}, y_{i+2}, y_{i+3}$ такі :

$$\begin{aligned}
Y_{i-3} &= \frac{1}{42} (39y_{i-3} + 8y_{i-2} - 4y_{i-1} - 4y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2} - 2y_{i+3}); \\
Y_{i-2} &= \frac{1}{42} (8y_{i-3} + 19y_{i-2} + 16y_{i-1} + 6y_i - 4y_{i+1} - 7y_{i+2} + 4y_{i+3}); \\
Y_{i-1} &= \frac{1}{42} (-4y_{i-3} + 16y_{i-2} + 19y_{i-1} + 12y_i + 2y_{i+1} - 4y_{i+2} + y_{i+3}); \\
Y_i &= \frac{1}{42} (2y_{i-3} - 6y_{i-2} + 12y_{i-1} + 14y_i + 12y_{i+1} + 6y_{i+2} + 2y_{i+3}); \\
Y_{i+1} &= \frac{1}{42} (y_{i-3} - 4y_{i-2} + 2y_{i-1} + 12y_i + 19y_{i+1} + 16y_{i+2} - 4y_{i+3}); \\
Y_{i+2} &= \frac{1}{42} (4y_{i-3} - 7y_{i-2} - 4y_{i-1} + 6y_i + 16y_{i+1} + 19y_{i+2} + 8y_{i+3}); \\
Y_{i+3} &= \frac{1}{42} (-2y_{i-3} + y_{i-2} + 4y_{i-1} - 4y_i - 4y_{i+1} + 8y_{i+2} + 39y_{i+3}).
\end{aligned} \tag{1.59}$$

Для перших семи значень $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7$ згладжуємо значення y_1, y_2, y_3 та y_4 . Потім беремо наступну групу $y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7, y_8$ та згладжуємо значення функції y_5 і т.д.

Приклад

Нехай у досліді отримано масив значень аргументів $x_n = 0, 1n$ та значень функції $y_n = \cos(x_n)$, $n = -3, -2, -1, 0, 1, \dots, 50, 51, 52, 53$. Ці значення збуджені похибками, тобто для кожного значення y_n маємо

$$y_n \Rightarrow y_n + 0, 18 u_n, \quad n = 0, 1, \dots, 50,$$

де $\{u_n\}$ – масив значень випадкової величини, яка рівномірно розподілена на інтервалі $[-0, 18; 0, 18]$.

Потрібно отримати масив $\{y_n\}$, $n = 0, 1, \dots, 49, 50$, який містить згладжені значення функції.

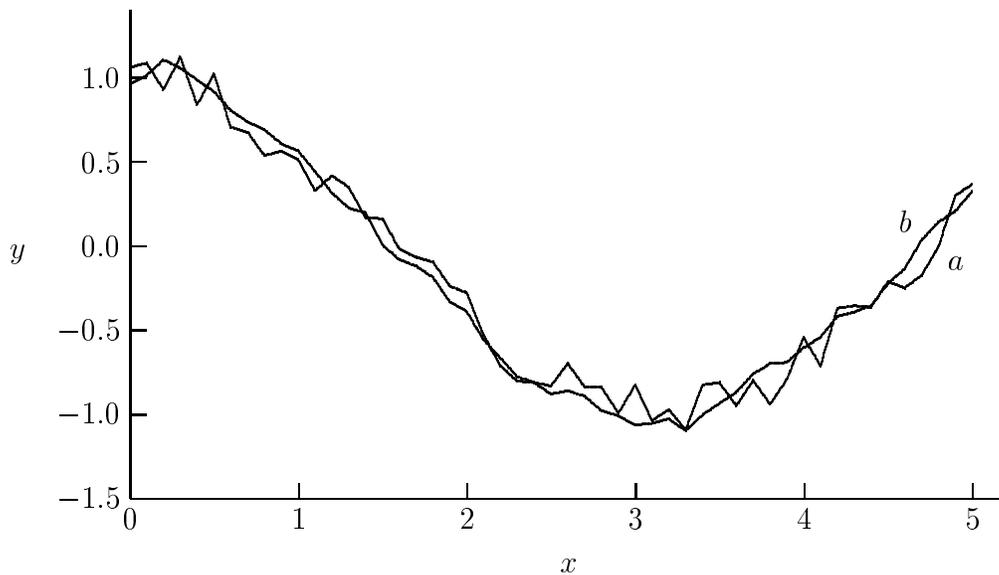


Рисунок 1.6 — До згладжування функцій: крива a — функція $y = \cos(x)$, яка збуджена похибками, рівномірно розподіленими на інтервалі $(-0, 18; 0, 18)$; крива b — результат згладжування семиточковим фільтром

Розв'язання

Використаємо формулу (1.59), яка відповідає алгоритму згладжування по семи поточних точках. Збуджена крива та її згладжуваний аналог (результат використання згладжування) наведені на рис. 1.6. Відзначимо, що для отримання масива з 51 значення необхідно мати для використання масив з 57 вихідних значень.

Визначення виду функціональної залежності має свої особливості. Поєднавши експериментальні точки відрізками прямих, ми здобудемо ламану лінію, що не має нічого спільного з відшукуваною експериментальною залежністю. Форма її не відновиться при повторному вимірюванні, оскільки кожний результат вимірювань супроводжується помилками. Фактично лінійне згладжування робить криву більш згладженою, а осциляції при цьому зникають. Як правило, добрі результати дає повторне згладжування за п'ятьма точками.

Сукупність усіх точок, що беруть участь у формуванні результату, утворює *поточне вікно*. Так, у формулах (1.57), (1.58), (1.59) поточне вікно утворено відповідно з 3, 5 та 7 точок, що симетрично прилягають до заданої з номером i . Лінійний оператор згладжування типу (1.57)–(1.59) називається *лінійним згладжуючим фільтром*. Коефіцієнти фільтру обирають по-різному. Так, наприклад, $(2K + 1)$ -точковий *гауссів згладжуючий фільтр* шириною σ побудований так:

$$Y_n = \left(\sum_{k=-K}^K a_k y_{n+k} \right) \left(\sum_{k=-K}^K a_k \right)^{-1}, \quad (1.60)$$

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{k^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1.61)$$

де $n = -K, (-K + 1), \dots, (K - 1), K$.

1.16. Завдання на лабораторну роботу

Дана лабораторна робота розрахована на десять годин і містить п'ять завдань.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму чисельного інтерполювання. За допомогою програми знайдіть наближене значення функції при заданих значеннях аргументів. При побудові програми використовуйте інтерполяційну формулу Лагранжа.

Вхідні дані для програми:

N – кількість вузлів інтерполювання;

$\{x\}$ – масив аргументів у вузлах інтерполювання;

$\{f\}$ – масив функцій у вузлах інтерполювання;

x – задані значення аргументу.

Результат роботи програми – масив, що містить значення інтерполюючих багаточленів, отриманих за допомогою формули Лагранжа.

n	Варіант 1		Варіант 2		Варіант 3	
	x_n	f_n	x_n	f_n	x_n	f_n
0	0,43	1,635	0,35	2,739	0,02	1,023
1	0,48	1,732	0,41	2,300	0,08	1,095
2	0,55	1,876	0,47	1,968	0,12	1,147
3	0,62	2,033	0,51	1,787	0,18	1,214
4	0,70	2,228	0,56	1,595	0,23	1,214
5	0,75	2,359	0,64	1,343	0,30	1,409
$x =$	0,702	0,512	0,526	0,453	0,102	0,114
	0,645	0,736	0,482	0,552	0,125	0,203
	0,608	0,750	0,436	0,640	0,154	0,300

З а в д а н н я 2

Напишіть програму чисельного інтерполювання. Використайте інтерполяційну формулу Лагранжа.

Вхідні дані для програми:

x_0 – початкове значення рівновіддалених аргументних вузлів;

h – сталий крок аргументних вузлів;

N – кількість вузлів інтерполювання;

$f(x)$ – інтерпольована функція.

Результат роботи програми – масив, що містить значення інтерполюючих багаточленів, отриманих за допомогою формули Лагранжа.

Варіант 1

$$x_0 = 1,0; \quad h = 0,1; \quad N = 10; \quad f(x) = \sin(x);$$

$$x = 1,050; 1,177; 1,233; 1,389; 1,479; 1,538; 1,673; 1,772; 1,899.$$

Варіант 2

$x_0 = 1,0$; $h = 0,1$; $N = 10$; $f(x) = \exp(x)$;
 $x = 1,011$; $1,174$; $1,284$; $1,331$; $1,480$; $1,521$; $1,669$; $1,747$; $1,848$.

Варіант 3

$x_0 = 4,0$; $h = 0,3$; $N = 10$; $f(x) = 1/(1+x)$;
 $x = 4,001$; $4,373$; $4,589$; $4,673$; $5,972$; $6,326$; $6,390$.

З а в д а н н я 3

За програмою чисельного інтерполювання знайдіть чисельне значення функції в заданому проміжку.

Вхідні дані для програми:

N – кількість вузлів;

$\{x\}$ – масив аргументних інтерполяційних вузлів;

$\{f\}$ – масив функціональних інтерполяційних вузлів.

Результат роботи програми – значення функції при заданому значенні аргументу, отримані за допомогою інтерполяційних формул Ньютона.

Варіант 1

$N = 10$;

$x = (2,0; 2,1; 2,2; 2,3; 2,4; 2,5; 2,6; 2,7; 2,8; 2,9)$;

$f = (0,85; 0,92; 0,99; 1,06; 1,14; 1,21; 1,28; 1,35; 1,42; 1,46)$.

Знайдіть значення функції при $x = 2,02$; $2,44$; $2,78$.

Варіант 2

$N = 10$;

$x = (5,0; 5,1; 5,2; 5,3; 5,4; 5,5; 5,6; 5,7; 5,8; 5,9)$;

$f = (1,54; 1,53; 1,51; 1,49; 1,48; 1,46; 1,45; 1,44; 1,43; 1,43)$.

Знайдіть значення функції при $x = 5,025$; $5,337$; $5,662$.

Варіант 3

$N = 10$;

$x = (0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1,0; 1,1; 1,2; 1,3; 1,4)$;

$f = (0,61; 0,88; 1,20; 1,55; 1,95; 2,39; 2,87; 3,39; 3,93; 4,51)$.

Знайдіть значення функції при $x = 0,501$; $1,085$; $1,348$.

Варіант 4

$N = 7$;

$x = (1,03; 1,08; 1,016; 1,23; 1,26; 1,33; 1,39)$;

$f = (2,8011; 2,9447; 3,1899; 3,4212; 3,5254; 3,7810; 4,0148)$.

Знайдіть значення функції при $x = 1,051$; $1,088$; $1,356$.

З а в д а н н я 4

Побудуйте програму розв'язування задачі лінійного регресійного аналізу.

Складіть модель рівняння лінійної регресії для наближення функції, що задана табличними значеннями (див. табл. 1.4).

На підставі побудованої моделі апроксимуючої залежності знайдіть параметри рівняння регресії.

Таблиця 1.4 — Дані до завдання 4

Варіант	Функція								
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
1	y	2,1	4,2	5,5	6,9	8,5	10,2	11,6	12,9
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
2	y	0,1	1,9	4,1	5,9	8,1	9,9	11,8	14,2
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
3	y	0,51	1,98	3,52	5,10	6,48	8,09	9,52	10,85
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
4	y	5,1	6,8	9,2	10,7	13,1	15,7	17,1	19,1
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
5	y	0,95	4,04	6,88	10,11	13,02	16,10	19,01	22,14
	x	1	2	3	4	5	6	7	8
6	y	3,97	6,96	10,08	12,89	14,72	19,07	22,10	24,99
	x	1	2	3	4	5	6	7	8

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити :

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, що містить таблицю вхідних даних у вузлах і таблицю значень функції для заданих значень аргументу;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

1.17. Завдання для перевірки

1. В чому полягає суть методів чисельного інтерполювання функцій?
2. Побудуйте явний аналітичний вираз для інтерполяційного багаточлена Лагранжа для випадків $N = 2, 3, 4$.
3. Побудуйте явний аналітичний вираз для інтерполяційного багаточлена Ньютона для $N = 2, 3, 4$.
4. Нехай функція $f(x)$ є сталою на відрізку $[a, b]$. Прямим обчисленням покажіть, що значення інтерполяційного полінома Лагранжа також дорівнює цій сталій.

5. Яких значень набуде інтерполяційний багаточлен у вузлах, розміщених поза ділянкою, заданою початковою таблицею?

6. Нехай для двох таблично заданих функцій друга відрізняється від першої на один вузол, що розміщений всередині таблиці. Проаналізуйте, як будуть відрізнятися відповідні інтерполяційні багаточлени.

7. На підставі формули Лагранжа побудуйте інтерполяційний багаточлен для функції $f(x) = \exp(-2x)$ в точках $x = 1, 2, 3, 4$.

8. На підставі формули Лагранжа побудуйте інтерполяційний багаточлен для функції $f(x) = \sin(x)$ в точках $x = 0, 1; 0, 2; 0, 3; 0, 4$.

9. В чому полягає суть наближення таблично заданої функції методом найменших квадратів?

10. Яким шляхом задачі наближення деякої функції різними нелінійними наближувочими функціями можна звести до задачі наближення лінійними функціями?

11. На підставі формули Лагранжа побудуйте інтерполяційний багаточлен для функції $f(x) = \exp(x) - x^2$ в точках $x = -1,5; -1,0; 0,5; 0,0; 0,5; 1,0; 1,5$, потім за допомогою оберненого інтерполювання визначте нуль цієї функції.

12. Побудуйте функціональну блок-схему знаходження інтерполяційного багаточлена Лагранжа.

13. Побудуйте функціональну блок-схему знаходження першої та другої інтерполяційних формул Ньютона.

14. На підставі формули Лагранжа побудуйте інтерполяційний багаточлен для функції $f(x) = \cos(x)$ в точках $x = 1,3; 1,4; 1,5; 1,6$, потім за допомогою оберненого інтерполювання визначте нуль цієї функції.

15. На підставі формули Лагранжа побудуйте інтерполяційний багаточлен для функції $f(x) = 0,5 - \exp(-x)$ в точках $x = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9$, потім за допомогою оберненого інтерполювання визначте нуль цієї функції.

2. Знаходження нулів функцій

2.1. Основні теоретичні відомості

При розв'язуванні практичних задач часто стикаються з рівняннями, зокрема з нелінійними. Розв'язування таких рівнянь – не тільки важлива самостійна задача, а й частина інших задач обчислювальної математики, наприклад, розв'язування диференціальних рівнянь або знаходження власних значень матриці.

Рівняння, що містять лише цілі степені аргумента, називаються *алгебраїчними*.

Трансцендентними рівняннями називаються нелінійні рівняння, що містять експоненційну, тригонометричні або інші спеціальні функції.

Застосування прямих способів розв'язування таких рівнянь у загальному випадку можливо лише для алгебраїчних рівнянь (крім, можливо, деяких спеціально підібраних випадків), причому при порядку не більше четвертого. Тому на перший план виступають ітераційні методи, особливо за наявності ефективних комп'ютерних алгоритмів.

Рівняння з одним невідомим можна записати у вигляді

$$f(x) = 0. \quad (2.1)$$

Сукупність значень змінних x , за яких це рівняння стає тотожністю, називається *розв'язком* цього рівняння. Кожне значення x з цієї сукупності називається *коренем* рівняння або *нулем функції* $f(x)$.

Функції $f(x)$ часто називають *дисперсійними*, відповідно рівняння вигляду (2.1) – *дисперсійним рівнянням*. У рівнянні (2.1) функції $f(x)$, як правило, є нелінійними.

Розв'язування задачі знаходження нулів функції, як правило, зручно проводити у два етапи.

На першому (початковому) етапі досліджують поведінку функції, в результаті чого відокремлюють (локалізують) ділянки, на кожній з яких знаходиться один корінь (з урахуванням його кратності).

При цьому необхідно використовувати будь-які додаткові відомості про поведінку функції та її похідних. Хід розв'язування на цьому етапі значною мірою залежить від особливостей розглядуваної функції $f(x)$ і буде тим успішнішим, чим краще знайдений проміжок, на якому локалізований корінь. На практиці часто, наприклад, застосовується *графічний аналіз* рівняння (2.1). При цьому можна записати початкове рівняння $f(x) = 0$ в еквівалентному вигляді $\varphi(x) = \psi(x)$. Тоді кожний розв'язок є абсцисою точок перетину двох кривих $y = \varphi(x)$ та $y = \psi(x)$. При вдалому виборі аналіз цих кривих може виявитися ефективнішим, ніж аналіз початкової кривої $f(x) = 0$.

На другому (вихідному) етапі розв'язання розглядають конкретний локальний інтервал, що містить лише один нуль функції $f(x)$ (з урахуванням його кратності).

Після цього знаходять цей нуль, при цьому застосовують той або інший придатний спосіб.

При знаходженні дійсних коренів часто використовують наступні дві теореми. Одна з них дозволяє відокремити корені, тобто встановити можливо стисні проміжки $[a, b]$, в яких міститься один і тільки один корінь рівняння, а друга – оцінити степінь наближення.

Теорема 1. Якщо неперервна функція $f(x)$ приймає значення різних знаків на кінцях проміжку $[a, b]$, тобто $f(a) \cdot f(b) < 0$, то в середині цього проміжку міститься один корінь рівняння $f(x) = 0$, тобто знайдеться хоча б одне число x_* , таке, що $f(x_*) = 0$.

Теорема 2. Нехай x_* – точний, а ξ – наближений корінь рівняння $f(x) = 0$, що міститься на одному й тому ж проміжку $[a, b]$, причому на цьому проміжку $|f'(x)| \leq m$, де m – деяка стала. Тоді

$$|\xi - x_*| \leq \frac{f(\xi)}{m}. \quad (2.2)$$

Перейдемо до розгляду конкретних способів знаходження нулів функції, застосування яких поширене на практиці. При цьому обмежимося випадком рівнянь з дійсними коефіцієнтами. Розв'язки рівнянь, тобто відповідні нулі функцій, можуть виявитися як дійсними, так і комплексними.

2.2. Метод половинного ділення

Цей метод ще називають *методом дихотомії* або *методом Больцано*.

Нехай корінь x_* рівняння $f(x) = 0$ відокремлений та знаходиться на відрізку $[a, b]$, тобто $f(a) \cdot f(b) < 0$. Візьмемо середину відрізка $c = (a + b)/2$. Якщо $f(c) = 0$, то c – точний корінь рівняння. Якщо $f(c) \neq 0$, то з двох відрізків, що утворилися, $[a, c]$ і $[c, b]$ виберемо той, на кінцях якого функція $f(x)$ приймає протилежні за знаком значення (рис. 2.1). Дістаємо відрізок удвічі коротший, позначимо його $[a_1, b_1]$. Продовжуючи цей процес, дістанемо відрізок $[a_n, b_n]$ довжиною $L = (b - a)/2^n$, де n – кількість етапів ділення. Процес ділення припиняємо, якщо $L < \varepsilon$, де ε – задана точність знаходження нуля.

Метод дихотомії використовується при пошуку дійсних нулів функції.

Цей спосіб найбільш універсальний. Він гарантує розв'язування для неперервної функції $f(x)$, якщо знайдений інтервал, на якому вона змінює знак. Найчастіше ним користуються на етапі локалізації нулів.

2.3. Метод хорд

В основі цього методу знаходиться лінійна інтерполяція за двома значеннями функції, що мають протилежні знаки, тобто на достатньо малому проміжку $[a, b]$ дуга кривої $f(x)$ замінюється хордою, що її стягує. Збіжність методу гарантується лише на невеликій ділянці поблизу нуля функції за умови, що знаки першої та другої похідних незмінні на проміжку $[a, b]$.

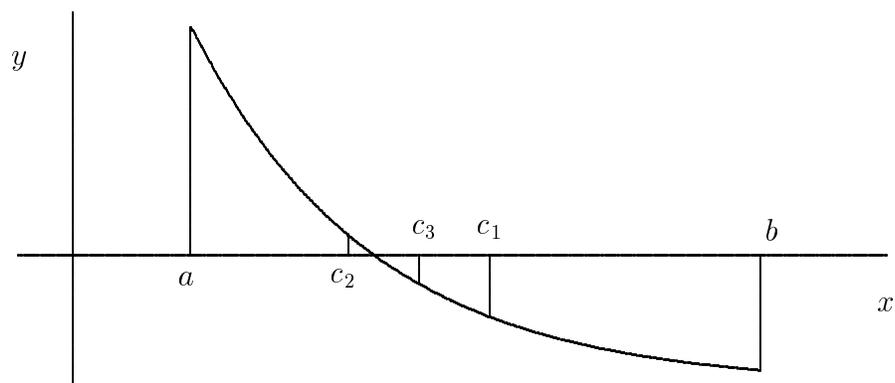


Рисунок 2.1 — Метод дихотомії

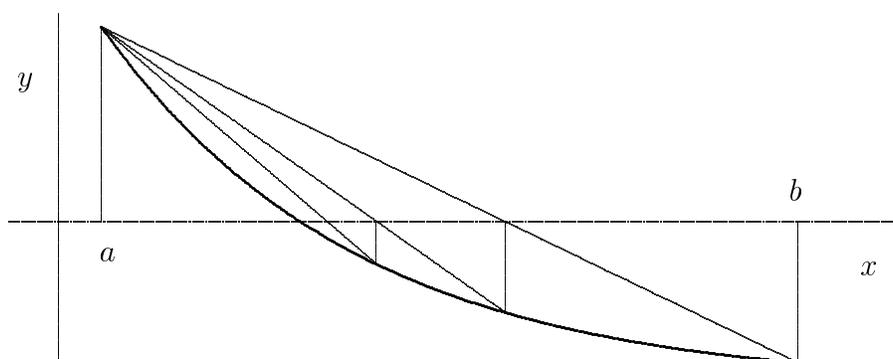


Рисунок 2.2 — Метод хорд

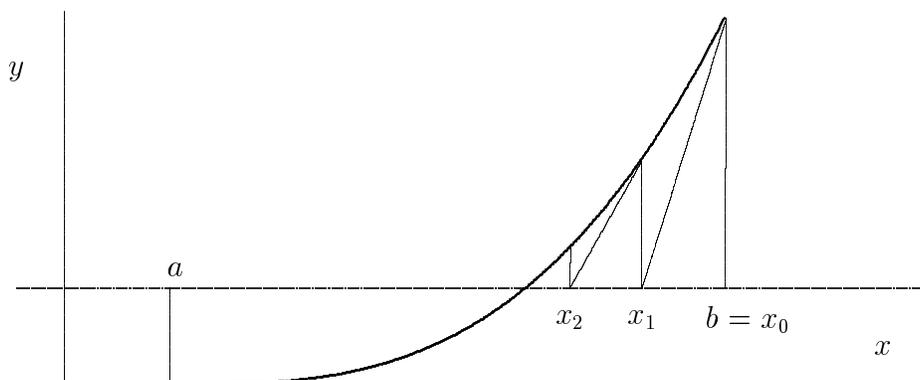


Рисунок 2.3 — Метод Ньютона (дотичних)

Метод хорд використовується при пошуку дійсних нулів функції.

Нехай, наприклад, $f(a) > 0$ і $f(b) < 0$ (рис. 2.2).

Якщо $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, то ітераційний процес

$$x_{n+1} = x_n - (b - x_n) \frac{f(x_n)}{f(b) - f(x_n)}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.3)$$

збігається до нуля x_* функції $f(x)$.

Якщо ж $f'(x) \cdot f''(x) < 0$, то нуль x_* функції відшукують так:

$$x_{n+1} = x_n - (x_n - a) \frac{f(x_n)}{f(x_n) - f(a)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.4)$$

Процес продовжується до виконання умови $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$.

При виборі формули ітераційного процесу користуються таким правилом: *нерухомим кінцем відрізка є той, для якого знак функції збігається зі знаком її другої похідної.*

Цей спосіб застосовується для відшукування дійсних коренів дійсних функцій на достатньо малих відрізках, на яких зберігаються знаки похідних. Для оцінки похибки можна користуватися загальною формулою

$$|x_* - x_n| < \frac{1}{m} |f(x_n)|, \quad m = \min_x |f'(x)|. \quad (2.5)$$

2.4. Метод Ньютона

Геометричний зміст методу Ньютона полягає в тому, що дуга кривої $y = f(x)$ замінюється дотичною до цієї кривої (тому цей метод має другу назву – *метод дотичних*).

Послідовність наближених значень $x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots$ визначається зі співвідношення (рис. 2.3)

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n). \quad (2.6)$$

При виборі початкового наближення кореня необхідно керуватися таким правилом: за вхідну точку x_0 вибирають той кінець відрізка $[a, b]$, на якому знак функції збігається зі знаком другої похідної.

Для оцінки похибки можна користуватися загальною формулою

$$|x_* - x_n| < \frac{1}{m} |f(x_n)|, \quad m = \min_x |f'(x)|. \quad (2.7)$$

Як і в методі хорд, збіжність цього методу гарантується лише у малому околі поблизу нуля функції за умови, що знаки першої і другої похідних незмінні на проміжку $[a, b]$. Якщо $f''(x)$ змінює знак у проміжку $[a, b]$, то може виявитися, що друге наближення x_2 послідовності (2.6) буде гіршим, ніж перше. Тому корисно перед обчисленням детально ознайомитися з графіком функції $f(x)$ на інтервалі $[a, b]$.

Якщо метод Ньютона використовується, коли $f''(x)$ змінює знак, або він застосовується без дослідження функції $f(x)$, отримана послідовність $\{x_n\}$ може збігатися до потрібного кореня або до іншого можливого кореня, або розходитися, або зазнавати циклічного руху.

Якщо є можливість кожного разу обчислювати значення функції $f(x)$ з достатньою точністю, то наведені вище метод хорд та метод дотичних дозволяють знаходити корінь функції з відповідною точністю. Проте, якщо значення $f(x)$ отримується з таблиць, які містять похибки задання функції, то й корінь можна отримати тільки з обмеженою точністю.

Якщо $\delta f(x)$ – отримана при обчисленні $f(x)$ похибка, то вона погіршує точність обчислення нуля x_* функції на таку величину δx , що

$$\delta f(x) = f'(x) \delta x, \quad x \rightarrow x_*. \quad (2.8)$$

Відзначимо, що методом Ньютона зручно користуватися при пошуку комплекснозначених нулів функції.

2.5. Комбінований метод хорд і дотичних

Методи хорд та дотичних дають близьке до кореня значення з різних боків, тому їх часто застосовують у поєднанні. У результаті уточнення кореня відбувається швидше.

Нехай маємо рівняння $f(x) = 0$ і відділений корінь z , що знаходиться на відрізку $[a, b]$. Далі можливі два випадки.

Випадок 1

Якщо $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, то з боку кінця a шукають корінь за методом хорд, а з боку кінця b – за методом дотичних:

$$a_{n+1} = a_n - f(a_n)(b_n - a_n)/[f(b_n) - f(a_n)], \quad (2.9)$$

$$b_{n+1} = b_n - f(b_n)/f'(b_n).$$

Випадок 2

Якщо $f'(x) \cdot f''(x) < 0$, то з боку кінця a шукають корінь за методом дотичних, а з боку b – за методом хорд:

$$a_{n+1} = a_n - f(a_n)/f'(a_n), \quad (2.10)$$

$$b_{n+1} = b_n - f(b_n)(b_n - a_n)/[f(b_n) - f(a_n)].$$

Комбінований метод є зручним для оцінки похибки обчислень. Процес обчислення кореня припиняють, як тільки стане виконуватися нерівність $(b_n - a_n) < \varepsilon$. За наближене значення кореня слід прийняти

$$z = (b_n + a_n)/2. \quad (2.11)$$

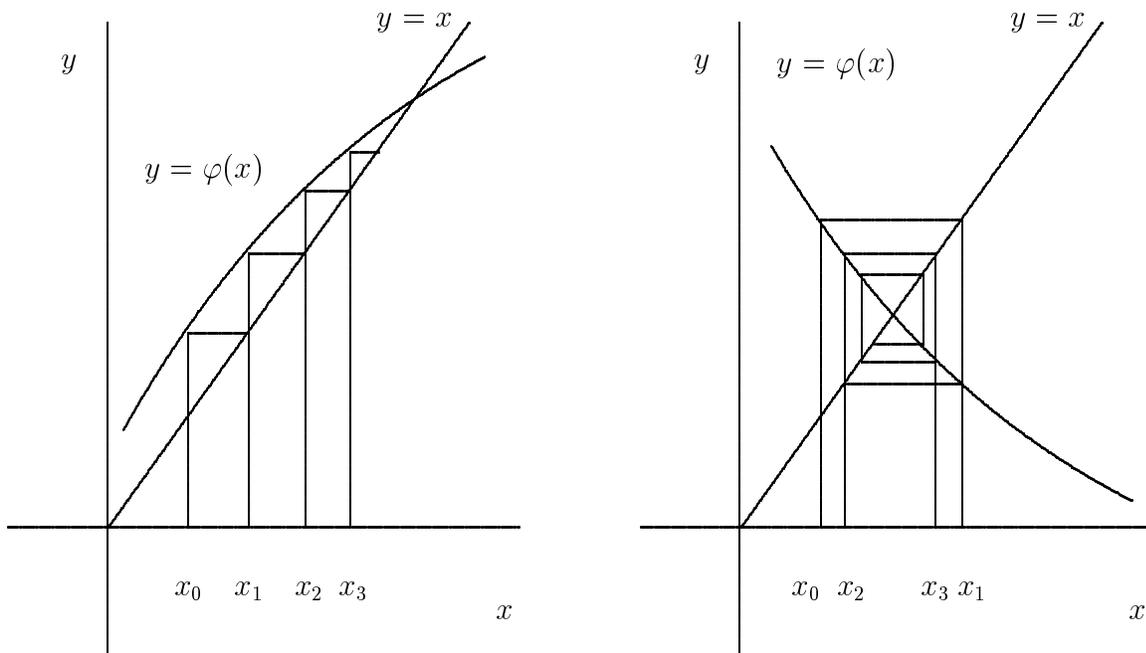


Рисунок 2.4 — Ітераційний метод знаходження нуля функції $f(x)$, $|\varphi'(x)| < 1$; ліворуч: $0 < \varphi'(x) < 1$; праворуч: $-1 < \varphi'(x) < 0$

2.6. Метод ітерацій (метод послідовних наближень)

Вимагається визначити корінь заданого рівняння $f(x) = 0$, що міститься на відрізьку $[a, b]$.

Замінімо рівняння $f(x) = 0$ рівнозначним йому рівнянням

$$x = g(x). \quad (2.12)$$

Відповідна ітераційна формула має вигляд

$$x_{n+1} = g(x_n). \quad (2.13)$$

Ітераційний процес буде збігатися, якщо виконані наступні умови :

- 1) функція $g(x)$ має значення лише на інтервалі $[a, b]$;
- 2) в усіх точках інтервалу $[a, b]$ функція $g(x)$ задовольняє нерівності

$$|g'(x)| \leq r < 1, \quad (2.14)$$

тобто її модуль строго менший за одиницю.

Рівняння $f(x) = 0$ до вигляду $x = g(x)$ можна звести різними шляхами, проте для методу ітерації слід обрати таке рівняння $x = g(x)$, для якого виконуються наведені умови. Чим менше $|g'(x)|$, тим краще збігається ітераційний процес.

Про перетворення (2.12) говорять, що функція $g(x)$ є *стислюючим оператором* з властивістю (2.14).

Похибка методу

$$|z - x_n| \leq (b - a)r^n / (1 - r). \quad (2.15)$$

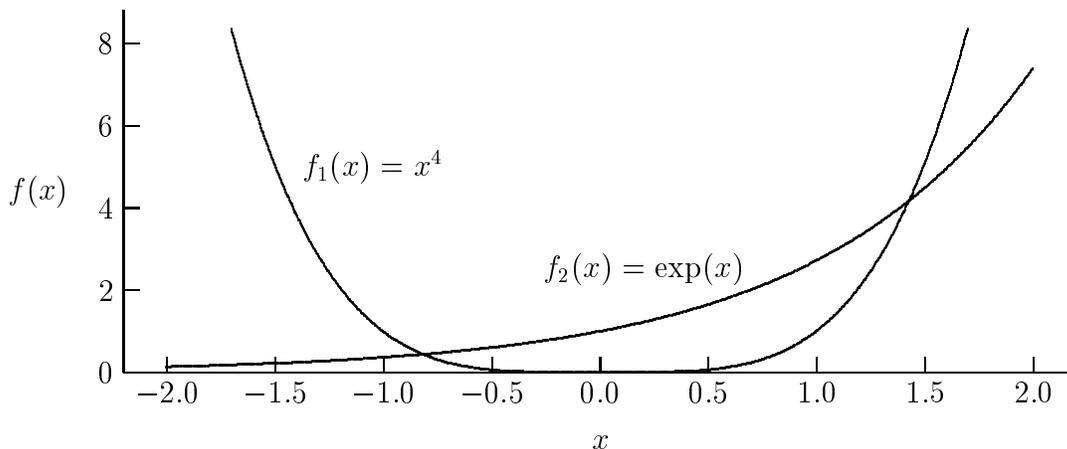


Рисунок 2.5 — Функції $f_1(x) = x^4$ та $f_2(x) = \exp(x)$

Приклад

Розглянемо задачу чисельного знаходження на інтервалі $[-2, 2]$ дійсних нулів функції

$$f(x) = x^4 - \exp(x).$$

За алгоритм знаходження нуля оберемо метод ітерацій.

В подібних задачах важливо візуально вивчити області можливих нулів x_* . З рис. 2.5 можна бачити, що на вказаному інтервалі є 2 нулі. Їх області локалізації: перший нуль $-1,0 \leq x_*^{(1)} \leq -0,5$; другий нуль $1,0 \leq x_*^{(2)} \leq 1,5$.

Для пошуку першого кореня $x_*^{(1)}$ замінимо рівняння $f(x) = 0$ відповідно з (2.13) таким рекурентним співвідношенням

$$x_{n+1} = -\exp(x_n/4), \quad x_0 = -1,$$

тут поставлено знак "–", оскільки $x < 0$. Для функції $g_1(x) = -\exp(x/4)$ на інтервалі $[-1, 0; -0,5]$ виконується умова $|g_1'(x)| < 1$. Після 10 ітерацій отримаємо $x_*^{(1)} = -0,815553$.

Для пошуку другого кореня $x_*^{(2)}$ використаємо співвідношення

$$x_{n+1} = \exp(x_n/4), \quad x_0 = 1.$$

Для функції $g_2(x) = \exp(x/4)$ на інтервалі $[1, 0; 1,5]$ також виконується умова $|g_2'(x)| < 1$. Після 12 ітерацій отримаємо $x_*^{(2)} = 1,429612$.

2.7. Приклад знаходження нулів нелінійного рівняння

Розглянемо приклад пошуку дійсних нулів функції (рис. 2.6)

$$f(x) = x \sin x - 5 \cos x,$$

при цьому обмежуємося знаходженням значень перших 6 нулів з абсолютною точністю $\varepsilon = 10^{-5}$.

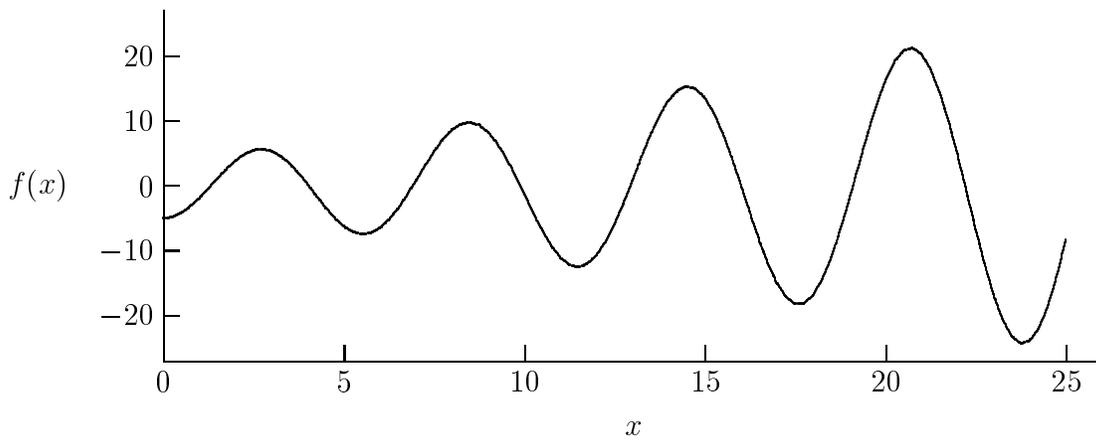


Рисунок 2.6 — Дисперсійна функція $f(x) = x \sin x - 5 \cos x$

Поротягом пошуку нулів досить важливо обрати *область локалізації*, що відноситься до кожного з нулів. Ця задача, достатньо проста в скалярному випадку, швидко ускладнюється зі збільшенням кількості змінних.

З рис. 2.6 можна бачити, що за межі $x_{\min}^{(k)}$, $x_{\max}^{(k)}$ областей локалізації k -го кореня ($k = 1, \dots, 6$) достатньо обрати:

$k = 1$	$x_{\min}^{(k)} = 0, 5;$	$x_{\max}^{(k)} = 1, 5;$
$k = 2$	$x_{\min}^{(k)} = 3, 5;$	$x_{\max}^{(k)} = 4, 5;$
$k = 3$	$x_{\min}^{(k)} = 6, 0;$	$x_{\max}^{(k)} = 7, 0;$
$k = 4$	$x_{\min}^{(k)} = 9, 0;$	$x_{\max}^{(k)} = 10, 0;$
$k = 5$	$x_{\min}^{(k)} = 12, 0;$	$x_{\max}^{(k)} = 13, 0;$
$k = 6$	$x_{\min}^{(k)} = 15, 5;$	$x_{\max}^{(k)} = 16, 5.$

Побудова алгоритмів дихотомії, хорд та дотичних безпосередньо впливає з вигляду функції $f(x)$, а також її першої та другої похідних на інтервалі. У свою чергу, при побудові алгоритму методу ітерацій, необхідно враховувати періодичні властивості фігуруючих у $f(x)$ функцій. Це дає з (2.13)

$$x_{n+1}^{(k)} = \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{5} x_n^{(k)} \right) + (k - 1)\pi.$$

Результати знаходження вказаними методами 6 коренів подано в табл. 2.1, де наведені такі значення:

I_{iter} – кількість ітерацій для отримання заданої абсолютної точності $\varepsilon = 10^{-5}$;

x_* – знайдені значення 6 коренів функції;

f_* – значення функції в знайдених коренях.

З отриманих даних випливає, що всі чотири застосовані методи дають достатні результати. При цьому, хоча методом дихотомії корені знаходяться повільніше, ніж іншими методами, однак він не вимагає додаткового дослідження поведінки похідних функцій та *завжди* визначає потрібний корінь. Методом Ньютона отримуються розв'язки, в яких $f_* = f(x_*) = 0, 000000$.

Таблиця 2.1 — Результати пошуку нулів дисперсійної функції

Номер нуля	Значення результатів	Метод дихотомії	Метод хорд	Метод Ньютона	Метод ітерацій
1	I_{iter}	18	8	4	8
	x_*	1,313839	1,313838	1,313838	1,313836
	f_*	-0,000007	0,000003	0,000000	-0,000008
2	I_{iter}	19	6	3	7
	x_*	4,033567	4,033568	4,033568	4,033568
	f_*	0,000003	-0,000003	-0,000000	-0,000002
3	I_{iter}	18	9	4	6
	x_*	6,909595	6,909595	6,909596	6,909596
	f_*	-0,000003	-0,000008	0,000000	-0,000001
4	I_{iter}	20	9	4	5
	x_*	9,892754	9,892752	9,892753	9,892753
	f_*	-0,000001	0,000005	-0,000000	-0,000001
5	I_{iter}	19	9	4	4
	x_*	12,93522	12,93522	12,935221	12,935221
	f_*	-0,000008	-0,000003	0,000000	-0,000006
6	I_{iter}	17	8	3	4
	x_*	16,010658	16,010658	16,010659	16,010658
	f_*	0,000006	0,000006	0,000000	0,000002

2.8. Розв'язування систем нелінійних рівнянь

Розглянемо систему з M рівнянь

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0, \\ f_3(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0, \\ \dots \\ f_M(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

відносно набору M змінних $X = (x_1, x_2, \dots, x_M)$ для набору заданих функцій $F = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_M(X))$.

Далі опишемо два розповсюджені методи, які використовуються для знаходження розв'язків системи (2.16).

Метод простих ітерацій

Цей метод полягає в реалізації ітераційного процесу за формулою

$$X^{(n+1)} = G(X^{(n)}); \quad (2.17)$$

при цьому $X^{(0)}$ – початковий набір змінних, що визначається на вхідному етапі роботи графічним чи будь-яким іншим способом. Векторно-визначену функцію $G(X) = (g_1(X), g_2(X), \dots, g_M(X))$ обирають аналогічно скалярному випадку.

Вона повинна задовольняти наступним умовам:

- а) значення вектора $X^{(0)}$ і всі наступні наближення $X^{(n)}$ повинні належати області, в якій знаходиться єдиний розв'язок початкової системи нелінійних рівнянь;
 б) в усіх точках означеної області повинні виконуватися нерівності

$$\sum_{k=1}^M |\partial G_m / \partial x_k| \leq 1, \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (2.18, a)$$

або нерівності

$$\sum_{m=1}^M |\partial G_m / \partial x_k| \leq 1, \quad k = 1, 2, \dots, M. \quad (2.18, b)$$

З виконанням цих умов ітераційний процес послідовних наближень збігається до розв'язку.

Метод Ньютона

Цей чисельний метод є найбільш розповсюджений при розв'язуванні систем нелінійних рівнянь.

Він реалізується наступним алгоритмом.

1. Задаємо абсолютну похибку ε та вектор початкових наближень

$$X^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_M^{(0)}). \quad (2.19)$$

2. Використовуючи явний вигляд функцій $f_1(X), f_2(X), \dots, f_M(X)$, формуємо матрицю Якобі W з наступними матричними елементами:

$$W_{km} = \partial f_k(X) / \partial x_m, \quad k, m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.20)$$

3. У циклі за номером ітерацій перевіряємо, чи $\det(W) \neq 0$, після чого складаємо систему лінійних рівнянь

$$X^{(n+1)}W^{(n)} = X^{(n)}W^{(n)} - F(X^{(n)}), \quad (2.21)$$

обертаємо матрицю Якобі і одержуємо формулу для ітераційного процесу

$$X^{(n+1)} = X^{(n)} - F(X^{(n)}) (W^{(n)})^{-1}. \quad (2.22)$$

На кожному кроці перевіряємо набір умов

$$|x_m^{(n+1)} - x_m^{(n)}| < \varepsilon, \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.23)$$

При їх виконанні ітераційний цикл припиняємо.

Збіжність методу послідовних наближень і методу Ньютона залежить від вибору початкової точки.

Важливою перевагою цього методу є висока швидкість збіжності.

Треба відмітити, що цим методом також зручно користуватися при пошуку комплексновизначених нулів системи функції.

2.9. Метод Ньютона для системи двох рівнянь

Систему рівнянь (2.16) можна розглядати в простому, але важливому випадку, коли $M = 2$.

Розглянемо систему двох рівнянь

$$\begin{cases} f(x, y) = 0, \\ g(x, y) = 0, \end{cases} \quad (2.24)$$

де $f(x, y)$ та $g(x, y)$ – неперервні та диференційовні функції.

Нехай вже знайдено n -е наближення x_n, y_n невідомих x, y . Для більш точного наближення x_{n+1}, y_{n+1} можна отримати

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x_n, \quad y_{n+1} = y_n + \Delta y_n. \quad (2.25)$$

Тоді систему (2.24) можна записати у вигляді

$$\begin{cases} f(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) = 0, \\ g(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) = 0. \end{cases} \quad (2.26)$$

Розкладемо функції $f(x, y)$ та $g(x, y)$ у ряд Тейлора в околі точки з координатами (x_n, y_n)

$$\begin{aligned} f(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) &= \\ &= f(x_n, y_n) + \Delta x_n f'_x(x_n, y_n) + \Delta y_n f'_y(x_n, y_n) + O(\Delta x_n, \Delta y_n); \\ g(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) &= \\ &= g(x_n, y_n) + \Delta x_n g'_x(x_n, y_n) + \Delta y_n g'_y(x_n, y_n) + O(\Delta x_n, \Delta y_n), \end{aligned} \quad (2.27)$$

де доданки $O(\Delta x_n, \Delta y_n)$ містять члени більш високого порядку малості, ніж Δx_n та Δy_n . Обмежемося в системі (2.26) лише лінійними доданками відносно Δx_n та Δy_n . Тоді отримуємо

$$\begin{cases} f(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) = \\ \quad = f(x_n, y_n) + \Delta x_n f'_x(x_n, y_n) + \Delta y_n f'_y(x_n, y_n) = 0, \\ g(x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n) = \\ \quad = g(x_n, y_n) + \Delta x_n g'_x(x_n, y_n) + \Delta y_n g'_y(x_n, y_n) = 0. \end{cases} \quad (2.28)$$

Вираз (2.28) можна розглядати як систему рівнянь відносно невідомих приростів Δx_n та Δy_n . Запишемо її в стандартному вигляді

$$\begin{cases} f'_x(x_n, y_n)\Delta x_n + f'_y(x_n, y_n)\Delta y_n = -f(x_n, y_n), \\ g'_x(x_n, y_n)\Delta x_n + g'_y(x_n, y_n)\Delta y_n = -g(x_n, y_n). \end{cases} \quad (2.29)$$

Введемо позначення функцій $f(x_n, y_n) = f_n$, $g(x_n, y_n) = g_n$ та частинних похідних у точці $x = x_n$, $y = y_n$: $f'_{x_n} = \partial f(x, y)/\partial x$, $f'_{y_n} = \partial f(x, y)/\partial y$,

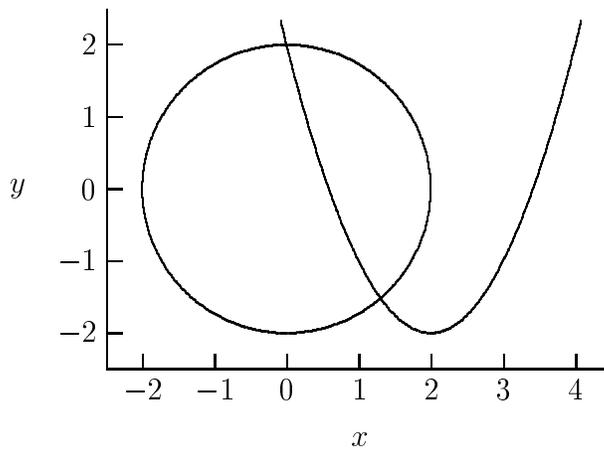


Рисунок 2.7 — Функції $x^2 + y^2 = 4$ та $y = (x - 2)^2 - 2$

$g'_{xn} = \partial g(x, y)/\partial x$, $g'_{yn} = \partial g(x, y)/\partial y$. Тоді розв'язання системи (2.29) можна записати в наступному вигляді:

$$\Delta x_n = \frac{\det \begin{pmatrix} -f_n & f'_{yn} \\ -g_n & g'_{yn} \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} f'_{xn} & f'_{yn} \\ g'_{xn} & g'_{yn} \end{pmatrix}}, \quad \Delta y_n = \frac{\det \begin{pmatrix} f'_{xn} & -f_n \\ g'_{xn} & -g_n \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} f'_{xn} & f'_{yn} \\ g'_{xn} & g'_{yn} \end{pmatrix}}. \quad (2.30)$$

Тепер можна записати

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x_n, \quad y_{n+1} = y_n + \Delta y_n. \quad (2.31)$$

Як і в інших методах, початкові значення координат x_0 та y_0 необхідно задавати, спираючись на апріорні відомості, наприклад, з графічних залежностей.

Приклад

Розглянемо систему двох рівнянь (рис. 2.7)

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 4, \\ (x - 2)^2 = 2 + y. \end{cases}$$

Користуючись методом Ньютона, знайдемо розв'язок.

1. Введемо дві функції:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= x^2 + y^2 - 4; \\ g(x, y) &= (x - 2)^2 - y - 2, \end{aligned}$$

а також їх похідні:

$$\begin{aligned} f'_x(x, y) &= \partial f(x, y)/\partial x = 2x; \\ f'_y(x, y) &= \partial f(x, y)/\partial y = 2y; \\ g'_x(x, y) &= \partial g(x, y)/\partial x = 2(x - 2); \\ g'_y(x, y) &= \partial g(x, y)/\partial y = -1. \end{aligned}$$

2. Побудуємо графіки для функцій $f(x, y)$ та $g(x, y)$. З рис. 2.7 випливає, що дійсних коренів два.

Інтервали, в яких містяться корені :

корінь № 1: $-0,5 < x < 0,5$; $1,5 < y < 2,5$;

корінь № 2: $1,0 < x < 2,0$; $-2,0 < y < -1,0$.

3. Здійснюємо пошук першого кореня.

3.1. Задаємо вектор початкових наближень шуканого кореня

$$X^{(0)} = (x_0, y_0) = (0, 0, 1, 0).$$

3.2. На основі алгоритму (2.29)–(2.31) знаходимо перший розв'язок системи рівнянь (див. табл. 2.2).

Таблиця 2.2 — Ітераційна таблиця пошуку першого нуля

Номер ітерації n	Результати обчислень			
	x_n	y_n	$f(x_n, y_n)$	$g(x_n, y_n)$
1	-0,125000	2,500000	2,265625	0,015625
2	-0,015988	2,052326	0,212296	0,011884
3	-0,000244	2,000727	0,002910	0,000248
4	-0,000000	2,000000	0,000001	0,000000
5	-0,000000	2,000000	0,000000	0,000000

4. Пошук другого кореня.

4.1. Задаємо вектор початкових наближень шуканого кореня

$$X^{(0)} = (x_0, y_0) = (2, 0; -2, 0).$$

4.2. На основі алгоритму (2.29)–(2.31) знаходимо другий розв'язок (див. табл. 2.3).

Таблиця 2.3 — Ітераційна таблиця пошуку другого нуля

Номер ітерації n	Результати обчислень			
	x_n	y_n	$f(x_n, y_n)$	$g(x_n, y_n)$
1	1,000000	-2,000000	1,000000	1,000000
2	1,300000	-1,600000	0,250000	0,090000
3	1,305367	-1,517514	0,006833	0,000029
4	1,304379	-1,516113	0,000003	0,000001
5	1,304379	-1,516112	0,000000	0,000000

2.10. Нулі поліномів

Визначення нулів поліномів можна виконати за допомогою *прямих методів* (для поліномів до четвертого степеня включно). Зручно записувати поліноми $P_n(x)$ таким чином, щоб коефіцієнт при старшому степені x^n змінної x дорівнював одиниці.

Поліном першого степеня (рис. 2.8)

$$P_1(x) = x + b \quad (2.32)$$

має розв'язання

$$x = -b. \quad (2.33)$$

Поліном другого степеня

$$P_2(x) = x^2 + bx + c \quad (2.34)$$

має два корені:

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4c}}{2}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4c}}{2}. \quad (2.35)$$

При $b^2 - 4c = 0$ ці корені збігаються. Відзначимо, що $x_1 + x_2 = -b$ і $x_1 x_2 = c$.

Поліном третього степеня (рис. 2.9), як правило, записують у вигляді

$$P_3(x) = x^3 + ax^2 + bx + c. \quad (2.36)$$

Його нулі наступні:

$$x_1 = -\frac{a}{3} + A + B, \quad x_{2,3} = -\frac{a}{3} - \frac{1}{2}(A + B) \pm i \frac{\sqrt{3}}{2}(A - B), \quad (2.37, a)$$

де

$$A = \left(-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}\right)^{1/3}; \quad B = \left(-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}\right)^{1/3} \quad (2.37, b)$$

та

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2, \quad p = -\frac{1}{3}a^2 + b, \quad q = \frac{2}{27}a^3 - \frac{1}{3}ab + c, \quad (2.37, c)$$

причому за параметри A та B беруть будь-яку пару кубічних коренів, що задовольняють співвідношенню $AB = -p/3$.

Це – розв'язання Кардано.

Якщо поліном (2.36) має дійсні коефіцієнти, то рівняння $P_3(x) = 0$ має принаймні один дійсний корінь і два спряжених комплексних корені.

Рівняння четвертого степеня

$$P_4(x) = x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d = 0 \quad (2.38)$$

підстановкою $x = y - a/4$ приводять до вигляду

$$P_4(y) = y^4 + py^2 + qy + r = 0. \quad (2.39)$$

Корені y_1, y_2, y_3, y_4 "неповного" рівняння четвертого степеня дорівнюють одному з виразів

$$\pm\sqrt{z_1} \pm \sqrt{z_2} \pm \sqrt{z_3}, \quad (2.40)$$

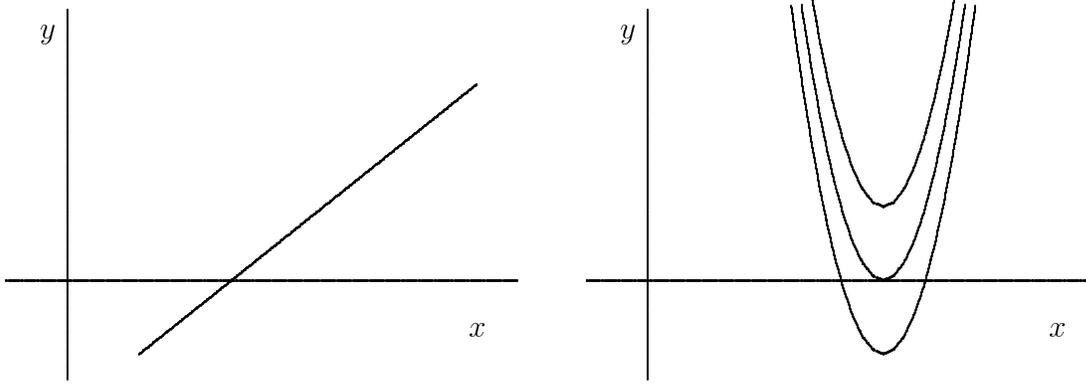


Рисунок 2.8 — Нулі поліномів (ліворуч: $n = 1$; один простий нуль; праворуч: $n = 2$; дійсних нулів немає (зверху), один нуль подвійної кратності (посередині), два простих дійсних нулі (знизу))

в яких поєднання знаків підбираються таким чином, щоб задовольняти умові $\sqrt{z_1}\sqrt{z_2}\sqrt{z_3} = -q/8$, причому z_1, z_2, z_3 — корені кубічного рівняння :

$$z^3 + \frac{p}{2}z^2 + \frac{p^2 - 4r}{16}z - \frac{q^2}{64} = 0. \quad (2.41)$$

Це — розв’язання Декарта-Ейлера.

Рівняння n 'ятого степеня і більш високих степенів розв’язання у радикалах не мають (крім спеціально підібраних випадків). Для знаходження нулів рівняння $P_n(x) = 0$, $n = 5, 6, \dots$ необхідно застосовувати чисельні або наближені методи.

2.11. Загальні властивості алгебраїчних рівнянь

Відносно алгебраїчних рівнянь можна вказати ряд властивостей, використання яких дозволяє прискорити процес розв’язування задачі.

Загальний вигляд алгебраїчного рівняння n -го степеня :

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = 0. \quad (2.42)$$

Властивості алгебраїчних рівнянь.

1. *Основна теорема алгебри Гаусса.* Алгебраїчне рівняння степеня n має n коренів, які можуть бути як дійсними, так і комплексними. При цьому кожний корінь рахується стільки разів, скільки дорівнює його кратність. Кратність кореня z_* дорівнює k , якщо

$$P_n(z_*) = P_n'(z_*) = P_n''(z_*) = \dots = P_n^{(k-1)}(z_*) = 0, \quad P_n^{(k)}(z_*) \neq 0. \quad (2.43)$$

Якщо всі коефіцієнти $\{a\}$ рівняння (2.43) дійсні, то всі комплексні корені утворюють комплексно-спряжені пари. Якщо всі коефіцієнти $\{a\}$ рівняння (2.43) дійсні, а степінь n поліному $P_n(x)$ непарний, то поліном має принаймні один дійсний нуль.

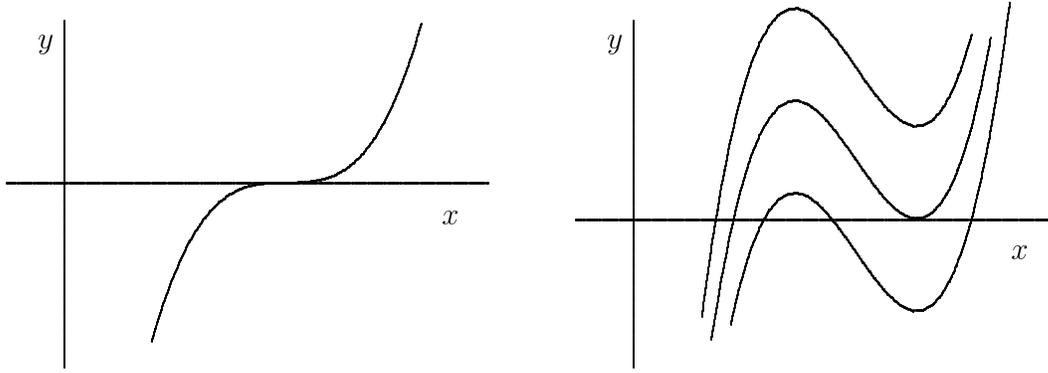


Рисунок 2.9 — Дійсні нулі полінома, $n = 3$ (ліворуч: кратність нуля — 3; праворуч: один простий (зверху), один простий та один подвійної кратності (посередині), три простих нулі (знизу))

2. *Теорема Декарта.* Нехай кожний із додатних дійсних коренів рівняння $P_n(x) = 0$ рахується за числом його кратності. Тоді кількість нулів дорівнює кількості дійсних коефіцієнтів цього алгебраїчного рівняння або дорівнює кількості змін знаків у послідовності коефіцієнтів $\{a\}$, або на парне число менше (коефіцієнти, що дорівнюють нулю, не враховуються).

3. *Теорема Лагранжа.* У полінома $P_n(x)$ верхня межа додатних дійсних коренів визначається як

$$R = 1 + (B/a_0)^{1/n}, \quad a_0 > 0, \quad (2.44)$$

де a_0 — перший від'ємний коефіцієнт, B — найбільша абсолютна величина від'ємного коефіцієнта.

4. *Правило Безу.* Нехай поліном $P_n(x)$, у якого $a_n = 1$, має набір нулів $z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, z_n$ (з урахуванням кратності). Тоді поліном $P_n(x)$ може бути записаний у такому факторизаційному зображенні:

$$P_n(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0 = \prod_{j=1}^n (x - z_j). \quad (2.45)$$

Це зображення можна використовувати для контролю знайдених значень нулів $z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, z_n$. Наприклад,

$$\sum_{j=1}^n z_j = -a_{n-1}, \quad \prod_{j=1}^n z_j = (-1)^n a_0, \quad (2.46)$$

де a_{n-1} — коефіцієнт при x^{n-1} , а a_0 — вільний член полінома.

5. *Теорема Гюа.* Якщо рівняння $P_n(x) = 0$ має дійсні корені та дійсні коефіцієнти, то

$$a_k^2 > a_{k-1}a_{k+1}. \quad (2.47)$$

2.12. Чисельне знаходження нулів поліномів

Задача знаходження нулів поліномів є нестійкою задачею, оскільки значення нулів є досить чутливими до зміни коефіцієнтів. У цьому легко переконатися, якщо розглянути, наприклад, поліноми

$$f_1(z) = (z - 1)^{10}, \quad f_2(z) = (z - 1)^{10} - 10^{-10}. \quad (2.48)$$

Вони відрізняються тільки вільними членами на величину 10^{-10} . Між тим, у першого багаточлена єдиний дійсний корінь $z = 1$ кратності 10, а у другого багаточлена 10 однократних коренів

$$z_k = 1 + 0,1 \left[\cos \left(\frac{k\pi}{5} \right) + i \sin \left(\frac{k\pi}{5} \right) \right], \quad k = 1, 2, \dots, 10. \quad (2.49)$$

У загальному випадку необхідно виходити з припущення, що корені багаточлена є комплексно-визначеними. Крім того, комплексно-визначеними можуть бути і його коефіцієнти.

Задачу знаходження нулів, як правило, виконують у три етапи.

Етап 1. На цьому етапі корені *локалізують (ізолюють)*.

З цією метою визначають *мажорантну область*, тобто район на комплексній площині, в якому вірогідно містяться всі нулі. В мажорантній області утворюють область перегляду Ω . Локалізацію нулів полінома N -го степеню $P_N(z)$ в області перегляду здійснюють за допомогою дійсної функції

$$M(z) = |P_N(z)|. \quad (2.50)$$

Таким чином, мінімуми функції $M(z)$, що дорівнюють нулю, збігаються з коренями полінома $P_N(z)$. Для пошуку мінімумів заданої функції двох аргументів розроблено чимало різноманітних чисельних методів. Мінімуми можуть міститися достатньо близько, а якщо корені є кратними – то збігатися. В цьому випадку кількість мінімумів буде менша за степінь N полінома. Якщо кількість нулів не надто велика, нулі можна локалізувати візуально. Тепер з місцем локалізації конкретного нуля виділяють його мажорантну область, тобто район на комплексній площині, що містить тільки один нуль.

Етап 2. В мажорантній області, що відноситься, наприклад, до конкретного нуля z_1 , *уточнюють* його значення.

Тут використовують такі ітераційні методи, як метод хорд або метод Ньютона, що припускають застосування комплексно-визначених змінних. Початкове значення при цьому беремо в мажорантній області якомога близьким до припускаємої точки кореня. Знайдене значення кореня z_1 виділяють

$$P_N(z) = (z - z_1)P_{N-1}(z), \quad (2.51)$$

а з новим поліномом $P_{N-1}(z)$ степеня на одиницю менше та продовжують роботу згідно з етапом 1.

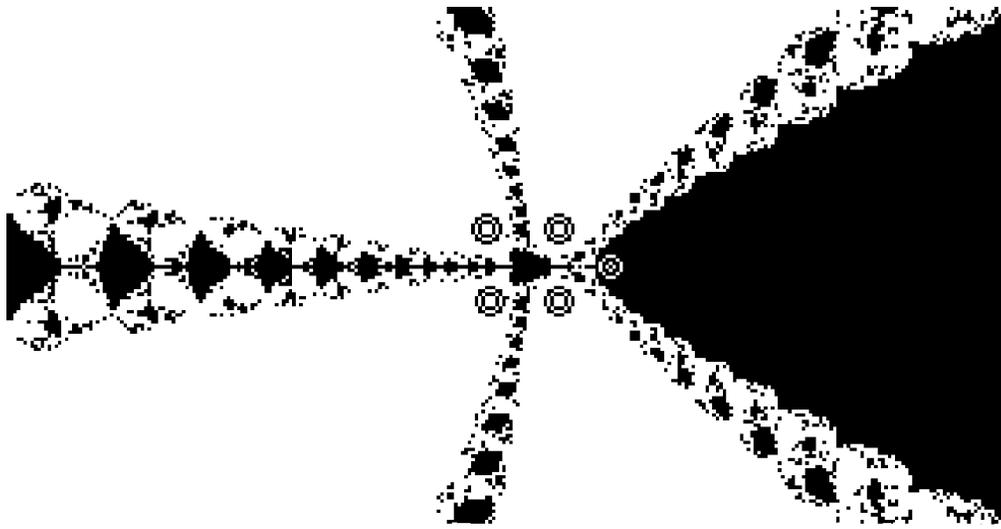


Рисунок 2.10 — Фрактальний басейн притягування обраного кореня $z_1 = 0,5$ багаточлена $P_5(z) = (z - 0,5)[(z + 0,2)^2 + 0,04][(z - 0,2)^2 + 0,04]$ (чорним кольором показано початкові точки $\{z_{nm}\}$, з яких при пошуку нуля був знайдений корінь $z_1 = 0,5$; кульками показані координати вихідних коренів багаточлена)

Етап 3. На цьому етапі всі знайдені нулі *перевіряють* шляхом прямої підстановки у початковий поліном. Перевіряють також інваріантні властивості коренів багаточлена відповідно (2.46).

Приклад

Розглянемо багаточлен 5-го степеня від комплексно-визначеного аргументу $z = x + iy$

$$P_5(z) = (z - 0,5)[(z + 0,2)^2 + 0,04][(z - 0,2)^2 + 0,04].$$

За алгоритм знаходження нуля оберемо метод Ньютона.

Поставимо задачу вивчення збіжності до нуля $z_1 = 0,5$ залежно від обраного початкового значення z_0 .

З цією метою на комплексній z -площині \mathcal{Z} оберемо прямокутну область розміром $(-3,0 \leq x \leq 3,0)$, $(-1,5 \leq y \leq 1,5)$, яку (для побудови рисунка) рівномірно заповнимо точками з двовимірного масива початкових значень $\{z_{nm} = (x_n, y_m) \in \mathcal{Z}_0\}$, $n = 0, 1, \dots, N$, $m = 0, 1, \dots, M$.

Загальна кількість $(N + 1) \times (M + 1)$ елементів масива \mathcal{Z}_0 пов'язана з вимогою до якості рисунка та може бути обрана, наприклад, $N = 300$ та $M = 150$.

Побудуємо тепер рисунок, який називають *басейном притягування кореня*. При побудові такого рода рисунка приймемо правило зафарбування :

- якщо при старті з будь-якої чергової точки z_{nm} в результаті застосування алгоритму пошуку нуля був знайдений корінь $z_1 = 0,5$, то такі стартові точки домовимось фарбувати, наприклад, у чорний колір;

- якщо ж при старті з будь-якої чергової точки z_{nm} дія алгоритму привела до будь-якого з чотирьох інших нулів (z_2, z_3, z_4, z_5) , то такі стартові точки домовимось фарбувати, наприклад, у білий колір.

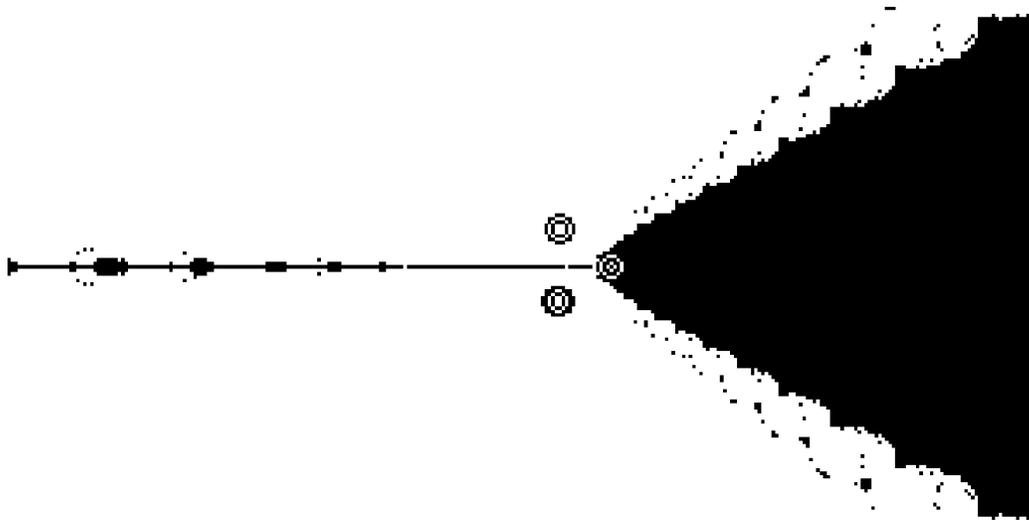


Рисунок 2.11 — Фрактальний басейн притягування обраного кореня $z_1 = 0,5$ багаточлена $P_5(z) = (z - 0,5)[(z - 0,2)^2 + 0,04]^2$ (чорним кольором показано початкові точки $\{z_{nm}\}$, з яких при пошуку нуля був знайдений корінь $z_1 = 0,5$; кульками показані координати вихідних коренів багаточлена)

Рисунки такого вигляду зручно отримувати за допомогою сучасних математичних пакетів, наприклад, Maple або Mathematica.

Організуємо тепер подвійний цикл по змінних x та y , по завершенні якого заповнимо двовимірний масив початкових значень $\{z_{nm} \in \mathcal{Z}_0\}$.

На рис. 2.10 наведено басейн притягування кореня $z_1 = 0,5$ багаточлена

$$P_5(z) = (z - 0,5)[(z + 0,2)^2 + 0,04][(z - 0,2)^2 + 0,04],$$

точки якого вказані чорним кольором. Точки, що пофарбовані білим кольором, належать до басейна притягування інших чотирьох коренів, значення яких такі: $z_{2,3} = 0,2 \pm i0,2$; $z_{4,5} = -0,2 \pm i0,2$.

Можна побачити досить складну межу басейна притягування (можливості друку не дозволяють показати всі п'ять басейнів притягування).

На рис. 2.11 показаний той же басейн притягування кореня $z_1 = 0,5$ багаточлена

$$P_5(z) = (z - 0,5)[(z - 0,2)^2 + 0,04]^2,$$

при чому значення інших коренів у якого наступні: $z_{2,3} = 0,2 \pm i0,2$; $z_{4,5} = 0,2 \pm i0,2$.

Таким чином, у цього багаточлена є дві пари кратних нулів.

Можна побачити, що відносно невелика зміна значення або структури коренів визначально впливає на вигляд басейну. Про рисунки такого типу кажуть, що вони мають *фрактальні властивості*.

2.13. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на вісім годин і містить чотири завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму знаходження нуля заданої функції. Програма повинна містити чотири алгоритми, що ґрунтуються на методі половинного ділення, методі хорд, методі Ньютона і комбінованому методі хорд і дотичних.

Вхідні дані для програми:

$[a, b]$ – інтервал ізоляції кореня;

$f(x)$ – функція, нуль якої відшукується.

Результат роботи програми – масив, що містить таблицю послідовних наближень нуля функції і значень самої функції.

Варіанти

- | | | | |
|----|--------------|-------------|--|
| а) | $a = 1,57;$ | $b = 3,14;$ | $f(x) = x^2 - 5 \sin(x);$ |
| б) | $a = 0,00;$ | $b = 1,00;$ | $f(x) = \exp(x) - 10x;$ |
| в) | $a = 0,50;$ | $b = 1,00;$ | $f(x) = \sin(x) - x + 0.15;$ |
| г) | $a = 0,60;$ | $b = 0,70;$ | $f(x) = \exp(x) - x - 1.25;$ |
| д) | $a = -0.80;$ | $b = 0,80;$ | $f(x) = x^3 - x + \operatorname{tg}(x);$ |
| е) | $a = 0,0;$ | $b = 0,50;$ | $f(x) = (x - 0.25)^2;$ |
| ж) | $a = 0,00;$ | $b = 0,50;$ | $f(x) = (x - 0.25)^3.$ |

З а в д а н н я 2

Напишіть програму чисельного знаходження кореня рівняння. Використайте метод послідовних наближень.

Вхідні дані для програми:

$[a, b]$ – інтервал ізоляції кореня;

$f(x)$ – функція у рівнянні $f(x) = 0$, корінь якого відшукується.

Результат роботи програми – масив, що містить таблицю послідовних наближень кореня рівняння і значень самої функції.

Варіанти

- | | | | |
|----|------------|------------|-------------------------------|
| а) | $a = 0,8;$ | $b = 1,0;$ | $0,1 \sin(x) + x^3 - 1 = 0;$ |
| б) | $a = 2,2;$ | $b = 2,4;$ | $x - 1,25 \ln(x) - 1,25 = 0;$ |
| в) | $a = 1,0;$ | $b = 2,0;$ | $0,1x^2 - x \ln(x) = 0;$ |
| г) | $a = 0,0;$ | $b = 2,5;$ | $x + \lg(x) - 0,5 = 0;$ |
| д) | $a = 0,4;$ | $b = 0,5;$ | $\sin(x) - 2x + 0,5 = 0.$ |

З а в д а н н я 3

Напишіть програму чисельного розв'язування системи нелінійних рівнянь. Використайте метод послідовних наближень і метод Ньютона.

Вхідні дані для програми:

M – кількість змінних;

X_0 – вектор початкового наближення розв'язку;

$F(X) = 0$ – набір рівнянь, розв'язання яких відшукується.

Результат роботи програми – масив, що містить таблицю послідовних значень вектора розв'язку, а також результат підстановки розв'язку у кожне з рівнянь заданої системи.

Варіанти

а) $M = 2$: $X_0 = (0, 5; 0, 5)$,

$$\begin{cases} x^3 + y^3 - 6x + 3 = 0, \\ x^3 - y^3 - 6y + 2 = 0; \end{cases}$$

б) $M = 2$: $X_0 = (0, 5; 0, 2)$,

$$\begin{cases} x - y - 6 \ln(x) - 1 = 0, \\ x - 3y - 6 \ln(y) - 2 = 0; \end{cases}$$

в) $M = 2$: $X_0 = (1, 0; 0, 47)$,

$$\begin{cases} \cos(0, 4 + x^2) + x^2 + y^2 - 1, 6 = 0, \\ 0, 54x^2 - y^2 - 1 = 0; \end{cases}$$

г) $M = 3$: $X_0 = (1, 0; 2, 2; 2, 0)$,

$$\begin{cases} \ln(y) - \ln(z) - x + 1 = 0, \\ 2x^2 + y - z - 0, 4 = 0, \\ xy - 20z + 40 = 0. \end{cases}$$

З а в д а н н я 4

Напишіть програму знаходження нулів заданого полінома. Програма повинна містити перевірку знайдених нулів і виконання інваріантних властивостей (2.46).

Вхідні дані для програми :

N – степінь полінома;

$P_N(x)$ – поліном, набір нулів якого відшукується.

Результат роботи програми – масив, що містить таблицю значень нулів полінома, а також результат перевірки інваріантних властивостей (2.46).

Варіанти

а) $N = 3$; $P_N(x) = x^3 + 6x - 5$;

б) $N = 3$; $P_N(x) = x^3 - 2x + 7$;

в) $N = 3$; $P_N(x) = x^3 - 2x^2 + x + 1$;

г) $N = 3$; $P_N(x) = x^3 + 4x - 3$;

д) $N = 3$; $P_N(x) = x^3 - 12x - 8$.

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити :

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, що містить таблицю послідовних наближень нуля функції і значень самої функції;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

2.14. Завдання для перевірки

1. Проведіть класифікацію методів знаходження нулів функції.
2. У чому відмінність методу Ньютона від методу хорд?
3. Чому для розв'язування систем нелінійних рівнянь можливе застосування лише ітераційних методів?
4. Обґрунтуйте формулу, яка узагальнює ітераційний процес у методі Ньютона

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n) - \frac{1}{2}f''(x_n)/(f'(x_n))^3.$$

5. Складіть блок-схему алгоритму знаходження нулів функції :
 - за методом дихотомії,
 - за методом хорд,
 - за методом Ньютона,
 - за комбінованим методом хорд і дотичних,
 - за методом ітерацій.
6. Побудуйте блок-схему алгоритму розв'язування системи нелінійних рівнянь :
а) методом ітерацій, б) методом Ньютона.
7. Які з вище розглянутих методів можна використати для знаходження комплексновизначених нулів поліномів?
8. Які з вище розглянутих методів можна використати для знаходження нулів поліномів з комплексновизначеними коефіцієнтами?
9. Які з описаних вище методів можна застосовувати для знаходження комплексновизначених нулів функції?
10. Запропонуйте варіант використання методу Ньютона при знаходженні нулів полінома з кратністю, яка дорівнює двом.

Для використання компактного запису введемо вектор-стовпчик невідомих X і вектор-стовпчик вільних членів B :

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_N \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

У таких позначеннях СЛАР має вигляд

$$AX = B. \quad (3.5)$$

Чисельні методи знаходження розв'язання СЛАР, які застосовують на практиці, з точки зору організації обчислень ділять на два класи: *прямі* (точні) та *ітераційні* (наближені).

Прямими називаються такі методи, які дозволяють отримати точне розв'язання за скінченну кількість арифметичних операцій (за припущенням, що обчислення виконують без округлення). До таких методів належать метод Крамера і метод Гаусса з вибором головного елемента.

Ітераційні методи (також за припущенням, що обчислення виконуються без округлень) дістають наближений розв'язок системи з наперед заданою точністю. Можна сказати, що за допомогою ітераційного методу точний розв'язок дістається внаслідок нескінченного (граничного) процесу. Характерним прикладом є метод Зейделя.

Перед тим як перейти до опису різних методів знаходження розв'язку СЛАР, підкреслимо, що кожний з них *повинен завершуватись перевіркою*, тобто підстановкою знайденого вектора розв'язання у початкову систему.

3.3. Метод Крамера розв'язування СЛАР

Вважаємо далі, що матриця системи A не вироджена, тобто $\det A \neq 0$, і вектор вільних членів B ненульовий ($B \neq 0$). Протилежний випадок, коли $\det A = 0$ і $B = 0$, тобто має місце однорідна СЛАР, розглядати не будемо.

Якщо ці умови виконані, система рівнянь (3.3) має єдиний розв'язок. Значення невідомих x_j ($j = 1, 2, \dots, N$) можуть бути отримані за *формулою Крамера*

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.6)$$

Тут $\det A$ – *визначник матриці* A і $\det A_j$ – визначник матриці A_j , яка утворюється з матриці системи A заміною її j -го стовпчика на стовпчик B вільних членів СЛАР.

З практичного погляду метод Крамера є зручним у випадку СЛАР порівняно невеликого розміру ($N \leq 4$), тому його часто використовують при "ручних" обчисленнях.

З подальшим зростанням розміру, коли $N \geq 5$, ефективність методу швидко знижується. Це пов'язано з тим фактом, що його реалізація вимагає виконання

значної кількості арифметичних операцій (тобто великих ресурсів). Як недолік даного методу слід також відзначити підвищену чутливість до похибок округлень.

Приклад

Розглянемо СЛАР

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 = 7, \\ 3x_1 + 4x_2 = 10. \end{cases}$$

Для неї

$$\det A = \det \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = -1 \neq 0.$$

Оскільки кількість рівнянь збігається з кількістю невідомих, розв'язання існує і єдине. Для його знаходження обчислимо:

$$\det A_1 = \det \begin{pmatrix} 7 & 3 \\ 10 & 4 \end{pmatrix} = -2; \quad \det A_2 = \det \begin{pmatrix} 2 & 7 \\ 3 & 10 \end{pmatrix} = -1.$$

Це дає

$$x_1 = \frac{\det A_1}{\det A} = 2; \quad x_2 = \frac{\det A_2}{\det A} = 1.$$

Підстановкою знайдених розв'язків у вихідну СЛАР переконуємося, що рівняння системи перетворюються в тотожності.

3.4. Метод Гаусса з вибором головного елемента

Розв'язання СЛАР цим методом проводять у два етапи.

На першому етапі (*прямий хід*) послідовним виключенням невідомих складають перетворену еквівалентну систему рівнянь з *трикутною матрицею*, в якій всі елементи під головною діагоналлю дорівнюють нулю. При цьому одне з рівнянь (останнє) містить тільки одну невідому, а в кожному попередньому додається ще по одній змінній.

На другому етапі (*зворотний хід*) розв'язують перетворену систему, послідовно визначаючи значення невідомих.

Розглянемо алгоритм методу докладніше.

Прямий хід

1) Серед елементів a_{ij} , ($i, j = 1, 2, \dots, N$), матриці A визначають найбільший за модулем a_{pq} , який називають *головним елементом*. Відповідний рядок матриці A з номером p називається *головним рядком*. Припустимо, що $a_{pq} = a_{11}$. Якщо це не так, то міняють місцями перший рядок з p -м рядком і перший стовпчик з q -м стовпчиком, відповідно перенумеруючи коефіцієнти і невідомі. Інформація про перенумерацію запам'ятовується. Внаслідок перенумерації перший рядок стає головним.

2) Визначене на попередньому етапі перше рівняння системи поділяють на $a_{pq} = a_{11}$

$$x_1 + c_{12}x_2 + \dots + c_{1N}x_N = d_1, \quad (3.7)$$

де $c_{1j} = a_{1j}/a_{11}$, $d_1 = b_1/a_{11}$.

Найбільшими за модулем елементами матриці A є a_{21} та a_{42} . Оскільки їх модулі рівні, оберемо, наприклад, другий рядок СЛАР та переставимо його з першим. Цим виконаємо крок 1. Поділивши в отриманому першому (головному) рядку елементи на $a_{11} = -5$ (крок 2), отримаємо СЛАР

$$\begin{cases} x_1 - \frac{1}{5}x_2 - \frac{3}{5}x_3 + \frac{4}{5}x_4 = \frac{12}{5}, \\ 3x_1 + x_2 - x_3 + 2x_4 = 6, \\ 2x_1 + x_3 - x_4 = 1, \\ x_1 - 5x_2 + 3x_3 - 3x_4 = 3. \end{cases}$$

Виконуючи крок 3, виключимо невідому x_1

$$\begin{cases} x_1 - \frac{1}{5}x_2 - \frac{3}{5}x_3 + \frac{4}{5}x_4 = \frac{12}{5}, \\ \frac{8}{5}x_2 + \frac{4}{5}x_3 - \frac{2}{5}x_4 = -\frac{6}{5}, \\ \frac{2}{5}x_2 + \frac{11}{5}x_3 - \frac{13}{5}x_4 = -\frac{19}{5}, \\ -\frac{24}{5}x_2 + \frac{18}{5}x_3 - \frac{19}{5}x_4 = \frac{3}{5}. \end{cases}$$

Виключаючи з цієї СЛАР перший рядок, отримаємо СЛАР для невідомих x_2, x_3, x_4 . У новій СЛАР максимальним за модулем елементом є елемент $c_{42} = -24/5$. Переставляючи в цій СЛАР третій та перший рядки, отримаємо після ділення на c_{42} (крок 4) СЛАР

$$\begin{cases} x_2 - \frac{18}{24}x_3 + \frac{19}{24}x_4 = -\frac{3}{24}, \\ 8x_2 + 4x_3 - 2x_4 = -6, \\ 2x_2 + 11x_3 - 13x_4 = -19, \end{cases}$$

що після виключення x_2 дає

$$\begin{cases} x_2 - \frac{18}{24}x_3 + \frac{19}{24}x_4 = -\frac{3}{24}, \\ 6x_3 - 5x_4 = -3, \\ 6x_3 - 7x_4 = -9. \end{cases}$$

Останні два рівняння в цій СЛАР дають

$$\begin{cases} x_3 - \frac{5}{6}x_4 = -\frac{3}{6}, \\ 2x_4 = 6. \end{cases}$$

Поєднуючи всі головні рівняння, отримаємо (крок 5) систему

$$\begin{cases} x_1 - \frac{1}{5}x_2 - \frac{3}{5}x_3 + \frac{4}{5}x_4 = \frac{12}{5}, \\ x_2 - \frac{18}{24}x_3 + \frac{19}{24}x_4 = -\frac{3}{24}, \\ x_3 - \frac{5}{6}x_4 = -\frac{3}{6}, \\ 2x_4 = 6. \end{cases}$$

Зворотний хід за формулами (3.10) приводить до наступного розв'язання вихідної СЛАР:

$$\begin{cases} x_4 = 3, \\ x_3 = 2, \\ x_2 = -1, \\ x_1 = 1. \end{cases}$$

Прямою перевіркою початкової СЛАР переконуємося, що це розв'язання перетворює рівняння в тотожності.

3.5. Обчислення визначника і оберненої матриці за допомогою прямих методів розв'язування СЛАР

Використовуючи розглянуті методи розв'язування СЛАР і враховуючи факторизацію матриці системи (3.1) у вигляді трикутних матриць, можна обчислити значення визначника матриці A за формулою

$$\det A = a_{11}a_{22}^{(1)} \dots a_{NN}^{(N-1)} \det P. \quad (3.11)$$

Виникаючи в цьому виразі матрицю P отримуємо перестановкою рядків одиничної матриці E . Тому

$$\det P = \begin{cases} 1 & \text{при парній кількості } k \text{ перестановок,} \\ -1 & \text{при непарній кількості } k \text{ перестановок.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Остаточно визначник матриці A дорівнює

$$\det A = (-1)^k a_{11}a_{22}^{(1)} \dots a_{NN}^{(N-1)}. \quad (3.13)$$

Якщо матриця A є діагональною матрицею D , то маємо

$$\det A = [\det D \cdot \det D^T]^{1/2} = \det D = a_{11}a_{22} \dots a_{NN}. \quad (3.14)$$

Обернена матриця A^{-1} визначається в результаті розв'язування N систем лінійних рівнянь розміром N методом Гаусса для послідовності невідомих векторів X_i

$$AX_i = E_i, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (3.15)$$

де E_i – i -й стовпчик одиничної матриці E .

Здобуті вектори розв'язань X_1, X_2, \dots, X_N у сукупності утворюють N стовпчиків матриці A^{-1} , оскільки $AA^{-1} = E$.

3.6. Метод послідовних наближень

На практиці застосування прямих методів обмежується, як правило, розміром M матриці системи A .

Ітераційний метод послідовних наближень полягає в наступному. Спочатку задається якийсь довільний вектор X^0 , що є початковим наближенням до шуканого

розв'язання X^* . Потім будують послідовність наближених значень $\{X^k\}$, $k = 0, 1, \dots$, що збігаються до точного розв'язання СЛАР X^* .

Вважають, що послідовність векторів $X^0, X^1, \dots, X^k, \dots$ збігається до вектора X^* , якщо для будь-якого значення $\varepsilon > 0$ існує натуральне число K , починаючи з якого ($k \geq K$) виконується умова

$$|X^* - X^k| \leq \varepsilon. \quad (3.16)$$

Алгоритм методу складається з таких кроків.

1. Вхідну систему (3.3) вигляду $AX = B$ розв'язують відносно невідомих x_1, x_2, \dots, x_N , тобто приводять до вигляду

$$\begin{cases} x_1 = c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 + \dots + c_{1N}x_N + d_1, \\ x_2 = c_{21}x_1 + c_{22}x_2 + c_{23}x_3 + \dots + c_{2N}x_N + d_2, \\ x_3 = c_{31}x_1 + c_{32}x_2 + c_{33}x_3 + \dots + c_{3N}x_N + d_3, \\ \dots \\ x_N = c_{N1}x_1 + c_{N2}x_2 + c_{N3}x_3 + \dots + c_{NN}x_N + d_N. \end{cases} \quad (3.17)$$

Таке перетворення завжди можливе, якщо $\det A \neq 0$, і може бути виконане різними способами.

2. Задають початкове наближення $X^0 = (x_1^0, \dots, x_N^0)$. Хоча початковий вектор X^0 може бути вибраний довільно, необхідно використовувати всю наявну априорну інформацію про систему (3.3), щоб дібраний X^0 розмістився якомога близько до істинного розв'язання X^* СЛАР.

3. За заданим вектором X^0 обчислюють вектор X^1 , використовуючи формули

$$\begin{cases} x_1^1 = c_{11}x_1^0 + c_{12}x_2^0 + c_{13}x_3^0 + \dots + c_{1N}x_N^0 + d_1, \\ x_2^1 = c_{21}x_1^0 + c_{22}x_2^0 + c_{23}x_3^0 + \dots + c_{2N}x_N^0 + d_2, \\ x_3^1 = c_{31}x_1^0 + c_{32}x_2^0 + c_{33}x_3^0 + \dots + c_{3N}x_N^0 + d_3, \\ \dots \\ x_N^1 = c_{N1}x_1^0 + c_{N2}x_2^0 + c_{N3}x_3^0 + \dots + c_{NN}x_N^0 + d_N. \end{cases} \quad (3.18)$$

4. Початковий вектор X^0 замінюють вектором X^1 і обчислюють друге наближення – вектор X^2 . У загальному випадку $(k + 1)$ -і наближення визначають за формулами

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = c_{11}x_1^k + c_{12}x_2^k + c_{13}x_3^k + \dots + c_{1N}x_N^k + d_1, \\ x_2^{k+1} = c_{21}x_1^k + c_{22}x_2^k + c_{23}x_3^k + \dots + c_{2N}x_N^k + d_2, \\ x_3^{k+1} = c_{31}x_1^k + c_{32}x_2^k + c_{33}x_3^k + \dots + c_{3N}x_N^k + d_3, \\ \dots \\ x_N^{k+1} = c_{N1}x_1^k + c_{N2}x_2^k + c_{N3}x_3^k + \dots + c_{NN}x_N^k + d_N. \end{cases} \quad (3.19)$$

Описаний в п. 4 процес продовжують доти, доки всі x_j^{k+1} не стануть близькими до x_j^k , $j = 1, 2, \dots, N$. Ітерації припиняють, коли виконується умова

$$\max_j |x_j^{k+1} - x_j^k| < \varepsilon, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.20)$$

де ε – деяке задане додатне число (точність обчислень).

Збіжність ітераційного процесу характеризується такою умовою. Вхідну СЛАР (3.3) $AX = B$ приводять до вигляду

$$X^{k+1} = CX^k + D, \quad (3.21)$$

де $C = E - q^{-1}A$, $D = q^{-1}B$; q – деяка стала, що використовується в алгоритмі.

Якщо сума модулів елементів рядків або сума модулів елементів стовпчиків менше одиниці:

$$\sum_{j=1}^N |c_{ij}| < 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.22a)$$

або

$$\sum_{i=1}^N |c_{ij}| < 1, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.22b)$$

то ітераційний процес для даної системи збігається до єдиного розв'язання незалежно від вибору початкового вектора. Швидкість збіжності, тобто кількість ітерацій, необхідних для знаходження розв'язання початкової СЛАР згідно з умовою (3.20), залежить від виконання нерівностей (3.22).

Хоча параметр q в алгоритмі (3.21) може бути довільним, тільки б виконувались умови збіжності (3.22), але з можливих значень параметра q необхідно зупинитися на тому значенні, яке надає мінімум лівій частині в (3.22).

Приклад

Систему рівнянь

$$\begin{cases} 8x_1 + x_2 + x_3 = 26, \\ x_1 + 5x_2 - x_3 = 7, \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 7 \end{cases}$$

приведемо до вигляду (3.21)

$$\begin{cases} x_1 = -0,125x_2 - 0,125x_3 + 3,250, \\ x_2 = -0,200x_1 + 0,200x_3 + 1,400, \\ x_3 = -0,200x_1 + 0,200x_2 + 1,400. \end{cases}$$

Умова гарантованої збіжності для цієї СЛАР виконана, оскільки

$$|c_{11}| + |c_{21}| + |c_{31}| = 0,400 < 1;$$

$$|c_{12}| + |c_{22}| + |c_{32}| = 0,325 < 1;$$

$$|c_{13}| + |c_{23}| + |c_{33}| = 0,325 < 1.$$

Оберемо початковий вектор рівним $X^0 = (2, 2, 2)$. Якість розв'язання будемо характеризувати за допомогою величини

$$\delta_k = \max_j |x_j^{k+1} - x_j^k|, \quad j = 1, 2, 3$$

(можливі й інші критерії якості розв'язання)

Тоді, послідовно виконуючи ітераційний процес, отримаємо розв'язок $X^* = (3, 1, 1)$ з точністю $\delta_k = 5 \cdot 10^{-5}$, величина якої досягнута за $k = 11$ кроків.

3.7. Метод Зейделя розв'язання СЛАР

Цей метод розв'язання СЛАР є модифікацією методу послідовних наближень.

У *методі Зейделя* при обчисленні $(k + 1)$ -го наближення невідомого $X = (x_1^{k+1}, \dots, x_N^{k+1})$ враховують вже знайдені $(k + 1)$ -і наближення невідомих $x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{j-1}^{k+1}$.

Нехай дано СЛАР

$$\begin{cases} x_1 = c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 + \dots + c_{1N}x_N + d_1, \\ x_2 = c_{21}x_1 + c_{22}x_2 + c_{23}x_3 + \dots + c_{2N}x_N + d_2, \\ x_3 = c_{31}x_1 + c_{32}x_2 + c_{33}x_3 + \dots + c_{3N}x_N + d_3, \\ \dots \\ x_N = c_{N1}x_1 + c_{N2}x_2 + c_{N3}x_3 + \dots + c_{NN}x_N + d_N. \end{cases}$$

Вважаючи, що k -е наближення вектора X вже відоме, методом Зейделя будемо $(k + 1)$ -е наближення шуканого вектора X за такими формулами:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \sum_{j=1}^N c_{1j}x_j^k + d_1, \\ x_2^{k+1} = c_{21}x_1^{k+1} + \sum_{j=2}^N c_{2j}x_j^k + d_2, \\ x_3^{k+1} = c_{31}x_1^{k+1} + c_{32}x_2^{k+1} + \sum_{j=3}^N c_{3j}x_j^k + d_3, \\ \dots \\ x_N^{k+1} = \sum_{j=1}^{N-1} c_{Nj}x_j^{k+1} + c_{NN}x_N^k + d_N. \end{cases} \quad (3.23)$$

Процес Зейделя $X = CX + D$, як і процес послідовних наближень, збігається, якщо будь-яка з норм матриці C менша за одиницю, тобто:

$$\|C\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^N |c_{ij}| < 1, \quad (3.24, a)$$

або

$$\|C\|_2 = \max_i \sum_{j=1}^N |c_{ij}| < 1, \quad (3.24, b)$$

або

$$\|C\|_3 = \left(\sum_{i,j=1}^N |c_{ij}| \right)^{1/2} < 1. \quad (3.24, c)$$

Процес Зейделя збігається до єдиного розв'язання швидше простого процесу послідовних наближень.

Приклад

Розглянемо СЛАР, яку було розв'язано в попередньому прикладі методом послідовних наближень. Запишемо її у наведеному вигляді

$$\begin{cases} x_1 = & -0,125x_2 - 0,125x_3 + 3,250, \\ x_2 = -0,200x_1 & + 0,200x_3 + 1,400, \\ x_3 = -0,200x_1 + 0,200x_2 & + 1,400. \end{cases}$$

Обираючи, як і вище, значення початкового вектора $X^0 = (2, 2, 2)$, отримаємо послідовно

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = & -0,125x_2^k - 0,125x_3^k + 3,250, \\ x_2^{k+1} = -0,200x_1^{k+1} & + 0,200x_3^k + 1,400, \\ x_3^{k+1} = -0,200x_1^{k+1} + 0,200x_2^{k+1} & + 1,400. \end{cases}$$

Тоді, послідовно використовуючи ітераційний процес для критерію якості

$$\delta_k = \max_j |x_j^{k+1} - x_j^k|, \quad j = 1, 2, 3,$$

отримаємо наступні результати (Δ_1 – значення критерію δ_k , що знайдене методом послідовних наближень; Δ_2 – те ж саме значення, що знайдене методом Зейделя):

$k = 1$	$\Delta_1 = 0,75000$	$\Delta_2 = 0,90000$
$k = 2$	$\Delta_1 = 0,27000$	$\Delta_2 = 0,22125$
$k = 3$	$\Delta_1 = 0,08400$	$\Delta_2 = 0,03834$
$k = 4$	$\Delta_1 = 0,03030$	$\Delta_2 = 0,00467$
$k = 5$	$\Delta_1 = 0,01026$	$\Delta_2 = 0,00064$
$k = 6$	$\Delta_1 = 0,00356$	$\Delta_2 = 0,00008$
$k = 7$	$\Delta_1 = 0,00123$	$\Delta_2 = 0,00001$
$k = 8$	$\Delta_1 = 0,00042$	$\Delta_2 = 0,00000$
$k = 9$	$\Delta_1 = 0,00014$	$\Delta_2 = 0,00000$
$k = 10$	$\Delta_1 = 0,00005$	$\Delta_2 = 0,00000$

З цих результатів можна бачити, що точність $\delta_k = 5 \cdot 10^{-5}$, яка отримана методом послідовних наближень за $k = 10$ кроків, здобувається методом Зейделя за $k = 7$ кроків. Розв'язок СЛАР дорівнює $X^* = (3, 1, 1)$.

Ефективність ітераційних методів дуже залежить від вибору початкового значення вектора X^* .

3.8. Порівняння методів знаходження розв'язку СЛАР

Вибір у кожному окремому випадку конкретного методу розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь визначається багатьма факторами: особливостями матриці коефіцієнтів і порядком системи, швидкодією, доступним обсягом пам'яті комп'ютера та ін.

Метод Крамера застосовується для СЛАР розміром $N = 2, 3, 4$. Найчастіше його використовують безпосередньо при обчисленні "вручну".

Метод Гаусса є одним із найбільш універсальних та ефективних при розв'язуванні СЛАР.

Використання його доцільно для лінійних систем загального вигляду зі щільно заповненою матрицею коефіцієнтів. Кількість виконаних арифметичних операцій при розв'язанні методом Гаусса в загальному випадку становить приблизно $2N^3/3$. Найчастіше його використовують при знаходженні розв'язанні СЛАР розміром $N \geq 4$.

При розв'язанні СЛАР високого порядку (а сама вона містить розріджену матрицю коефіцієнтів), коли N може сягати 10^3 і вище, найбільш ефективним є використання ітераційних методів. У розріджених матрицях більшість елементів дорівнює нулю. В пам'яті комп'ютера зберігаються тільки ненульові елементи таких матриць. На відміну від методу Гаусса похибки округлення в ітераційних методах позначаються істотно менше, оскільки неточне наближення можна розглядати як новий початковий вектор.

Ітераційні методи потребують виконання одноманітних операцій, що повторюються, і тому зручні при програмуванні.

3.9. Ітераційне уточнення розв'язку СЛАР

Якщо реально отриманий розв'язок обумовлений обчислювальною похибкою, то буде знайдено лише наближений розв'язок системи, який необхідно уточнити. Нехай X – точний розв'язок, тоді похибка розв'язку $\varepsilon = X - X_0$ задовольняє системі рівнянь

$$\begin{cases} A\varepsilon = r, \\ r = B - AX_0, \end{cases} \quad (3.25)$$

де X_0 – розв'язання системи (3.3), який знайдено завдяки використанню одного з прямих методів.

Розв'язок системи (3.3) тим же прямим методом з подвійною точністю приводить до уточнення $X_1 = X_0 + \varepsilon$. Якщо точність нового наближення є

незадовільною, то уточнюється отримане розв'язання X_1 доти, доки вектор поправок ε не стане дорівнювати нулю із заданою точністю.

3.10. Знаходження власних чисел і векторів матриці

Ненульовий вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ називається *власним вектором* з відповідним йому *власним числом* λ матриці A розміром $(N \times N)$, якщо має місце співвідношення

$$AX = \lambda X. \quad (3.26)$$

У кожній матриці розміром $(N \times N)$ є (з урахуванням кратності) N власних чисел. Для знаходження власних чисел розглянемо вираз (3.26) як рівняння відносно змінної λ

$$(A - \lambda E)X = 0.$$

Така СЛАР є однорідною. Для існування нетривіальних (ненульових) розв'язків однорідної СЛАР необхідно, щоб визначник цієї системи дорівнював нулю, тобто

$$\det(A - \lambda E) = 0. \quad (3.27)$$

У розгорнутому вигляді це рівняння таке:

$$P_N(\lambda) \equiv \det(A - \lambda E) = \quad (3.28)$$

$$= \lambda^N - p_1 \lambda^{N-1} + p_2 \lambda^{N-2} + \dots + (-1)^{N-1} p_{N-1} \lambda + (-1)^N p_N = 0.$$

Багаточлен (3.28) називається *характеристичним багаточленом* $P_N(\lambda)$ заданої матриці A . Корені цього багаточлена можуть бути як дійсними, так і комплексними, вони і є власними числами. набір власних чисел $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N)$ утворює *спектр матриці* A .

Окремі випадки характеристичного багаточлена наступні:

якщо $N = 2$,

$$P_2(\lambda) = \lambda^2 - \lambda(a_{11} + a_{22}) + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21});$$

якщо $N = 3$,

$$\begin{aligned} P_3(\lambda) = & \lambda^3 - \lambda^2(a_{11} + a_{22} + a_{33}) + \\ & + \lambda(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} + a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} + a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31}) - \\ & - (a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32}). \end{aligned}$$

Кожна квадратна матриця розміром $N \times N$ характеризується набором з N *інваріантів*. Цей набір можна вибрати по-різному. Наприклад, коефіцієнти $p_1, p_2, p_3, \dots, p_N$ характеристичного поліному (3.28) $P_N(\lambda)$ матриці A утворюють такий набір. У свою чергу, йому можна поставити у відповідність набір власних чисел $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N$. Послідовність симетричних комбінацій, що базуються на власних числах $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N$ матриці A , також утворює набір інваріантів. Наприклад, для

визначника $\det(A)$ і суми діагональних елементів $\text{Sp}(A)$ матриці A мають місце рівності:

$$\prod_{n=1}^N \lambda_n \equiv \det(A) = (-1)^N p_N, \quad (3.29)$$

$$\sum_{n=1}^N \lambda_n \equiv \text{Sp}(A) = p_1, \quad (3.30)$$

які зручно використовувати для перевірки правильності знайденого спектра.

Задача визначення спектра власних чисел матриці A таким чином еквівалентна задачі знаходження набору нулів характеристичного багаточлена, тобто знаходження всіх коренів рівняння N -го степеня

$$P_N(\lambda) = 0. \quad (3.31)$$

У ряді задач необхідно знайти максимальне за модулем власне значення λ_{\max} заданої матриці A . Ітераційна процедура розв'язування цієї задачі така.

1. Вибирають початковий вектор X_0 розміром N , значення максимального за модулем елементу якого дорівнює одиниці, і задають точність обчислення ε .

2. У циклі за номером ітерацій $k = 1, 2, \dots$ обчислюють вектор розміром N

$$Y_k = AX_{k-1}. \quad (3.32)$$

3. Серед компонент вектора Y_k знаходять максимальний за модулем

$$\mu_k = \max(y_{k,1}, y_{k,2}, \dots, y_{k,N}), \quad (3.33)$$

після чого одержують вектор X_k за формулою

$$X_k = \mu_k^{-1} Y_k. \quad (3.34)$$

4. Якщо для вектора X_k виконується умова

$$|x_{k,j} - x_{k-1,j}| < \varepsilon, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.35)$$

то процедура припиняється. У протилежному випадку ітерації продовжують.

Якщо ітераційний процес збігається, то послідовність $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ збігається до найбільшого власного значення λ_{\max} . При цьому послідовність нормованих векторів X_1, X_2, \dots, X_k збігається до власного вектора, що відповідає власному числу λ_{\max} .

Аналогічно можна знайти найменше за модулем власне число λ_{\min} . Для цього вхідну систему (3.26) помножують на зворотну матрицю $B = A^{-1}$. Тоді дістанемо

$$BX = \nu X, \quad \nu = \lambda^{-1}, \quad \lambda \neq 0. \quad (3.36)$$

Розв'язавши цю задачу на власні значення ітераційним методом, знайдемо найбільше власне число ν_{\max} матриці B , за яким знаходимо найменше власне число матриці A

$$\lambda_{\min} = 1/\nu_{\max}. \quad (3.37)$$

3.11. Чисельне визначення функції від матриці

У математичних моделях багатьох фізичних, технічних, економічних процесів виникає потреба чисельного визначення заданої функції від квадратної матриці.

Введемо квадратну матрицю та поставимо задачу побудови чисельного алгоритму, який дозволить за заданою матрицею A знаходити матрицю $B = f(A)$, де $f(x)$ – деяка визначена функція скалярного аргументу x . Розглянемо деякі типи такого алгоритму.

А. Метод розкладання в степеневий ряд

Для значної кількості функцій відомо їх подання у вигляді степеневого ряду, наприклад розкладання в ряд Тейлора. Ці формули можуть бути використані для обчислення відповідних функцій від заданої матриці A .

Наприклад :

$$\exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!},$$
$$\sin(A) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{A^{2n+1}}{(2n+1)!}.$$

Обираючи в цих формулах значення верхньої межі сумування фіксованим та рівним чотирьом або п'яти, дістаємо :

$$\exp(A) = E + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{6}A^3 + \frac{1}{24}A^4 + \frac{1}{120}A^5; \quad (3.38)$$

$$\sin(A) = A - \frac{1}{6}A^3 + \frac{1}{120}A^5 - \frac{1}{5040}A^7, \quad (3.39)$$

тут E – одинична матриця такого ж розміру, що і матриця A .

Використання алгоритмів, що ґрунтуються на формулах такого типу, має такі ж самі обмеження, що і в скалярному випадку (необхідно брати кількість доданків, що забезпечують задану точність обчислення функції); у матричному випадку ці обмеження стосуються кожного власного числа.

Приклад

Нехай матриця A дорівнює

$$A = \begin{pmatrix} 1,0 & 0,5 \\ 0,3 & 2,0 \end{pmatrix}.$$

За формулою (3.38) до квадратичного члена одержимо

$$\exp(A) = E + A + \frac{1}{2}A^2 =$$
$$= \begin{pmatrix} 1,0 & 0,0 \\ 0,0 & 1,0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1,0 & 0,5 \\ 0,3 & 2,0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1,0 & 0,5 \\ 0,3 & 2,0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1,0 & 0,5 \\ 0,3 & 2,0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,57 & 1,25 \\ 0,75 & 5,08 \end{pmatrix}.$$

Урахування доданка $\frac{1}{6}A^3$ дає

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 2,842 & 1,846 \\ 1,108 & 6,533 \end{pmatrix}.$$

З урахуванням $\frac{1}{24} A^4$ здобудемо

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 2,953 & 2,177 \\ 1,306 & 7,307 \end{pmatrix}.$$

Тільки урахування доданка $\frac{1}{120} A^5$

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 2,995 & 2,321 \\ 1,392 & 7,637 \end{pmatrix}$$

дає результат, який задовільно погоджується з точним значенням матричної експоненти

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 3,015 & 2,393 \\ 1,436 & 7,802 \end{pmatrix}.$$

Б. Метод дробово-раціонального наближення

Значення багатьох функцій скалярного аргументу можна дістати за допомогою їх подання у вигляді відповідного *дробово-раціонального наближення*. Для розповсюджених функцій, таких як \exp , \sin , \cos , \ln , tg і багатьох інших, існує велика кількість таких подань, що мають різний степінь точності. Переходячи від скалярного аргументу до матричного, запишемо для експоненційної функції декілька дробово-раціональних наближень з дедалі більшою точністю:

$$\begin{aligned} \exp(A) &= (2E - A)^{-1}(2E + A), \\ \exp(A) &= (12E - 6A + A^2)^{-1}(12E + 6A + A^2), \\ \exp(A) &= (120E - 60A + 12A^2 - A^3)^{-1}(120E + 60A + 12A^2 + A^3). \end{aligned} \quad (3.40)$$

З використанням багаточленів дедалі більш високих степенів можна забезпечити будь-яку наперед задану точність. При цьому, однак, необхідно, щоб усі компоненти $\{\lambda_n\}$ спектра матриці A були локалізовані в одиничному колі: $|\lambda_n| < 1$, $n = 1, 2, \dots, N$.

Приклад

Для матриці A

$$A = \begin{pmatrix} 1,0 & 0,5 \\ 0,3 & 2,0 \end{pmatrix}$$

послідовно маємо за формулами (3.40):

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} -1,0 & -13,3 \\ -8,0 & -27,7 \end{pmatrix};$$

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 2,949 & 2,150 \\ 1,290 & 7,249 \end{pmatrix};$$

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 3,017 & 2,401 \\ 1,441 & 7,819 \end{pmatrix}.$$

Порівнюючи ці матриці з вищенаведеним точним значенням матричної експоненти $\exp(A)$, можна зробити висновок про невелику одержану точність, оскільки вона забезпечена лише першою значущою цифрою. Такий висновок пов'язаний з тим,

що матриця A , яка розглядається, має власні числа λ_1, λ_2 , одне з яких перевищує одиницю.

В. Обчислення функції від матриці за допомогою *інтерполяційної формули Лагранжа-Сільвестра*

Набір власних значень $\{\lambda\}_A$ квадратної матриці A порядку N збігається з набором коренів алгебраїчного рівняння N -го степеня

$$P_A(\lambda) = \det(A - \lambda E) = 0. \quad (3.41)$$

У свою чергу, якщо матриці A відповідає характеристичний багаточлен $P_A(\lambda)$, то має місце *теорема Гамільтона-Келі*, згідно з якою

$$P_A(A) = 0, \quad (3.42)$$

тобто *кожна квадратна матриця задовольняє своєму власному характеристичному рівнянню*.

Тому багаточлен $P_A(A)$ називають *анулюючим поліномом* відносно до матриці A , оскільки результатом в (3.42) є нульова матриця.

Це дозволяє кожний цілочисельний степінь A^N матриці A подати у вигляді лінійної комбінації від її невід'ємних степенів до $(N - 1)$ -ї включно.

Тим самим стає можливим і кожну аналітичну функцію від матриці A (тобто функцію, яку можна подати у вигляді, можливо, нескінченної комбінації невід'ємних степенів свого аргументу) обчислити таким самим способом.

Якщо (як це і було вище) позначити набір коефіцієнтів характеристичного багаточлена матриці A через $\{p\}$, тобто

$$P_A(\lambda) = \sum_{n=0}^N p_n \lambda^n, \quad (3.43)$$

то можна записати

$$P_A(A) = \sum_{n=0}^N p_n A^n = 0. \quad (3.44)$$

Тут також результатом є нульова матриця, а $A_0 = E$.

Виділивши в цьому виразі старший степінь матриці, дістанемо з урахуванням того, що $p_N = 1$,

$$A^N = - \sum_{n=0}^{N-1} p_n A^n \quad (3.45)$$

і аналогічно для більш високих степенів.

Таким чином, кожний натуральний степінь M матриці A , де $M \geq N$, є лінійною комбінацією набору степенів $A^0, A^1, A^2, \dots, A^{N-1}$.

Якщо при цьому $\det(A) \neq 0$, то після перестановки доданків та помноження на A^{-1} дістанемо зручний для обчислень вираз для оберненої матриці

$$A^{-1} = - \frac{1}{a_0} \sum_{n=1}^N p_n A^n. \quad (3.46)$$

Цей вираз також можна помножити на A^{-1} і дістати A^{-2} і т. д. Умова $\det(A) \neq 0$ означає, що у спектрі матриці A відсутні нульові компоненти. Для таких *невироджених* матриць будь-які натуральні степені є лінійною комбінацією набору степенів $A^0, A^1, A^2, \dots, A^{N-1}$. Це означає, що можна знайти кожну функцію $f(x)$ від матриці A , якщо цю функцію можна подати у вигляді комбінації натуральних степенів свого аргументу x .

Якщо всі власні числа матриці A різні, то задану матричну функцію $B = f(A)$ можна обчислити за допомогою *інтерполяційної формули Лагранжа-Сільвестра*

$$f(A) = \sum_{n=1}^N f(\lambda_n) \prod_{j=1, j \neq n}^N \frac{A - \lambda_j E}{\lambda_n - \lambda_j}. \quad (3.47)$$

Інтерполяційна формула Лагранжа-Сільвестра дозволяє знайти точне значення заданої функції від матриці, якщо функція $f(x)$ визначена на спектрі $\{\lambda\}_A$ матриці A . Але для того, щоб її можна було використовувати, необхідно знайти увесь набір із N різних власних чисел заданої матриці A .

Приклад

Як і вище, розглянемо матрицю

$$A = \begin{pmatrix} 1,000 & 0,500 \\ 0,300 & 2,000 \end{pmatrix}.$$

Для цієї матриці поліном $P_A(\lambda)$ має наступний вигляд:

$$P_A(\lambda) = \det(A - \lambda E) = \lambda^2 - 3,000\lambda + 1,850.$$

Розв'язуючи рівняння $P_A(\lambda) = 0$, знаходимо два власні числа матриці A

$$\lambda_1 = 2,132, \quad \lambda_2 = 0,868.$$

Тоді за інтерполяційною формулою (3.47) одержимо

$$\begin{aligned} \exp(A) &= \exp(\lambda_1) \cdot \frac{A - \lambda_2 E}{\lambda_1 - \lambda_2} + \exp(\lambda_2) \cdot \frac{A - \lambda_1 E}{\lambda_2 - \lambda_1} = \\ &= \frac{\exp(2,132)}{1,265} \begin{pmatrix} 0,132 & 0,500 \\ 0,300 & 1,132 \end{pmatrix} + \frac{\exp(0,868)}{-1,265} \begin{pmatrix} -1,132 & 0,500 \\ 0,300 & -0,132 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

що після обчислень дає

$$\exp \begin{pmatrix} 1,000 & 0,500 \\ 0,300 & 2,000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3,015 & 2,393 \\ 1,436 & 7,802 \end{pmatrix}.$$

Для перевірки цього результату скористаємося відомим співвідношенням $\ln(\exp(z)) = z$, оскільки натуральний логарифм є функція, зворотна до експоненти. Позначаючи $B = \exp(A)$, з виразу (3.47) отримуємо

$$\ln(B) = \ln(\nu_1) \cdot \frac{B - \nu_2 E}{\nu_1 - \nu_2} + \ln(\nu_2) \cdot \frac{B - \nu_1 E}{\nu_2 - \nu_1},$$

де ν_1 та ν_2 – власні числа матриці B , до того ж $\nu_{1,2} = \exp(\lambda_{1,2})$.

Вони визначаються рівнянням

$$\det(B - \nu E) = \nu^2 - 10,817\nu + 20,087 = 0$$

і дорівнюють: $\nu_1 = 8,435$, $\nu_2 = 2,381$.

Тому

$$\ln(B) = \frac{\ln(8,435)}{6,055} \cdot \begin{pmatrix} 0,634 & 2,393 \\ 1,436 & 5,421 \end{pmatrix} + \frac{\ln(2,381)}{-6,055} \cdot \begin{pmatrix} -5,421 & 2,393 \\ 1,436 & -0,634 \end{pmatrix}.$$

Після обчислень отримуємо

$$\ln(B) = \begin{pmatrix} 1,000 & 0,500 \\ 0,300 & 2,000 \end{pmatrix},$$

що збігається з вихідною матрицею A .

Г. Обчислення функції від матриці за допомогою контурного інтеграла

З теорії функцій комплексної змінної відомо, що у випадку, коли аналітична функція $f(z)$ задана на контурі C , то для будь-якої точки a , яка знаходиться у цьому контурі, виконується *інтегральна формула Коші*

$$f(a) = \frac{1}{2\pi i} \oint (z - a)^{-1} f(z) dz. \quad (3.48)$$

Нехай вибрано певний контур C на комплексній площині Z , такий, що охоплює весь набір $\{\lambda\}_A$ з усіх власних чисел матриці A , можливо комплексновизначених. Тоді має місце матричне узагальнення формули (3.48) – *інтегральна формула Пуанкаре-Сільвестра*

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i} \oint (Ez - A)^{-1} f(z) dz. \quad (3.49)$$

Матриця-функція вигляду $R(z) = (Ez - A)^{-1}$ заданого скалярного аргументу z називається *резольвентою* матриці A .

Відзначимо, що для визначення $f(A)$ необхідно обчислити $N \times N$ комплексновизначених інтегралів.

Розглянемо окремо важливий випадок, коли $N = 2$:

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Спектр цієї матриці містить власні числа вигляду

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} [a + d \pm \sqrt{(a + d)^2 - 4(ad - bc)}].$$

Вираз (3.49) після обчислення резольвенти

$$R(z) = \frac{1}{(z - a)(z - d) - bc} \begin{pmatrix} z - d & b \\ c & z - a \end{pmatrix}$$

і покомпонентного інтегрування приймає вигляд

$$f(A) = \frac{f(\lambda_1)}{\lambda_1 - \lambda_2} \begin{pmatrix} \lambda_1 - d & b \\ c & \lambda_1 - a \end{pmatrix} + \frac{f(\lambda_2)}{\lambda_2 - \lambda_1} \begin{pmatrix} \lambda_2 - d & b \\ c & \lambda_2 - a \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Якщо у матриці A спектр вироджений, тобто $\lambda_1 = \lambda_2$, то, позначивши $\lambda_1 = \lambda$ й $\lambda_2 = \lambda + \varepsilon$, виконаємо в (3.51) граничний перехід $\varepsilon \rightarrow 0$. Тоді одержимо

$$f(A) = f(\lambda)E + f'(\lambda)A - \lambda f'(\lambda)E, \quad (3.52)$$

що при $N = 2$ дає

$$f(A) = \begin{pmatrix} f(\lambda) + (a - \lambda)f'(\lambda) & bf'(\lambda) \\ cf'(\lambda) & f(\lambda) + (d - \lambda)f'(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (3.53)$$

У задачі знаходження значень функцій $B = f(A)$ від заданих матриць A істотним є врахування у кожному конкретному випадку властивостей матриць, що розглядаються. Відзначимо, що при використанні розмірних величин (наприклад, у фізичних задачах) необхідно забезпечити, щоб у виразі $B = f(A)$ всі матричні елементи матриці A мали б одну і ту ж розмірність.

3.12. Операції з блочними матрицями

Матриця A високого порядку, сукупності сусідніх елементів у якій об'єднані в блоки (клітини), називається *блочною*, або *клітинною матрицею*. Розбиття на блоки позначають за допомогою вертикальних та горизонтальних ліній. Таким чином, вихідна матриця розбивається на підматриці-блоки, обчислювальні дії з якими виконуються простіше.

Матрицю A розміром 4×4 можна подати у вигляді блочної матриці таким чином:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \vdots & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & \vdots & a_{23} & a_{24} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{31} & a_{32} & \vdots & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & \vdots & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & \vdots & A_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_3 & \vdots & A_4 \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

де чотири матриці розміром 2×2

$$A_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{pmatrix},$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{pmatrix}, \quad A_4 = \begin{pmatrix} a_{33} & a_{34} \\ a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}.$$

Дані матриці можна подати у блочному вигляді різними способами.

Над блочними матрицями можна проводити операції додавання та множення, якщо оперувати з блоками як з елементами звичайної матриці. Так, для двох матриць

A та B однакового розміру

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & \vdots & A_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_3 & \vdots & A_4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} B_1 & \vdots & B_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ B_3 & \vdots & B_4 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

можливі блочні подання з відповідними клітинами також однакових розмірів. Тоді

$$A + B = \begin{pmatrix} A_1 + B_1 & \vdots & A_2 + B_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_3 + B_3 & \vdots & A_4 + B_4 \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

Результатом їх добутку буде клітинна матриця вигляду

$$AB = \begin{pmatrix} A_1B_1 + A_2B_3 & \vdots & A_1B_2 + A_2B_4 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_3B_1 + A_4B_3 & \vdots & A_3B_2 + A_4B_4 \end{pmatrix} \quad (3.57, a)$$

або

$$BA = \begin{pmatrix} B_1A_1 + B_2A_3 & \vdots & B_1A_2 + B_2A_4 \\ \dots & \dots & \dots \\ B_3A_1 + B_4A_3 & \vdots & B_3A_2 + B_4A_4 \end{pmatrix}. \quad (3.57, b)$$

При цьому необхідно, щоб розміри блоків матриць A та B були такими, аби можна було перемножити відповідні матричні клітини.

Підкреслимо, що взагалі $AB \neq BA$.

За допомогою блочного подання матриць можна знайти матрицю, зворотню даній. Нехай дана квадратна матриця Z розміром $n \times n$, блочне подання якої таке :

$$Z = \begin{pmatrix} A & \vdots & B \\ \dots & \dots & \dots \\ C & \vdots & D \end{pmatrix}, \quad (3.58)$$

де A – клітина розміром $p \times p$, D – клітина розміром $q \times q$, при цьому виконується $p + q = n$.

Нам потрібно знайти зворотню матрицю

$$Z^{-1} = \begin{pmatrix} X & \vdots & Y \\ \dots & \dots & \dots \\ U & \vdots & V \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

в якій X та V – також квадратні блоки розмірів $p \times p$ та $q \times q$ відповідно.

За визначенням зворотної матриці

$$ZZ^{-1} = E_n = \begin{pmatrix} E_p & \vdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \vdots & E_q \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

де E_n, E_p, E_q – одиничні матриці відповідних розмірів, а символом "0" позначені блоки, що повністю складаються з нулів.

З матриці (3.60) маємо

$$\begin{pmatrix} AX + BU & \vdots & AY + BV \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ CX + DU & \vdots & CY + DV \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_p & \vdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \vdots & E_q \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Якщо в цьому співвідношенні порівняти елементи одиничної матриці та елементи матриці-добутку, можна знайти поблочно формули для визначення клітин зворотної матриці.

А. Нехай $\det A \neq 0$ і тому існує A^{-1} . Тоді отримаємо таку групу формул:

$$\begin{aligned} V &= (D - CA^{-1}B)^{-1}; & U &= -VCA^{-1}; \\ Y &= -A^{-1}BV; & X &= A^{-1} - A^{-1}BU. \end{aligned} \quad (3.62)$$

В алгоритмі обернення, що заснований на формулах (3.62), дії починаються зі знаходження зворотної матриці A^{-1} .

Б. Нехай $\det D \neq 0$ і тому існує D^{-1} . Тоді отримаємо таку групу формул:

$$\begin{aligned} X &= (A - BD^{-1}C)^{-1}; & Y &= -XBD^{-1}; \\ U &= -D^{-1}CX; & V &= D^{-1} - D^{-1}CY. \end{aligned} \quad (3.63)$$

В алгоритмі обернення, що заснований на формулах (3.63), дії починаються зі знаходження зворотної матриці D^{-1} .

Розглянемо матрицю A розміром $2n \times 2n$, блочне подання у якій таке:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & \vdots & B_1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ A_2 & \vdots & B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

де A_1, A_2, B_1, B_2 – клітини одного порядку, тобто розміром $n \times n$.

Якщо матриці A_1, A_2, B_1, B_2 – невинроджені, тобто $\det A_1 \neq 0, \det A_2 \neq 0, \det B_1 \neq 0, \det B_2 \neq 0$, то справедлива така рівність для зворотної матриці:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} (A_1 - B_1B_2^{-1}A_2)^{-1} & \vdots & (A_2 - B_2B_1^{-1}A_1)^{-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ (B_1 - A_1A_2^{-1}B_2)^{-1} & \vdots & (B_2 - A_2A_1^{-1}B_1)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

Розглянемо тепер визначник блочної матриці, маючи на увазі матрицю вигляду (3.64). Хоча для матриці розміром 2×2 має місце

$$\det \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{pmatrix} = a_1b_2 - a_2b_1, \quad (3.66)$$

для блочної матриці пряма аналогія відсутня.

А саме, якщо $\det A_1 \neq 0$, то

$$\det A = \det \begin{pmatrix} A_1 & \vdots & B_1 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_2 & \vdots & B_2 \end{pmatrix} = \det A_1 \det(B_2 - A_2 A_1^{-1} B_1). \quad (3.67)$$

Якщо ж $\det B_2 \neq 0$, то

$$\det A = \det \begin{pmatrix} A_1 & \vdots & B_1 \\ \dots & \dots & \dots \\ A_2 & \vdots & B_2 \end{pmatrix} = \det B_2 \det(A_1 - B_1 B_2^{-1} A_2). \quad (3.68)$$

Застосування техніки обернення з блочними матрицями дає можливість скоротити об'єм обчислень у ряді задач прикладного практичного аналізу.

Приклад 1

Нехай

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 7 & -3 & -4 \\ 7 & 6 & -4 & -5 \\ 6 & 8 & -3 & -2 \\ 8 & 5 & -6 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \vdots & A_{12} \\ \dots & \dots & \dots \\ A_{21} & \vdots & A_{22} \end{pmatrix};$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 3 & 5 & 7 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} & \vdots & B_{12} \\ \dots & \dots & \dots \\ B_{21} & \vdots & B_{22} \end{pmatrix}.$$

Знайдемо добуток AB за допомогою розбиття матриць A, B на блоки. З матриці (3.57,а) маємо

$$AB = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & \vdots & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ \dots & \dots & \dots \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & \vdots & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix}.$$

Перемножуючи та додаючи клітини розміром 2×2 поетапно, знайдемо

$$A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} = \begin{pmatrix} 8 & 6 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}; \quad A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ -5 & -10 \end{pmatrix};$$

$$A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} = \begin{pmatrix} 15 & 19 \\ 10 & 9 \end{pmatrix}; \quad A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} = \begin{pmatrix} 23 & 27 \\ 8 & 7 \end{pmatrix}.$$

Таким чином,

$$AB = \begin{pmatrix} 8 & 6 & 4 & 2 \\ 5 & 0 & -5 & -10 \\ 15 & 19 & 23 & 27 \\ 10 & 9 & 8 & 7 \end{pmatrix}.$$

Приклад 2

Поставимо задачу обернення 4×4 матриці

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & 1 \\ 4 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Крок 1. Розіб'ємо матрицю на чотири 4×4 блоки:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix};$$
$$C = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Оскільки має місце $\det A \neq 0$, то всі обчислення будемо проводити згідно з формулою (3.62).

Крок 2. Знаходимо матрицю A^{-1} :

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Крок 3. Послідовно знаходимо значення виразів:

$$A^{-1}B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3/2 \end{pmatrix}; \quad CA^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix};$$
$$(CA^{-1})B = \begin{pmatrix} 4 & 8 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}; \quad C(A^{-1}B) = \begin{pmatrix} 4 & 8 \\ 4 & 3 \end{pmatrix},$$

при цьому останній вираз обчислюємо для контролю.

Крок 4. Утворимо матрицю

$$D - CA^{-1}B = \begin{pmatrix} -6 & -7 \\ -3 & -1 \end{pmatrix}$$

та знайдемо зворотну до неї

$$V = (D - CA^{-1}B)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/15 & -7/15 \\ -3/15 & 6/15 \end{pmatrix}.$$

Крок 5. Послідовно знаходимо значення матриць:

$$U = -VCA^{-1} = \begin{pmatrix} 1/15 & 7/15 \\ 6/15 & -6/15 \end{pmatrix};$$
$$Y = -A^{-1}BV = \begin{pmatrix} 1/3 & -1/3 \\ 1/6 & 1/3 \end{pmatrix};$$
$$X = A^{-1} - A^{-1}BU = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 \\ -1/2 & 1/6 \end{pmatrix}.$$

Крок 6. Об'єднуючи блоки X, Y, U, V , отримуємо

$$Z^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1/3 & -1/3 \\ -1/2 & 1/6 & 1/6 & 1/3 \\ 1/5 & 7/15 & 1/15 & -7/15 \\ 2/5 & -2/5 & -1/5 & 2/5 \end{pmatrix}.$$

Крок 7. Переконаємося в правильності знайдених елементів оберненої матриці Z^{-1} шляхом перевірки – обчислення добутку ZZ^{-1} .

Приклад 3

Знайдемо визначник матриці Z , що був розглянутий у прикладі 2.

Маємо

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}; \quad B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix};$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}; \quad B_2 = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Оскільки $\det A_1 \neq 0$, то скористаємось формулою (3.67).

Крок 1. Знайдемо матрицю A_1^{-1}

$$A_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Крок 2. Знайдемо матрицю $A_2A_1^{-1}B_1$

$$A_2A_1^{-1}B_1 = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 8 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}.$$

Крок 3. Знайдемо значення визначника, що шукається,

$$\det Z = \det A_1 \cdot \det(B_2 - A_2A_1^{-1}B_1) = 2 \cdot \det \begin{pmatrix} -6 & -7 \\ -3 & -1 \end{pmatrix} = -30.$$

3.13. Операції з трикутними матрицями

Квадратна матриця розміром $n \times n$ називається *трикутною*, якщо елементи, що розміщені вище (або нижче) головної діагоналі, дорівнюють нулю.

Якщо нулю дорівнюють елементи, розміщені *вище* головної діагоналі, то матриця називається *нижньою трикутною*

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & \dots & 0 \\ t_{21} & t_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ t_{n1} & t_{n2} & \dots & t_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

Якщо ж нулю дорівнюють елементи, розміщені *нижче* головної діагоналі, то матриця називається *верхньою трикутною*

$$T = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \dots & \tau_{1n} \\ 0 & \tau_{22} & \dots & \tau_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \tau_{nn} \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Визначник трикутної матриці дорівнює добутку її діагональних елементів. Обернена матриця до неособливої трикутної матриці є також трикутною матрицею того ж типу та структури.

Якщо квадратна матриця A має відмінні від нуля діагональні мінори:

$$a_{11} \neq 0, \quad \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \neq 0, \quad \dots, \quad \det A \neq 0, \quad (3.71)$$

то цю матрицю можна розкласти на добуток двох трикутних матриць (верхньої та нижньої).

Таке розкладання буде єдиним, якщо діагональним елементам однієї з трикутних матриць заздалегідь дати відмінні від нуля та визначені значення (наприклад, покласти їх рівними одиниці).

Нехай

$$A = T_1 T_2, \quad (3.72)$$

де матриця T_1 подана в (3.69), а матриця T_2 – в (3.70), але в ній $\tau_{ii} = 1$, $1 \leq i \leq n$.

Елементи матриць T_1 та T_2 знаходять шляхом множення, порівнюючи відповідні елементи матриці $T_1 T_2$ з елементами матриці A , та послідовного розв'язання виникаючих лінійних рівнянь.

Приклад 1

Розглянемо розклад (3.72) на прикладі матриці розміром 2×2

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a \neq 0, \quad \det A \neq 0.$$

Знайдемо добуток двох трикутних матриць

$$T_1 T_2 = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 \\ t_{11} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \tau_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{11} \tau_{12} \\ t_{21} & t_{21} \tau_{12} + t_{22} \end{pmatrix}.$$

Порівняємо відповідні матричні елементи:

$$\begin{aligned} t_{11} &= a, & t_{11} \tau_{12} &= b, \\ t_{21} &= c, & t_{21} \tau_{12} + t_{22} &= d. \end{aligned}$$

Якщо розглядати ці рівності як систему чотирьох рівнянь з чотирма невідомими, то після їх послідовного розв'язання знайдемо

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ c & (ad - bc)/a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & b/a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

В цьому просторі максимальна кількість лінійно незалежних векторів не може бути більшою за m , ранг $r \leq m$, а кількість невідомих n . Тому система має нетривіальний розв'язок, якщо кількість невідомих більша, ніж кількість рівнянь. Якщо ж кількість рівнянь m збігається з рангом r матриці системи та дорівнює кількості невідомих, то однорідна СЛАР має єдиний розв'язок. Те ж саме буде, якщо в однорідній системі кількість рівнянь буде більшою, ніж кількість невідомих. Змінні x_1, x_2, \dots, x_r у виразі (3.77) називаються *базисними*, а решта $x_{r+1}, x_{r+2}, \dots, x_n$ – *вільними*.

Твердження 2. Якщо в однорідній СЛАР кількість рівнянь менша, ніж кількість невідомих, то система має ненульовий розв'язок.

Далі розглянемо випадок $m = n$, тобто кількість рівнянь збігається з кількістю невідомих.

Твердження 3. Однорідна СЛАР, в якій $m = n$, має ненульовий розв'язок тоді і тільки тоді, коли визначник матриці системи дорівнює нулю. Якщо цей визначник відмінний від нуля, то система має тільки нульовий (тривіальний) розв'язок.

Приклад 1

Розглянемо систему

$$\begin{cases} \lambda x + 2y = 0, \\ 3x + 6y = 0. \end{cases}$$

При будь-яких значеннях параметра λ ця однорідна система сумісна та має тривіальний розв'язок $x = 0, y = 0$.

Незвичайним виявляється те, що ця система припускає й нетривіальний розв'язок, а саме, якщо $\lambda = 1$, то існує розв'язок $x = 2, y = -1$. Мало того, при $\lambda = 1$ ця однорідна СЛАР має нескінченно багато нетривіальних розв'язків вигляду $x = 2\gamma, y = -\gamma$, де γ – довільне число. При $\lambda \neq 1$ однорідна СЛАР, що розглядається, має єдиний тривіальний розв'язок $x = 0, y = 0$.

Приклад 2

Розглянемо систему

$$\begin{cases} 3x + 2y - z = 0, \\ 2x + y - z = 0, \\ x - 3y - 4z = 0. \end{cases}$$

Обчислимо визначник системи

$$\det A = \det \begin{pmatrix} 3 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & -1 \\ 1 & -3 & -4 \end{pmatrix} = 0.$$

Обираючи за вільну змінну z , запишемо $z = \mu$ та

$$\begin{cases} 3x + 2y = \mu, \\ 2x + y = \mu, \end{cases}$$

що дає нетривіальний розв'язок: $x = \mu, y = -\mu, z = \mu$.

3.15. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на вісім годин і містить чотири завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму чисельного розв'язування СЛАР. Програма повинна ґрунтуватися на методах Крамера і Гаусса. В ній має бути передбачена перевірка знайденого розв'язку. Результат роботи програми – масив, що містить компоненти шуканого вектора.

Варіанти

$$\text{а) } \begin{cases} 1,14x - 2,15y - 5,11z = 2,05, \\ 0,42x - 1,13y + 7,05z = 0,80, \\ 0,71x + 0,81y - 0,02z = 1,07; \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} 2,34x - 6,43y + 4,55z = 1,08, \\ 3,96x + 4,86y - 4,28z = 6,86, \\ 1,75x - 3,77y + 3,13z = 5,77; \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 0,61x + 0,71y - 0,05z = 0,16, \\ 1,03x - 2,05y + 0,87z = 0,50, \\ 2,50x - 3,12y + 5,03z = 0,95; \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} 0,15x + 0,17y - 0,50z = 0,61, \\ 1,36x - 2,58y + 0,71z = 0,07, \\ 2,06x - 3,27y + 5,38z = 0,55. \end{cases}$$

З а в д а н н я 2

Напишіть програму чисельного розв'язування СЛАР. Програма повинна ґрунтуватися на методі послідовних наближень і методі Зейделя. В ній має бути передбачена перевірка знайденого розв'язку.

Результат роботи програми – масив, який містить компоненти шуканого вектора.

За вхідні дані використовуйте варіанти до завдання 1.

З а в д а н н я 3

Напишіть програму чисельного визначення набору власних чисел заданої матриці.

Вхідні дані до програми:

A – вхідна матриця розміром 3×3 ;

r – змінний параметр.

Результат роботи програми – масив, що містить значення власних чисел матриці A , а також масив, що містить компоненти вектора, який відповідає її максимальному власному числу.

Варіанти

$$\text{а) } A = \begin{pmatrix} 5,0 & 3,0 & 1,0 \\ 6,0 & 4,0 & 2,0 \\ 7,0 & 5,0 & r \end{pmatrix}, \text{ де } r = 1,0; 2,0; 3,0;$$

$$\text{б) } A = \begin{pmatrix} 1,0 & 3,0 & 1,0 \\ 1,0 & 3,0 & 5,0 \\ r & 5,0 & 7,0 \end{pmatrix}, \text{ де } r = 2,0; 2,1; 2,2;$$

$$\text{в) } A = \begin{pmatrix} 3,0 & 5,0 & 1,0 \\ 6,0 & 4,0 & 2,0 \\ 7,0 & r & 5,0 \end{pmatrix}, \text{ де } r = 0,1; 0,2; 0,3;$$

$$\text{г) } A = \begin{pmatrix} 6,0 & r & 8,0 \\ 2,0 & 1,0 & 3,0 \\ 0,0 & 8,0 & 7,0 \end{pmatrix}, \text{ де } r = 0,4; 0,5; 0,6;$$

$$\text{д) } A = \begin{pmatrix} 1,0 & r & 1,0 \\ 0,0 & 1,0 & 0,0 \\ 1,0 & 8,0 & 1,0 \end{pmatrix}, \text{ где } r = 1,4; 1,5; 1,6.$$

З а в д а н н я 4

Напишіть програму знаходження заданої функції від квадратної матриці. За алгоритм використовуйте інтерполяційну формулу Лагранжа–Сільвестра. Передбачте у програмі попереднє визначення всіх власних чисел заданої матриці з перевіркою їх вірності.

Вхідні дані до програми :

A – вхідна матриця;

r – змінний параметр;

$f(x)$ – задана функція.

Результат роботи програми – масив, що містить елементи матриці B , яка є заданою функцією від вхідної.

Варіанти

$$\text{а) } A = \begin{pmatrix} 0,46 & 0,12 \\ 0,61 & r \end{pmatrix}, \text{ де } f(x) = \sin(x), \quad r = 0,60; 0,61; 0,62; 0,63;$$

$$\text{б) } A = \begin{pmatrix} 0,31 & 0,13 \\ r & 0,88 \end{pmatrix}, \text{ де } f(x) = 1 + x^4, \quad r = 0,10; 0,11; 0,12; 0,13;$$

$$\text{в) } A = \begin{pmatrix} 0,75 & r \\ 0,52 & 0,55 \end{pmatrix}, \text{ де } f(x) = \exp(x), \quad r = 0,50; 0,51; 0,52; 0,53;$$

$$\text{г) } A = \begin{pmatrix} 0,65 & r \\ 0,37 & 0,56 \end{pmatrix}, \text{ де } f(x) = \exp(x^2), \quad r = 0,35; 0,36; 0,37; 0,38;$$

$$\text{д) } A = \begin{pmatrix} 0,48 & r \\ 0,53 & 0,20 \end{pmatrix}, \text{ де } f(x) = \frac{1}{2} \exp(-x^2), \quad r = 0,2; 0,3; 0,4; 0,5.$$

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити :

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, що складається з таблиці вихідних даних і таблиці результатів;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

3.16. Завдання для перевірки

1. Дослідіть вплив похибки в коефіцієнтах СЛАР (зокрема похибки максимального і мінімального за модулем коефіцієнтів) на похибку розв'язку, здобутого за методом Гаусса.

2. Вхідну СЛАР можна привести до вигляду $X = AX + B$ різними шляхами. В рамках методу Зейделя порівняйте ефективність вибраних способів за кількістю ітерацій, необхідних для досягнення заданої точності.

3. Якими повинні бути матричні елементи матриці A , якщо відомо наступне: а) одне з власних чисел дорівнює нулю; б) два з власних чисел дорівнюють нулю?

4. Нехай спектр матриці A визначений і відомо, що $B = f(A)$. Який спектр матриці B ?

5. Дослідіть якість дробово-раціональних наближень (3.40) для експоненціальної функції. Результат порівняйте з його аналогами, отриманими іншими методами.

6. Інтерполяційна формула Лагранжа-Сільвестра наведена для випадку, коли всі власні числа заданої матриці різні. Нехай у матриці розміром 3×3 власні числа відрізняються на задану величину q . Дослідіть аналог інтерполяційної формули для випадку, коли q прямує до нуля.

7. Для двох матриць A і B розміру $N = 2$ переконайтеся, що :

$$\exp(A + B) \neq \exp(A) \exp(B);$$

$$\sin(A + B) \neq \sin(A) \cos(B) + \sin(B) \cos(A).$$

При виконанні якої умови рівність буде виконуватися?

8. Розгляньте матриці, вказані у завданні 3. Побудуйте вказані для них функції методом розкладання в степеневий ряд, обравши відповідний тейлорівський ряд. Порівняйте ефективність обох методів.

9. Для заданих (2×2) і (3×3) -матриць A знайдіть обернену A^{-1} , використовуючи характеристичний багаточлен цієї матриці.

10. Побудуйте приклади матриць A розміром (2×2) , таких, що A^2 збігається з нульовою матрицею.

11. Побудуйте приклади матриць A розміром (3×3) , таких, що A^2 та A^3 збігається з нульовою матрицею.

4. Чисельне диференціювання таблично заданої функції

4.1. Основні теоретичні відомості

Задача чисельного диференціювання таблично заданої функції, як правило, розглядається на основі використання інтерполяційної формули Лагранжа або за допомогою апроксимаційних формул вибраного порядку.

Замість вхідної таблично заданої функції будується її поліноміальний аналог, після чого знаходиться чисельними методами його похідна (табл. 4.1 та табл. 4.2).

Ця похідна і використовується як похідна вхідної таблично заданої функції.

Таблиця 4.1 — Таблично задана функція

n	0	1	2	3	4	...	N
x_n	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	...	x_N
y_n	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	...	y_N

Поняття похідної пов'язано з поняттям *неперервності функції*. В тому випадку, коли функція задана таблично, їй ставять у відповідність другу функцію, в деякому сенсі найближчу, похідну якої знаходять, а отримані її значення використовують як похідну вихідної таблично заданої функції.

4.2. Алгоритми диференціювання таблично заданої функції

Інколи потрібно визначити похідну функції, в тому числі похідну таблично заданої функції.

Таблиця 4.2 — Таблично задана функція та її похідна

n	0	1	2	3	4	...	N
x_n	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	...	x_N
y_n	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	...	y_N
y'_n	y'_0	y'_1	y'_2	y'_3	y'_4	...	y'_N

Задача чисельного диференціювання формулюється таким чином: заданій таблиці упорядкованих значень деякої функції потрібно поставити у відповідність іншу таблицю впорядкованих значень іншої функції так, щоб ця інша функція мала властивості першої похідної від вхідної функції.

Нехай задано таблицю, яка утворена $(N + 1)$ парами чисел $\{x_n, y_n\}$, де $0 \leq n \leq N$. Приклад такої таблиці наведено в табл. 4.1. Також, як і раніше, називатимемо $\{X_n\}$ – аргументним масивом, $\{Y_n\}$ – функційним масивом, а кожну точку (x_n, y_n) – вузлом.

Треба побудувати таблицю, тобто дописати ще один рядок, який в наборі вузлів утворений $(N + 1)$ парами чисел $\{x_n, y'_n\}$, де $0 \leq n \leq N$ (див. табл. 4.2).

Задача чисельного диференціювання функції тісно пов'язана з проблемою наближення цієї функції. Серед методів наближення найпоширенішими є інтерполяційні та апроксимаційні. Тому розглянемо диференціювання за допомогою інтерполяції та апроксимації.

4.3. Диференціювання заданої функції за допомогою інтерполяції

Поліном $L_N(x)$ вигляду

$$L_N(x) = \sum_{n=0}^N y_n \prod_{k=0, k \neq n}^N \frac{x - x_k}{x_n - x_k} \quad (4.1)$$

називається *інтерполяційним поліномом Лагранжа*.

Неважко переконатися, що

$$L_N(x_n) = y_n. \quad (4.2)$$

Таким чином, функції $y(x)$, яку задано масивом $\{y\}$, можна поставити у відповідність функцію $Y(x) = L_N(x)$. Функція $Y(x)$ є поліномом степеня N . Диференціюючи, одержимо

$$Y'(x) = L'_N(x). \quad (4.3)$$

Розглянемо випадок *рівновіддалених* аргументних вузлів з постійним кроком h

$$x_n = x_0 + nh, \quad (4.4)$$

після чого за допомогою полінома $L_N(x)$ шукатимемо значення похідної функції у вузлах інтерполяції, які відповідають заданій таблиці.

4.4. Алгоритми диференціювання за допомогою інтерполяції

Розглянемо поширений випадок рівновіддалених з кроком h аргументних вузлів $x_n = x_0 + nh$, де $n = 0, 1, \dots, N$. На практиці, як правило, обирається фіксована кількість вузлів, що прилягають до того вузла, в якому шукається похідна. Цю групу вузлів називають *вікном*, оскільки кожний раз використовують вузли з вікна (рис. 4.1).

Алгоритм диференціювання *за трьома поточними вузлами* здійснюється за допомогою таких формул:

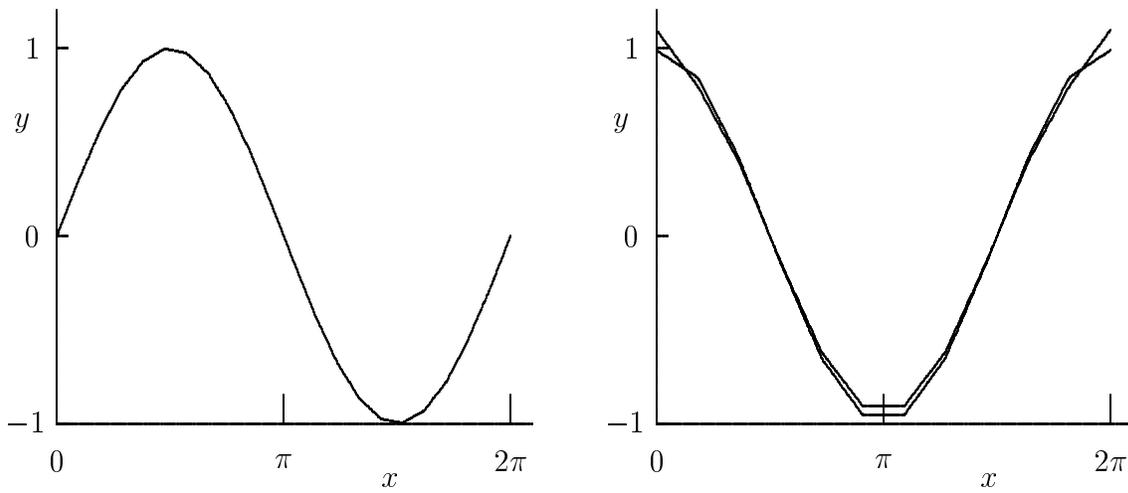


Рисунок 4.1 — Чисельне диференціювання таблично заданої функції на інтервалі $[0, 2\pi]$ за допомогою інтерполяції (кількість рівновіддалених вузлів $N = 11$; зліва — початкова функція $y = \sin(x)$; справа — результат чисельного диференціювання (трьох- та п'ятиточковий алгоритми))

а) для першого вузла ($n = 0$)

$$Y'_0 = \frac{1}{2h} (-3Y_0 + 4Y_1 - Y_2); \quad (4.5, a)$$

б) для проміжних вузлів ($n = 1, 2, \dots, N - 2, N - 1$)

$$Y'_n = \frac{1}{2h} (-Y_{n-1} + Y_{n+1}); \quad (4.5, b)$$

в) для останнього вузла ($n = N$)

$$Y'_N = \frac{1}{2h} (Y_{N-2} - 4Y_{N-1} + 3Y_N), \quad (4.5, c)$$

де N – номер останньої точки. Похибка цього алгоритму дорівнює $O(h^2)$.

Алгоритм диференціювання за чотирма поточними вузлами здійснюється за допомогою таких формул:

а) для перших двох вузлів ($n = 0, 1$):

$$\begin{aligned} Y'_0 &= \frac{1}{6h} (-11Y_0 + 18Y_1 - 9Y_2 + 2Y_3); \\ Y'_1 &= \frac{1}{6h} (-2Y_0 - 3Y_1 + 6Y_2 - Y_3); \end{aligned} \quad (4.6, a)$$

б) для проміжних вузлів ($n = 1, 2, \dots, N - 1, N$)

$$Y'_n = \frac{1}{6h} (-2Y_{n-1} - 3Y_n + 6Y_{n+1} - Y_{n+2}), \quad (4.6, b')$$

або

$$Y'_n = \frac{1}{6h} (Y_{n-2} - 6Y_{n-1} + 3Y_n + 2Y_{n+1}); \quad (4.6, b'')$$

в) для останніх двох вузлів ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned} Y'_{N-1} &= \frac{1}{6h} (Y_{N-3} - 6Y_{N-2} + 3Y_{N-1} + 2Y_N); \\ Y'_N &= \frac{1}{6h} (-2Y_{N-3} + 9Y_{N-2} - 18Y_{N-1} + 11Y_N), \end{aligned} \quad (4.6, c)$$

де N – номер останньої точки. Похибка цього алгоритму дорівнює $O(h^3)$.

Наведемо також формули для знаходження похідної, які ґрунтуються на *n'ятиточковій* інтерполяційній формулі ($N = 4$):

а) для перших двох вузлів ($n = 0, 1$):

$$\begin{aligned} Y'_0 &= \frac{1}{12h} (-25Y_0 + 48Y_1 - 36Y_2 + 16Y_3 - 3Y_4); \\ Y'_1 &= \frac{1}{12h} (-3Y_0 - 10Y_1 + 18Y_2 - 6Y_3 + Y_4); \end{aligned} \quad (4.7, a)$$

б) для проміжних вузлів ($n = 2, 3, \dots, N - 3, N - 2$)

$$Y'_n = \frac{1}{12h} (Y_{n-2} - 8Y_{n-1} + 8Y_{n+1} - Y_{n+2}); \quad (4.7, b)$$

в) для останніх двох вузлів ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned} Y'_{N-1} &= \frac{1}{12h} (-Y_{N-4} + 6Y_{N-3} - 18Y_{N-2} + 10Y_{N-1} + 3Y_N); \\ Y'_N &= \frac{1}{12h} (3Y_{N-4} - 16Y_{N-3} + 36Y_{N-2} - 48Y_{N-1} + 25Y_N), \end{aligned} \quad (4.7, c)$$

де N – номер останньої точки. Похибка цього алгоритму дорівнює $O(h^4)$.

Інтерполяційні формули (4.5), (4.6), (4.7) для таблиць, що містять велику кількість M вузлів, використовують таким чином. Обирають кількість вузлів інтерполювання N . Якщо така кількість фіксована, користуються відповідним виразом, який відповідає центральному вузлу інтерполювання.

Наприклад, якщо $N = 4$, обирають будь-яку з формул (4.6) для $Y'(x)$, яку можна використати для всіх внутрішніх вузлів вхідної таблиці значень функції.

Щоб знайти значення похідної на межах таблиці значень функції, користуються виразами, які відповідають нецентральному вузлам інтерполювання. Наприклад, при $N = 5$ для перших двох вузлів (ліва межа таблиці) використовують формули відповідно для $Y'(x_0)$ і $Y'(x_1)$, а для останніх двох вузлів (права межа таблиці) – формули відповідно для $Y'(x_{N-1})$ і $Y'(x_N)$.

Обробка вхідного масиву відповідно із M точок здійснюється таким чином, що кожного разу для вузла з поточним номером n використовуються сусідні до нього N вузлів таблиці (включаючи і сам n -й вузол).

Якщо не приймати до уваги межові вузли (це можливо за достатньо високої величини M), то значення похідної в цілому відшукуються за виразами, що відповідають центральному вузлам інтерполяції.

4.5. Алгоритми диференціювання за допомогою апроксимації

У тих випадках, коли дані у вхідній таблиці містять похибки (перешкоди), відношення $\Delta y/\Delta x$ може стати досить чутливим до похибки задання функції (рис. 4.2). У цьому випадку задачу знаходження похідної функції можна розв'язати за допомогою апроксимації, яка ґрунтується на *методі найменших квадратів*.

Розглянемо цей підхід на прикладі апроксимації сукупності з п'яти поточних точок $(y_{k-2}, y_{k-1}, y_k, y_{k+1}, y_{k+2})$ параболою другого порядку $Y(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$.

В основі методу лежить умова мінімальності *відхилю*

$$\delta = \delta(x) = \sum_{n=k-2}^{n=k+2} [Y(x) - y_n]^2 \quad (4.8)$$

для набору рівновіддалених точок з кроком h , які відлічують від поточного центрального вузла x_k .

Виконання цієї екстремальної умови дає параболу вигляду

$$Y(x) = \frac{1}{70h^2} \sum_{n=-2}^2 [(34 - 10n^2)h^2 + 7nhx + 5x^2(n^2 - 2)] y_n. \quad (4.9)$$

Це дає для похідної

$$Y'(x) = \frac{1}{70h^2} \sum_{n=-2}^2 (7nh + 10xn^2 - 20x)y_n, \quad (4.10)$$

або в розгорнутому вигляді

$$Y'(x) = \frac{1}{70h^2} \left[(-14h + 20x)y_{-2} + (-7h - 10x)y_{-1} - \right. \quad (4.11) \\ \left. - 20xy_0 + (7h - 10x)y_1 + (14h + 20x)y_2 \right],$$

при цьому поточні значення аргументу x повинні знаходитися в інтервалі $(x_{k-2} \leq x \leq x_{k+2})$.

Таким чином, в тому випадку, коли похідна функції відшукується на підставі п'яти поточних табличних значень, алгоритм диференціювання має такий вигляд:

а) для перших двох вузлів ($n = 0, 1$):

$$Y'_0 = \frac{1}{70h} (-54Y_0 + 13Y_1 + 40Y_2 + 27Y_3 - 26Y_4); \quad (4.12, a) \\ Y'_1 = \frac{1}{70h} (-34Y_0 + 3Y_1 + 20Y_2 + 17Y_3 - 6Y_4);$$

б) для проміжних вузлів ($n = 2, 3, \dots, N - 3, N - 2$):

$$Y'_n = \frac{1}{70h} (-14Y_{n-2} - 7Y_{n-1} + 7Y_{n+1} + 14Y_{n+2}); \quad (4.12, b)$$

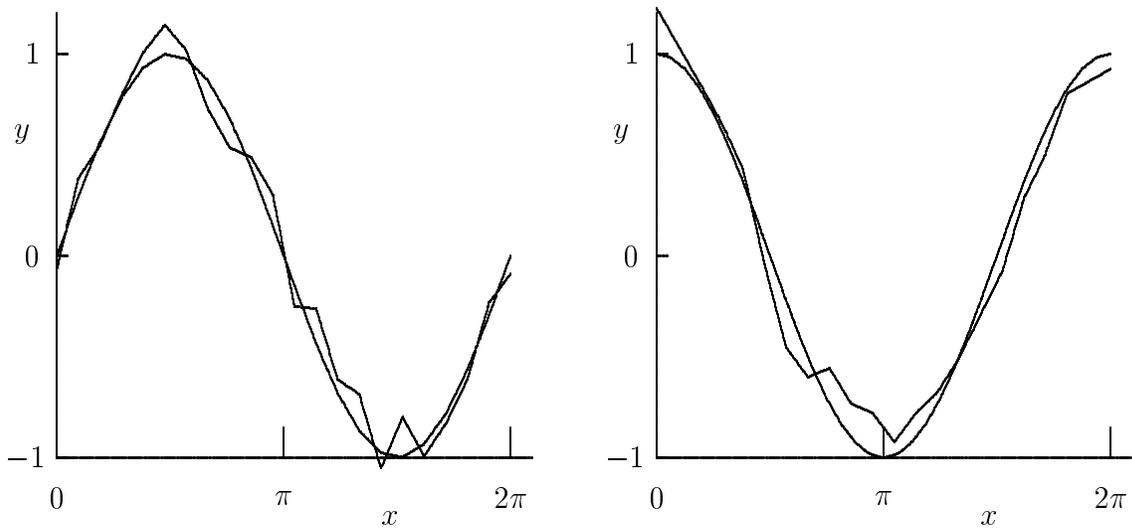


Рисунок 4.2 — Чисельне диференціювання таблично заданої функції на інтервалі $[0, 2\pi]$ за допомогою апроксимації (кількість рівновіддалених вузлів $N = 21$; зліва — початкова функція $y = \sin(x)$ та збурена функція (рівень збурення $-0,2$); справа — похідна $y' = \cos(x)$ та результат чисельного диференціювання (п'ятиточковий алгоритм))

в) для останніх двох вузлів ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned}
 Y'_{N-1} &= \frac{1}{70h} (6Y_{N-4} - 17Y_{N-3} - 20Y_{N-2} - 3Y_{N-1} + 34Y_N); \\
 Y'_N &= \frac{1}{70h} (26Y_{N-4} - 27Y_{N-3} - 40Y_{N-2} - 13Y_{N-1} + 54Y_N).
 \end{aligned}
 \tag{4.12, c}$$

Для центральних точок, коли $2 \leq n \leq (N - 2)$, отримуємо особливо просте подання

$$Y'_n = \frac{1}{10h} (-2Y_{n-2} - Y_{n-1} + Y_{n+1} + 2Y_{n+2}).
 \tag{4.13}$$

Використання цих виразів аналогічно зазначеному раніше. Тут зауважимо, що на практиці отримали розповсюдження, крім трьох-, чотирьох- і п'ятиточкових алгоритмів, диференціюючі алгоритми, які використовують і більшу кількість точок.

Наприклад, якщо використовуються не дві пари сусідніх точок, як у п'ятиточковому алгоритмі (4.9) знаходження значень похідної (в центральних точках), а K точок з кожного боку, то формула чисельного диференціювання прийме вигляд

$$Y'_n = \frac{1}{h} \left(\sum_{k=-K}^K k Y_{n+k} \right) \left(\sum_{k=-K}^K k^2 \right)^{-1}.
 \tag{4.14}$$

На підставі використаних підходів можна створювати чисельні алгоритми, що дозволяють знаходити другі похідні таблично заданої функції і похідні більш високих порядків, але зі зростанням порядку похідної результат диференціювання стає більш нестійким.

Алгоритми знаходження значення похідних певного порядку від таблично заданої функції прийнято називати *лінійними диференціюючими фільтрами*. Наведемо вирази для часто використовуваних лінійних диференціюючих фільтрів:

диференціюючі фільтри другого порядку :

$$Y_n'' = \frac{1}{h^2} (Y_{n-1} - 2Y_n + Y_{n+1}) + O(h^2); \quad (4.15, a)$$

$$Y_n'' = \frac{1}{12h^2} (11Y_{n-1} - 20Y_n + 6Y_{n+1} + 4Y_{n+2} - Y_{n+3}) + O(h^3); \quad (4.15, b)$$

$$Y_n'' = \frac{1}{12h^2} (-Y_{n-2} + 16Y_{n-1} - 30Y_n + 16Y_{n+1} - Y_{n+2}) + O(h^4); \quad (4.15, c)$$

диференціюючі фільтри третього порядку :

$$Y_n''' = \frac{1}{2h^3} (-Y_{n-1} + 3Y_n - 3Y_{n+1} + Y_{n+2}) + O(h^2); \quad (4.16, a)$$

$$Y_n''' = \frac{1}{2h^3} (-3Y_{n-1} + 10Y_n - 12Y_{n+1} + 6Y_{n+2} - Y_{n+3}) + O(h^3). \quad (4.16, b)$$

Якщо значення функції задані як результати вимірювання і потрібне дослідження поведінки похідних, то необхідно завчасно виконати чисельне згладжування, а потім – чисельне диференціювання.

Одержали розповсюдження також (за чисельного розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних) алгоритми знаходження частинних похідних від таблично заданих функцій декількох змінних.

Чисельне диференціювання таблично заданих функцій на практиці може дати неправильні значення з двох причин.

По-перше, табличні дані, що отримують, як правило, експериментальним шляхом, можуть містити більш або менш міцний шум, що накладається на дійсний сигнал. При диференціюванні внесок сигналу (плавної функції) відносно зменшується, в той час як внесок нерегулярного шуму – зростає.

По-друге, використовувані інтерполяційні або апроксимаційні поліноми можуть добре передавати хід самої функції, але їх похідні можуть значно відрізнятись від дійсних тим сильніше, чим вище порядок диференціювання.

Отже, чисельно диференціювати функцію можна, лише маючи достатньо інформації про неї.

4.6. Знаходження вищих похідних аналітичної функції

У деяких задачах потрібно знайти набір похідних $y'(x)$, $y''(x)$, $y'''(x)$, ..., $y^{(n)}(x)$ заданої функції для деяких значень її аргументу x . В цьому випадку, якщо функція $y(x)$ є аналітичною, то можна скористатися *інтегральною формулою Коші*

$$y(\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C (z - \alpha)^{-1} f(z) dz, \quad (4.17)$$

де α – точка, в якій шукається значення функції; C – контур інтегрування на комплексній z -площині, охоплюючий зліва точку $z = \alpha$.

Підставимо в цю формулу $\alpha = x$ і k разів продиференціюємо за x

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi i} \oint_C (z - x)^{-k-1} f(z) dz. \quad (4.18)$$

Використаємо як контур інтегрування C коло з центром у точці x та з деяким радіусом ρ , тобто $z = x + \rho \exp(i\varphi)$ та $dz = i\rho \exp(i\varphi) d\varphi$.

Після перетворень одержимо

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi\rho^k} \int_0^{2\pi} \exp(-ik\varphi) f(x + \rho e^{i\varphi}) d\varphi. \quad (4.19)$$

Таким чином, для аналітичної функції інформація про її значення на заданому контурі C є достатньою для знаходження в точках, охоплених цим контуром, значень як функції, так і її похідних.

Нехай

$$R(\varphi) = \operatorname{Re} f(x + \rho e^{i\varphi})$$

та

$$I(\varphi) = \operatorname{Im} f(x + \rho e^{i\varphi}).$$

Тоді дійсна частина виразу (4.19) приймає вигляд

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi\rho^k} \int_0^{2\pi} [\cos(k\varphi) R(\varphi) + \sin(k\varphi) I(\varphi)] d\varphi, \quad (4.20),$$

а для уявної частини маємо

$$\int_0^{2\pi} [\cos(k\varphi) I(\varphi) - \sin(k\varphi) R(\varphi)] d\varphi = 0. \quad (4.21),$$

Це рівняння можна використовувати для контролю обчислень.

Зокрема, для першої похідної одержуємо

$$y'(x) = \frac{1}{2\pi\rho} \int_0^{2\pi} [\cos(\varphi) R(\varphi) + \sin(\varphi) I(\varphi)] d\varphi. \quad (4.22)$$

Приклад

У теорії оцінювання та прийняття рішень є задача знаходження розподілу амплітуд $\{P_m\}$, де $m = 0, 1, 2, \dots$. Набір амплітуд $\{P_m\}$ визначається *твірною функцією* $Q(\lambda)$ такого вигляду:

$$Q(\lambda) = \frac{4r\nu \exp(\nu T)}{(r + \nu)^2 \exp(rT) - (r - \nu)^2 \exp(-rT)},$$

де $r = \sqrt{\nu^2 + 2\lambda\nu\sigma}$.

Кожна з амплітуд $\{P_m\}$ знаходяться із співвідношення

$$P_m = \frac{(-1)^m}{m!} \left. \frac{d^m}{d\lambda^m} Q(\lambda) \right|_{\lambda=1}.$$

Таким чином, у точці $\lambda = 1$ необхідно знаходити значення m -х похідних, порядок яких міститься в області $0 \leq m \leq m_{\max}$. При цьому значення максимального

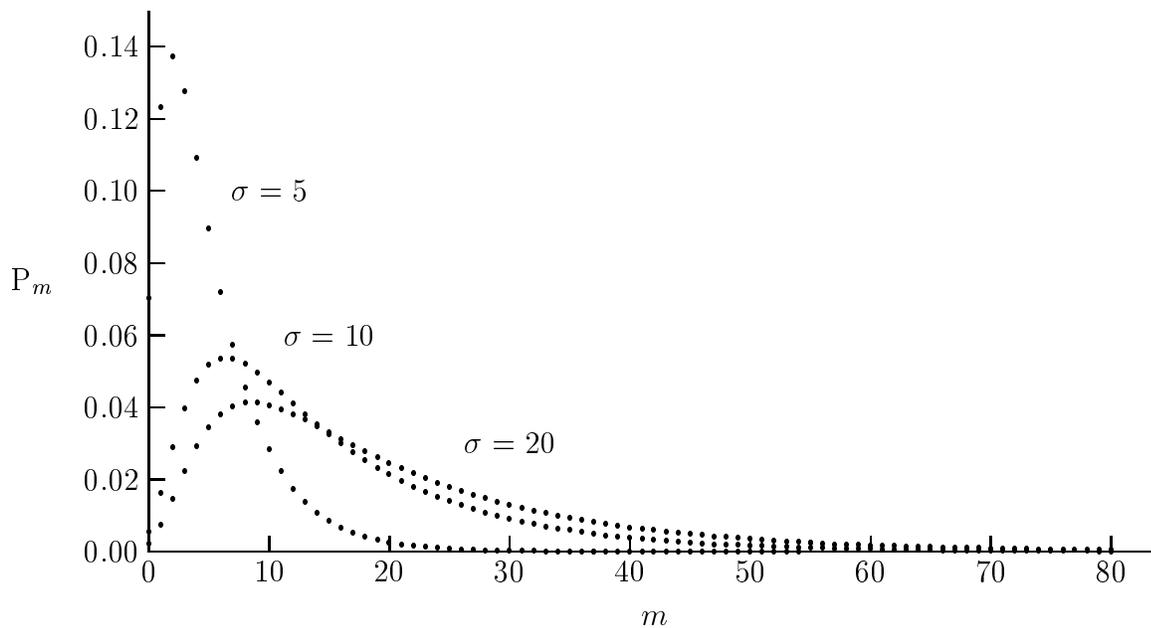


Рисунок 4.3 — Розподіл амплітуд P_m (параметри: $\nu = 1, 0$; $T = 1, 0$; ліворуч — $\sigma = 5$; посередині — $\sigma = 10$; праворуч — $\sigma = 20$)

порядку визначається з умови, що величиною амплітуд P_m , де $m > m_{\max}$, можна знехтувати.

Прийmemo в алгоритмі (4.19), що $\rho = 1$. Тоді отримаємо

$$P_m = \frac{(-1)^m}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} Q(1 + e^{im\varphi}) d\varphi.$$

Результат чисельного розрахунку набору амплітуд $\{P_m\}$ для випадку $0 \leq m \leq 80$ наведений на рис 4.3.

4.7. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на чотири години і містить два завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму обчислення таблиці похідної функції. Використайте метод інтерполяції з кількістю вузлів $N = 3, 4$ та 5 .

Вихідні дані до програми:

x_0 — перший аргументний вузол;

M — повна кількість вузлів таблиці функції;

h — крок;

$f(x)$ — функція, похідну якої треба відшукати.

Результат роботи програми — масив, який містить значення похідної функції у вузлах.

Варіанти

- а) $x_0 = -5,0$; $h = 0,25$; $M = 31$; $f(x) = \exp(-x^2)$;
б) $x_0 = -\pi$; $h = \pi/20$; $M = 41$; $f(x) = \sin(x)$;
в) $x_0 = -1,0$; $h = 0,25$; $M = 21$; $f(x) = \exp(x)$;
г) $x_0 = -\pi$; $h = \pi/20$; $M = 41$; $f(x) = \cos(x)$;
д) $x_0 = 0,0$; $h = 0,10$; $M = 31$; $f(x) = (1 + x)^{-1}$.

З а в д а н н я 2

Напишіть програму обчислення таблиці похідної функції. Використайте метод апроксимації.

Вхідні дані до програми :

x_0 – перший аргументний вузол;

h – крок;

M – повна кількість вузлів таблиці функції;

$f(x)$ – функція, похідну якої треба відшукати.

Результат роботи програми – масив, який містить у собі значення похідних функції у вузлах.

Варіанти

- а) $x_0 = -5,0$; $h = 0,25$; $M = 31$; $f(x) = 1/(1 + 3x^2)$;
б) $x_0 = -9,0$; $h = 0,50$; $M = 21$; $f(x) = \operatorname{arctg}(x)$;
в) $x_0 = -1,0$; $h = 0,10$; $M = 21$; $f(x) = \operatorname{tg}(x)$;
г) $x_0 = -3,0$; $h = 0,10$; $M = 21$; $f(x) = \exp(-x^2)$;
д) $x_0 = 0,0$; $h = 0,10$; $M = 31$; $f(x) = (1 + x)^{-1}$.

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити :

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, який містить таблицю вихідних даних у вузлах і таблицю значень похідної функції;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

4.8. Завдання для перевірки

1. У чому суть алгоритму диференціювання таблично заданих функцій?
2. Перевірте правильність формул (4.5)–(4.7) та (4.14)–(4.15) для випадку сталої функції. Переконайтесь, що $Y'(x) = 0$.
3. Перевірте правильність формул (4.5)–(4.7) та (4.14)–(4.15) для випадку лінійної функції.

4. Порівняйте значення похідних, заданих у п. 3 функцій, зі значеннями похідних відповідних функцій, здобутих аналітичним диференціюванням.

5. Дослідіть вплив приросту значення функції у крайніх вузлах на поведінку похідної.

6. Складіть функціональну блок-схему алгоритму знаходження похідної функції за формулами (4.5)–(4.7).

7. Складіть функціональну блок-схему алгоритму знаходження похідної функції за формулами (4.14)–(4.15).

8. В яких випадках краще користуватися триточковим або п'ятиточковим алгоритмом диференціювання таблично заданих функцій?

9. Запропонуйте блок-схему знаходження другої та третьої похідних таблично заданих функцій. Розгляньте функції: $y = \sin(x)$, $y = \cos(x)$ та $y = \exp(-x)$.

10. Поясніть роботу алгоритму диференціювання у кінцевих вузлах та в середині таблиці.

11. У виразах для алгоритму диференціювання сума коефіцієнтів у кожному рядку дорівнює нулю. Дайте інтерпретацію цьому факту.

12. Запропонуйте розвиток алгоритму диференціювання таблично заданих функцій на випадок кількості вузлів, відмінної від трьох або п'яти.

5. Чисельне інтегрування

5.1. Основні теоретичні відомості

З курсу математичного аналізу відомо, що коли функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[a, b]$, то певний інтеграл J від цієї функції у межах від a до b існує і має вигляд

$$J = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a), \quad (5.1)$$

де a та b – нижня та верхня межі інтегрування, $F(x)$ – первісна для функції $f(x)$.

Вираз (5.1) називається *формулою Ньютона–Лейбніца*.

Сформулюємо задачу чисельного інтегрування – знайти значення J певного інтегралу на відрізку $[a, b]$, якщо підінтегральна функція $f(x)$ на цьому відрізку задана.

Формули наближеного інтегрування називають *квадратурними*.

Чисельне інтегрування займає важливе місце у задачах аналізу даних. На практиці часто потрібно обчислювати значення певного інтегралу чисельними методами. Це буває у випадках, коли або не вдається виразити інтеграл у замкнутій формі, або вона настільки складна, що простіше скористатися чисельним інтегруванням.

Ті чи інші наближення інтегрального функціонала використовуються при побудові алгоритмів чисельного інтегрування. Існує велика різноманітність у підходах та засобах, що покладені в основу квадратурних формул. Ця різноманітність формул пов'язана з видами підінтегральної функції та можливими її особливостями, підходами в інтерполяції або апроксимації підінтегральної функції, загальним характером завдання, що було поставлено, та властивостями моделі, яка використовується при дослідженні.

Важливим при виборі необхідної квадратурної формули є урахування апріорно відомої інформації про підінтегральний вираз або результат інтегрування.

Відзначимо, що у практичних розрахунках з використанням комп'ютерів можливе застосування алгоритмів та програмних засобів, включених до її математичного забезпечення.

Квадратурні формули (за винятком невеликої кількості окремих випадків) носять наближений характер. З урахуванням похибки, що виникає при усіченні, результат чисельного інтегрування також є наближеним.

У загальному випадку квадратурні формули мають такий вигляд:

$$J = \int_a^b f(x) dx = \sum_{n=1}^N c_n f(x_n) + R, \quad (5.2)$$

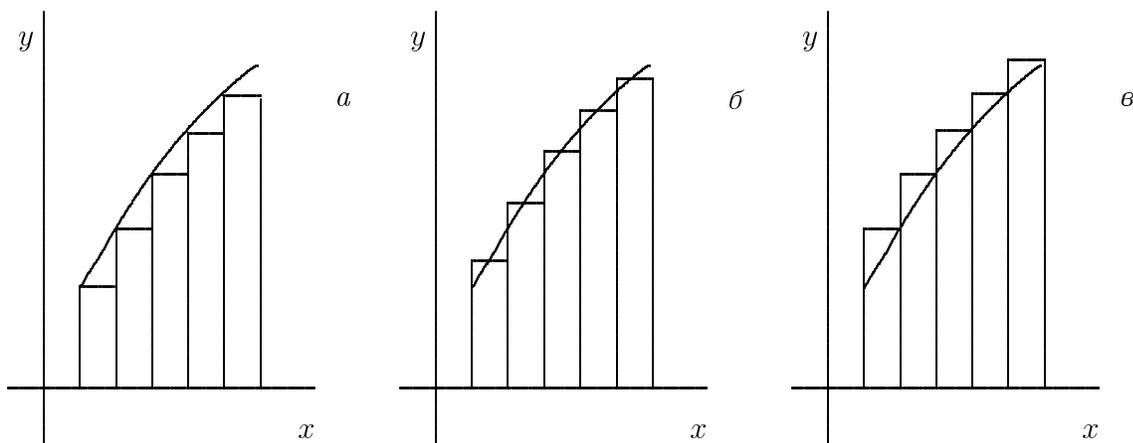


Рисунок 5.1 — Чисельне інтегрування за методом прямокутників: *a* — лівих, *б* — середніх, *в* — правих

де $\{x_n\}$ — набір вузлів, у яких знаходять відповідні значення підінтегральної функції; $\{c_n\}$ — набір квадратурних коефіцієнтів; R — похибка результату інтегрування.

Задаючись кількістю квадратурних доданків N та обираючи певні набори вузлів $\{x_n\}$ та коефіцієнтів $\{c_n\}$, приходять до тієї чи іншої квадратурної формули. На її вибір впливає: вигляд підінтегральної функції, необхідна точність обчислення інтегралу та пов'язана з нею кількість вузлів N квадратурної формули.

Шукане значення необхідного інтегралу наперед не відоме, що ускладнює контроль точності при обчисленнях. Тому обраний для роботи алгоритм, як правило, перевіряють на прикладі спеціально побудованого модельного інтегралу. Модельний інтеграл повинен інтегруватися точно, тобто аналітично, при цьому межі та підінтегральна функція у нього повинні, наскільки можливо, відповідати робочому інтегралу.

На практиці використовують дві групи квадратурних формул. У першій з них крок h квадратурних вузлів обирають сталим, тобто $h = (b - a)/N$. У другій групі квадратурні вузли розташовуються зі змінною відстанню між ними.

Розглянемо найбільш розповсюджені квадратурні формули та чисельні процедури, що основані на них.

5.2. Квадратурні формули прямокутників

Ці квадратурні формули найбільш прості. Вони ґрунтуються на безпосередньому визначенні інтегралу як граничного значення інтегральної суми (рис. 5.1).

Формула лівих прямокутників має вигляд

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} f(a + hn); \quad (5.3)$$

формула середніх прямокутників

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} f(a + hn + h/2); \quad (5.4)$$

формула правих прямокутників

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=1}^N f(a + hn). \quad (5.5)$$

У цих формулах: N – кількість доданків; $h = (b - a)/N$ – крок.

Похибка R цього алгоритму складає $R = h^2 M(b - a)/24$, де M – максимум $|f'(x)|$ на відрізку $[a, b]$.

Таким чином, підінтегральну функцію $f(x)$ замінюють на кусково-сталу.

Через малу точність методи прямокутників використовують рідко (для гладких підінтегральних функцій).

5.3. Метод трапецій

У рамках алгоритму *методу трапецій* підінтегральну функцію $f(x)$ заміняють на кусково-ламану функцію, точки злому якої збігаються з вузлами квадратурної формули (рис. 5.2)

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{n=1}^{N-1} f(a + hn) \right), \quad (5.6)$$

де $h = (b - a)/N$.

Похибка R цього алгоритму складає $R = h^2 M(b - a)/12$, де M – максимум $|f''(x)|$ на відрізку $[a, b]$.

Очевидно, що ця квадратурна формула дасть точне значення інтегралу для будь-якої лінійної функції $f(x)$, оскільки $f''(x) = 0$.

5.4. Метод парабол

Метод парабол інтегрування часто ще називають *методом Сімпсона*. Точність наближеного інтегрування помітно зростає, якщо підінтегральну функцію $f(x)$ на кожному з підінтервалів замінити параболою, яка приймає у кожних трьох послідовних вузлах значення, що збігаються зі значеннями підінтегральної функції. Число вузлів у цьому методі обирають парним (рис. 5.2).

Квадратурна формула парабол має вигляд

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{n=1}^N f(a + 2hn - h) + 2 \sum_{n=1}^{N-1} f(a + 2hn) \right], \quad (5.7)$$

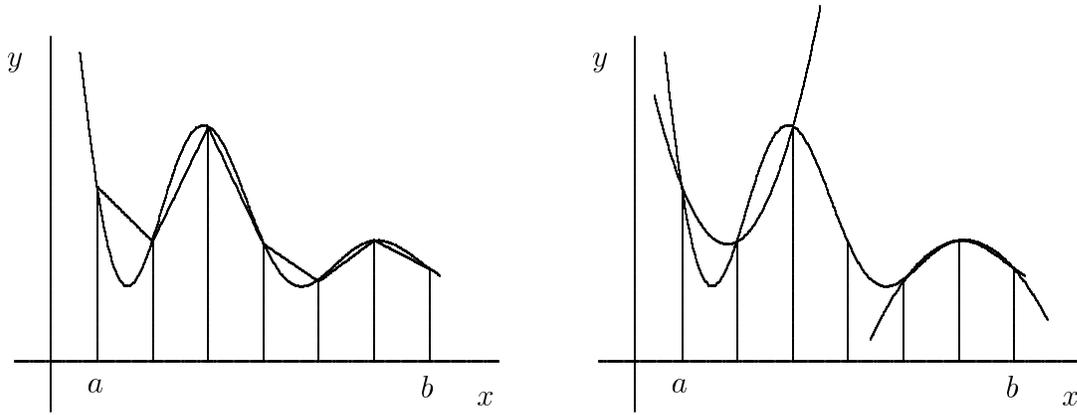


Рисунок 5.2 — До методів чисельного інтегрування: ліворуч — метод трапецій; праворуч — метод парабол (вказані перша і остання інтерполююча параболи)

де крок дорівнює $h = (b - a)/(2N)$.

Всього у цій квадратурній формулі використовується $2N + 1$ квадратурних вузлів.

Оцінка похибки R цієї квадратурної формули така: $R = hM(b - a)/180$, де $M = \max_x |f'''(x)|$.

Формула парабол є точною для поліномів до третього ступеня включно, бо їхня четверта похідна дорівнює нулю.

Чисельне інтегрування методом парабол можливо зі змінним кроком, який вибирається з умови отримання заданої точності результату. Для цього величини N надаються значення 2, 4, 8, 16 і т. д. При кожному подвоєнні кількості вузлів N точність інтегрування поліпшується приблизно в 15 разів.

Для застосування описаних вище алгоритмів прямокутників, трапецій та парабол обирають кількість N вузлів, що дасть для величини кроку $h = (b - a)/N$ (в алгоритмах прямокутників і трапецій) та $h = (b - a)/2N$ (в алгоритмі парабол). Звичайно приймають $N = 100$. Якщо результат інтегрування необхідно одержати більш точним, то кількість вузлів N алгоритму збільшують.

5.5. Квадратурні формули Ньютона-Котеса

Для подальшого збільшення точності квадратурного алгоритму збільшують степінь N інтерполяційного багаточлена, значення якого збігаються зі значеннями підінтегральної функції у вибраних вузлах.

У рамках *методу Ньютона-Котеса* для знаходження значення інтегралу

$$J = \int_a^b f(x) dx$$

задаються загальною кількістю вузлів N та для рівновіддалених аргументних вузлів обирають $x_n = a + nh$, де $n = 0, 1, 2, \dots, N$, після чого організують обчислення набору функціональних вузлів $y_n = f(x_n)$.

Таблиця 5.1 — Квадратурні коефіцієнти Ньютона-Котеса

$N = 1$	$\{H_1\} = (1, 1)$
$N = 2$	$\{H_2\} = \frac{1}{3} (1, 4, 1)$
$N = 3$	$\{H_3\} = \frac{1}{4} (1, 3, 3, 1)$
$N = 4$	$\{H_4\} = \frac{1}{45} (7, 32, 12, 32, 7)$
$N = 5$	$\{H_5\} = \frac{1}{144} (19, 75, 50, 50, 75, 19)$
$N = 6$	$\{H_6\} = \frac{1}{420} (41, 216, 27, 272, 27, 216, 41)$
$N = 7$	$\{H_7\} = \frac{1}{8640} (751, 3577, 1322, 2989, 2989, 1322, 3577, 751)$

Для рівновіддалених вузлів зі сталим кроком інтерполяційний багаточлен Лагранжа має вигляд

$$L_N(x) = \sum_{n=0}^N y_n \frac{(-1)^{N-n}}{n!(N-n)!} q(q-1)\dots(q-n+1)(q-n-1)\dots(q-N),$$

де $q = (x - a)/N$ – крок інтерполяції.

Переходячи до стандартного інтервалу інтегрування $[-1, 1]$

$$J = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) dx$$

і замінивши підінтегральну функцію на відповідний їй інтерполяційний багаточлен Лагранжа, отримаємо

$$J = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{n=0}^N H_n f(a + nh). \quad (5.8)$$

Тут $\{H_n\}$ – коефіцієнти Ньютона-Котеса ($n = 1, 2, \dots, N$)

$$H_n = \frac{(-1)^{N-n}}{N n! (N-n)!} \int_0^N t(t-1)\dots(t-n+1)(t-n-1)\dots(t-N) dt.$$

Ці коефіцієнти залежать не від вигляду $f(x)$, а лише від кількості вузлів інтерполяції N .

У табл. 5.1 наведено декілька значень вузлів $\{H_n\}$ (у рядку для даного N за дужку винесений спільний для всіх $(N+1)$ коефіцієнтів $\{H_n\}$ знаменник).

Квадратурні коефіцієнти обчислюють заздалегідь і зводять у таблицю. Похибка цього квадратурного алгоритму пропорційна максимуму $(N+2)$ -ї похідної функції $f(x)$ на інтервалі $[a, b]$.

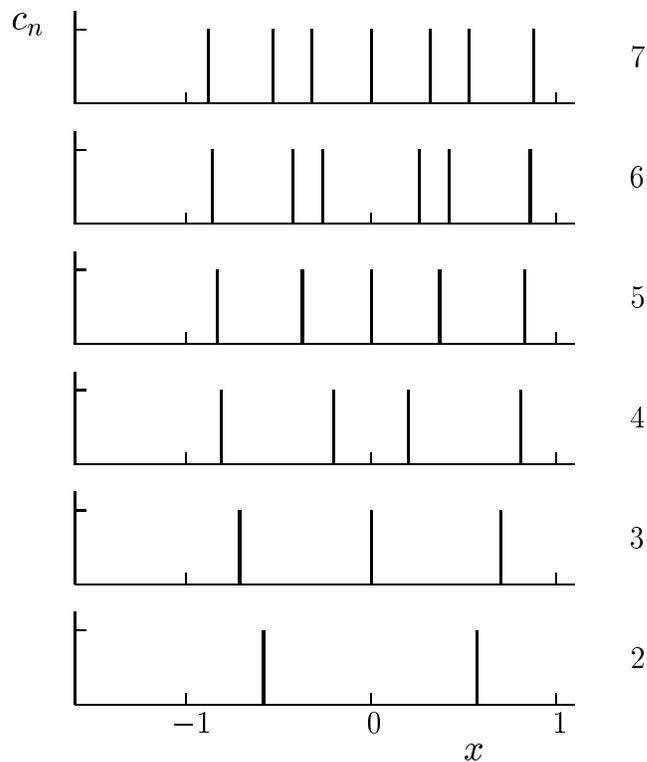


Рисунок 5.3 — Квадратурні вузли $\{x_n\}$ та квадратурні коефіцієнти $\{c_n\}$ у методі Чебишева (праворуч вказана загальна кількість вузлів; всі амплітуди коефіцієнтів дорівнюють 1)

У табл. 5.2 приведено декілька значень вузлів $\{x_n\}$ квадратурної формули Чебишева.

У тому випадку, коли границі інтегрування a та b відмінні від ± 1 , квадратурна формула Чебишева приймає вигляд

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{n=1}^{n=N} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_n\right). \quad (5.10)$$

Якщо вимагається використання більшої кількості вузлів, то інтервал $[a, b]$ заздалегідь розбивають на програмно задане число M підінтервалів, після чого для кожного з них користуються алгоритмом за формулою (5.10), а результати проміжного інтегрування додають. Для поточного контролю використовують декілька значень M підінтервалів, при цьому їх кількість збільшують, доки не буде досягнута потрібна точність інтегрування.

У квадратурній формулі Чебишева абсциси $\{x_n\}$ вузлів ніколи не потрапляють на границі інтервалів інтегрування. Тому, якщо особливості підінтегральної функції мають місце у граничних точках інтервалу інтегрування, квадратурна формула Чебишева більш прийнятна.

Таблиця 5.2 — Вузли квадратурної формули Чебишева

N	x_n	N	x_n	N	x_n
2	-0,577350	6	-0,866247	9	-0,911589
	0,577350		-0,422519		-0,601019
3	-0,707107	7	-0,266636	9	-0,528762
	-0,000000		0,266636		-0,167906
	0,707107		0,422519		0,000000
4	-0,794655	7	0,866247	9	0,167906
	-0,187593		-0,883862		0,528762
	0,187593		-0,529657		0,601019
	0,794655		-0,323912		0,911589
5	-0,832498	7	0,000000	9	
	-0,374541		0,323912		
	0,000000		0,529657		
	0,374541		0,883862		
	0,832498				

5.7. Квадратурна формула Гаусса

Для поліпшення точності при чисельному інтегруванні використовують *квадратурну формулу Гаусса*

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{n=1}^N c_n f(x_n), \quad (5.11)$$

у якій використовуються як квадратурні вузли $\{x_n\}$ інтерполяції, так і квадратурні коефіцієнти $\{c_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N$.

Похибкою квадратурної формули Гаусса є

$$R_N = \frac{(b-a)^{2N+1}}{2N+1} \frac{(N!)^4}{[(2N)!]^3} \max_x |f^{(2N)}(x)|. \quad (5.12)$$

Набір з $2N$ величин $\{c_n\}$ і $\{x_n\}$ визначають з тієї умови, що квадратурна формула точна для будь-якого полінома степеня $2N$, і знаходять заздалегідь (рис. 5.4). Абсциси $\{x_n\}$ утворені з нулів полінома Лежандра $P_N(x)$, а вагові множники знаходять з виразу

$$c_n = \frac{2}{(1-x_n^2) [P'_n(x_n)]^2}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (5.13)$$

В табл. 5.3 наведено декілька значень квадратурних вузлів $\{x_n\}$ та квадратурних коефіцієнтів $\{c_n\}$ для $2 \leq N \leq 6$ алгоритму Гаусса.

У загальному випадку за допомогою лінійної заміни змінної інтегрування квадратурну формулу Гаусса приводять до вигляду

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{n=1}^N c_n f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_n\right). \quad (5.14)$$

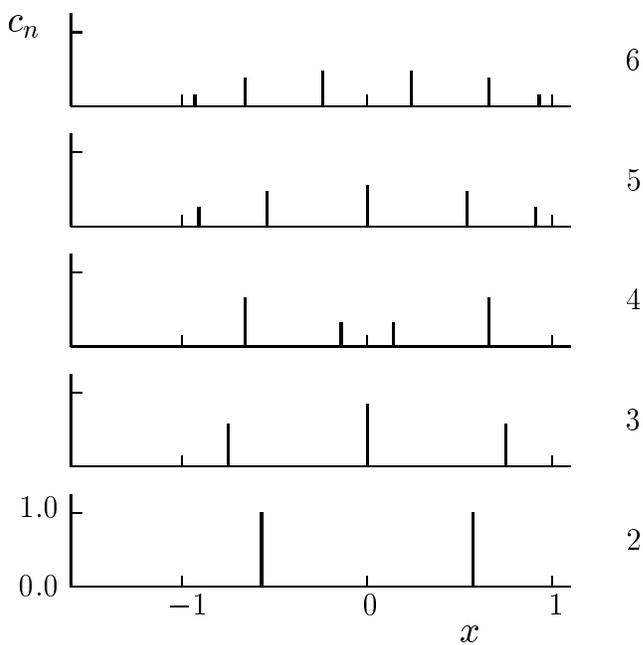


Рисунок 5.4 — Квадратурні вузли $\{x_n\}$ та квадратурні коефіцієнти $\{c_n\}$ у методі Гаусса (праворуч вказана загальна кількість вузлів)

Квадратурна формула Гаусса забезпечує високу точність чисельного інтегрування для порівняно невеликої кількості вузлів. При заданій кількості вузлів N вона найбільш точна. Є таблиці для $\{x_n\}$ і $\{c_n\}$ великого обсягу, наприклад, $N = 96$ та $N = 192$.

Також, як і у квадратурній формулі Чебишева, абсциси $\{x_n\}$ вузлів квадратурної формули Гаусса ніколи не потрапляють на границі інтервалу інтегрування, тому її зручно використовувати для обчислень з особливостями на границях.

При інтегруванні із заданою точністю (коли в алгоритмі потрібно використати велику кількість квадратурних вузлів), інтервал $[a, b]$ заздалегідь розбивають на програмно задане число M підінтервалів, після чого для кожного з них користуються алгоритмом щодо цієї формули, а результати проміжного інтегрування додають.

Для поточного контролю використовують декілька значень M підінтервалів, до того ж їх кількість збільшують, доки не буде досягнута потрібна точність інтегрування.

Квадратурна формула Гаусса зручна у роботі, її широко використовують у практиці чисельного інтегрування.

5.8. Розгорнутий приклад застосування квадратурних алгоритмів

Застосування квадратурних алгоритмів пов'язано з виглядом підінтегрального виразу, потрібною точністю та наявністю обчислювальних ресурсів.

Розглянемо застосування вище перелічених квадратурних алгоритмів на при-

Таблиця 5.3 — Вузли квадратурної формули Гаусса

N	x_n	c_n	N	x_n	c_n
2	-0,5773503	1,0000000	5	-0,9061798	0,2369269
	0,5773503	1,0000000		-0,5384693	0,4786287
3	-0,7745967	0,5555556		0,0000000	0,5688888
	-0,0000000	0,8888889		0,5384693	0,4786287
	0,7745967	0,5555556		0,9061798	0,2369269
4	-0,8611363	0,3478548		6	-0,9324695
	-0,3399810	0,6521452	-0,6612093		0,3607616
	0,3399810	0,6521452	-0,2386192		0,4679131
	0,8611363	0,3478548	0,2386192		0,4679131
		0,6612093	0,3607616		
		0,9324695	0,1713245		

кладі інтегралу (рис. 5.5)

$$J(x) = \int_0^x f(x') dx', \quad (5.15)$$

де

$$f(x') = \exp(x') \sin(x'). \quad (5.16)$$

Такий вибір підінтегральної функції пов'язаний з її трансцендентністю, він також дає можливість порівнювати результати з їх аналітичним аналогом.

У виразі (5.15) для кожного поточного значення результату $J = J(x)$ інтервал інтегрування буде дорівнювати $[0, x]$ (рис. 5.5), а для кожного значення аргументу x результат аналітичного інтегрування такий:

$$J_{\text{ideal}}(x) = \frac{1}{2} [1 + \exp(x)(\sin x - \cos x)]. \quad (5.17)$$

Оскільки частина результатів практично зливаються при їх побудові на графіку, наведемо чисельні значення інтегралу $J(x)$ в табл. 5.4.

У ній позначено:

- $J_1(x)$ – метод лівих прямокутників (5.3);
- $J_2(x)$ – метод середніх прямокутників (5.4);
- $J_3(x)$ – метод правих прямокутників (5.5);
- $J_4(x)$ – метод трапецій (5.6);
- $J_5(x)$ – метод парабол Сімпсона (5.7);
- $J_6(x)$ – метод Чебишева (5.10);
- $J_7(x)$ – метод Гаусса (5.14).

За програмної реалізації було обрано для всіх значень верхньої границі x в (5.15) кількість вузлів N :

- в алгоритмах прямокутників, трапецій та парабол – $N = 25$ квадратурних вузлів;
- в алгоритмі Чебишева – $N = 7$ квадратурних вузлів;
- в алгоритмі Гаусса – $N = 6$ квадратурних вузлів.

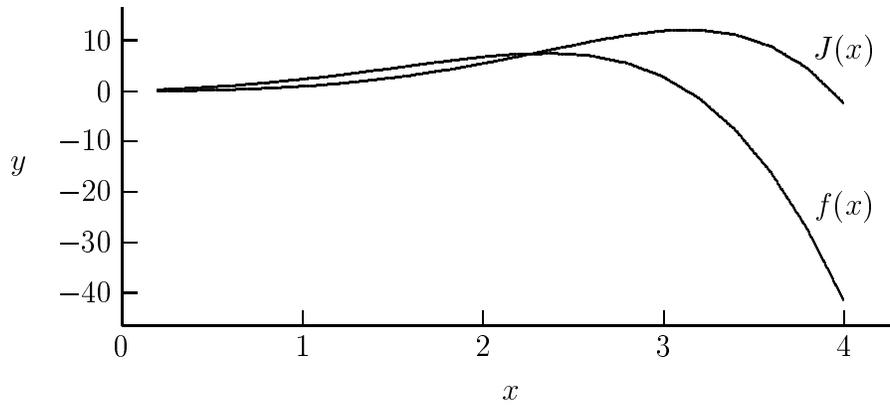


Рисунок 5.5 — Залежності підінтегральної функції $f(x)$ та результати інтегрування $J(x)$

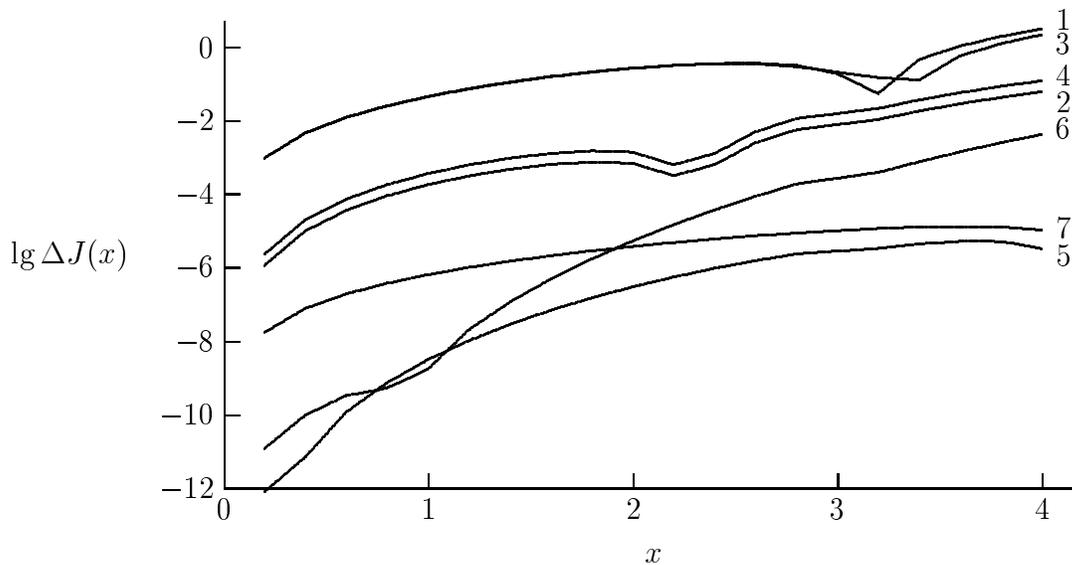


Рисунок 5.6 — Похибки $\Delta J(x)$ чисельного визначення величини інтегралу $J(x)$ зі змінною верхньою границею x ; квадратурні алгоритми: 1 — лівих прямокутників; 2 — середніх прямокутників; 3 — правих прямокутників; 4 — трапецій; 5 — метод Сімпсона (усі — 25 вузлів); 6 — метод Чебишова (7 квадратурних вузлів); 7 — метод Гаусса (6 квадратурних вузлів)

Таблиця 5.4 — Результати чисельного інтегрування

x_n	$J_1(x)$	$J_2(x)$	$J_3(x)$	$J_4(x)$	$J_5(x)$	$J_6(x)$	$J_7(x)$
0,20	0,0218	0,0228	0,0238	0,0228	0,0228	0,0228	0,0228
0,40	0,0988	0,1034	0,1081	0,1035	0,1034	0,1034	0,1034
0,60	0,2502	0,2624	0,2749	0,2626	0,2625	0,2625	0,2625
0,80	0,4976	0,5229	0,5487	0,5231	0,5230	0,5230	0,5230
1,00	0,8639	0,9091	0,9554	0,9097	0,9093	0,9093	0,9093
1,20	1,3720	1,4454	1,5206	1,4463	1,4457	1,4457	1,4457
1,40	2,0425	2,1530	2,2663	2,1544	2,1535	2,1535	2,1534
1,60	2,8906	3,0471	3,2075	3,0491	3,0478	3,0478	3,0478
1,80	3,9223	4,1322	4,3466	4,1344	4,1330	4,1330	4,1330
2,00	5,1295	5,3962	5,6670	5,3983	5,3969	5,3969	5,3969
2,20	6,4835	6,8036	7,1256	6,8046	6,8040	6,8039	6,8039
2,40	7,9284	8,2877	8,6432	8,2858	8,2871	8,2870	8,2872
2,60	9,3728	9,7412	10,0946	9,7337	9,7387	9,7387	9,7387
2,80	10,6816	11,0074	11,2986	10,9902	11,0016	11,0014	11,0016
3,00	11,6677	11,8703	12,0079	11,8378	11,8595	11,8591	11,8596
3,20	12,0842	12,0477	11,9009	11,9926	12,0293	12,0285	12,0293
3,40	11,6187	11,1851	10,5774	11,0981	11,1561	11,1547	11,1561
3,60	9,8918	8,8553	7,5597	8,7257	8,8121	8,8096	8,8121
3,80	6,4592	4,5645	2,3019	4,3806	4,5032	4,4989	4,5032
4,00	0,8230	-2,2329	-5,7882	-2,4826	-2,3161	-2,3230	-2,3163

З табл. 5.4 та рис. 5.6 випливає, що якщо обирати з відносно простих методів прямокутників, то слід зупинитися на методі середніх прямокутників. До того ж важливо, що в цьому методі не використовуються значення підінтегральної функції в кінцевих точках інтервалу інтегрування, що істотно при знаходженні значень інтегралів з особливостями в цих точках.

Методи лівих та правих прямокутників дають результати гіршої якості.

З методів трапецій та парабол перевагу потрібно віддати методу Сімпсона (парабол) як більш точному при одній і тій же кількості квадратурних вузлів N . Однак ці методи використовують значення підінтегральної функції в граничних точках інтервалу інтегрування.

Порівнюючи чисельні результати інтегрування, що отримані за методом Гаусса та методом Чебишева, можна зробити висновок на користь методу Гаусса, оскільки точність, що досягається цим методом, краща. Відзначимо, що кількість квадратурних вузлів N , яка використовується в цих алгоритмах, достатньо невелика (7 та 6).

З подальшим зростанням верхньої границі x інтегрування у (5.15) точність усіх алгоритмів погіршується (рис. 5.6). Цей факт можна пояснити тим, що за незмінної кількості квадратурних вузлів N крок h інтегрування у (5.15) зростає.

Для поліпшення точності необхідно:

- в алгоритмах прямокутників, трапецій та парабол – збільшувати кількість квадратурних вузлів N ;
- в алгоритмах за методами Чебишева та Гаусса – за обраної та незмінної

кількості квадратурних вузлів дробити увесь інтервал інтегрування на підінтервали та знаходити значення інтегралу на кожному з них, після чого ці значення підсумовувати. Загальну кількість підінтервалів необхідно збільшувати до такої величини, яка забезпечить потрібну точність.

5.9. Обчислення інтегралів з особливостями

За чисельного інтегрування можливі особливості двох видів:

- а) нескінченні одна або обидві межі інтегрування;
- б) особливості, що інтегруються всередині інтервалу інтегрування.

Якщо обидві межі інтегрування є нескінченності, то вхідний інтеграл J можна привести до вигляду

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\infty} [f(x) + f(-x)] dx, \quad (5.18)$$

в якому нескінченна вже тільки одна (верхня) межа.

Для обчислення значень інтегралів, у яких одна з меж (наприклад, верхня) дорівнює нескінченності, використовують одну зі стандартних підстановок змінної інтегрування, що зводить вхідний вираз до інтегралу з фіксованими межами.

Наприклад,

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\pi/2} f(\operatorname{tg} \varphi) \frac{d\varphi}{\cos^2 \varphi} \quad - \text{ заміна } x = \operatorname{tg} \varphi; \quad (5.19, a)$$

$$\int_1^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 f(t^{-1}) \frac{dt}{t^2} \quad - \text{ заміна } x = 1/t; \quad (5.19, b)$$

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 [f(t) + t^{-2} f(t^{-1})] dt \quad - \text{ заміна } x = 1/t. \quad (5.19, c)$$

Таким чином, наявна особливість переноситься з межі інтегрування у межову точку підінтегрального виразу, а вибір замін треба пов'язувати з конкретним виглядом функції $f(x)$.

Нехай підінтегральний вираз $f(x)$ у початковому інтегралі

$$J = \int_a^b f(x) dx$$

має особливість всередині інтервалу інтегрування у певних точках $\gamma_1, \dots, \gamma_{M-1}, \gamma_M$. У такому випадку інтеграл J необхідно розбити на суму сукупності інтегралів

$$J = \int_a^{\gamma_1} f(x) dx + \sum_{m=1}^{M-1} \int_{\gamma_m}^{\gamma_{m+1}} f(x) dx + \int_{\gamma_M}^b f(x) dx \quad (5.20)$$

так, щоб всі особливості виявилися локалізованими у межах інтегрування. Отже, визначення значень виниклих $(M + 1)$ інтегралів можливо зараз здійснити за допомогою квадратурного алгоритму Чебишева або квадратурного алгоритму Гаусса, оскільки у цих формулах абсциси $\{x_n\}$ вузлів не потрапляють на межі інтервалу.

Таким чином, знаходження значень інтегралів з особливостями вимагає попереднього дослідження підінтегрального виразу та приведення вхідного інтегралу до вигляду, прийняттого для впровадження зручної квадратурної формули.

5.10. Обчислення інтегралів, підінтегральні функції яких містять ваговий множник

У практичному програмуванні часто зустрічаються інтеграли деяких стандартних виглядів. Особливо поширені інтеграли з певними значеннями меж інтегрування та заданими ваговими множниками у підінтегральних функціях. Перерахуємо найбільш важливі з них :

квадратурні формули Гаусса і Чебишева відповідають інтегралу

$$J = \int_{-1}^1 f(x) dx; \quad (5.21, a)$$

квадратурна формула Гаусса-Лагерра відповідає інтегралу

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-x) f(x) dx; \quad (5.21, b)$$

квадратурна формула Гаусса-Ерміта відповідає інтегралу

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) f(x) dx; \quad (5.21, c)$$

квадратурна формула Гаусса-Чебишева відповідає інтегралу

$$J = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\pm 1/2} f(x) dx; \quad (5.21, d)$$

квадратурна формула Гаусса-Ахієзера відповідає інтегралу

$$J = \int_{\alpha}^{\beta} [x(x - \alpha)(\beta - x)]^{-1/2} f(x) dx, \quad (5.21, e)$$

приєднана квадратурна формула Гаусса-Лагерра відповідає інтегралу

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-x^2) x^{-1/2} f(x) dx. \quad (5.21, f)$$

Для цих та багатьох інших спеціальних інтегралів стандартного вигляду розроблені квадратурні формули, для практичної реалізації яких набори квадратурних коефіцієнтів та вузлів інтерполяції визначені заздалегідь (для різноманітного числа доданків, що входять до квадратурної формули) і зведені в таблиці.

Відзначимо також, що для багатьох спеціальних функцій, які часто використовуються і мають практичне значення, таких як функція Лапласа $\Phi(x)$, функцій Бесселя $J_n(x)$ та $I_n(x)$ індексу n , функція помилок $\operatorname{erf}(x)$ та доповняльна до неї $\operatorname{erfc}(x)$, у математичних забезпеченнях програмних середовищ існують вбудовані підпрограми їх обчислення. Тому часто виявляється зручним зводити розглядуваний інтеграл до цих спеціальних функцій.

5.11. Комплексновизначені інтеграли

У ряді завдань, таких як обчислення перетворень Фур'є або обернення перетворень Лапласа, виникає потреба знайти значення *комплексновизначеного інтегралу*. У загальному випадку інтеграли цього типу мають такий вигляд:

$$J = \int_C f(z) dz, \quad (5.22)$$

де $f(z)$ – комплексновизначена аналітична функція комплексного аргументу z ; C – шлях інтегрування.

Нехай на комплексній площині шлях C розпочинається у точці $z = z_H$ і закінчується у точці $z = z_K$. Можливий підхід до обчислення інтегралу J – це параметризація шляху інтегрування C . Найчастіше шлях C з допомогою дійсної змінної t параметризують прямою

$$z = z(t) = (z_K + z_H) / 2 + t(z_K - z_H) / 2. \quad (5.23)$$

У цьому випадку інтеграл (5.22) приймає вигляд

$$J = \frac{z_K - z_H}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{z_K + z_H}{2} + t \frac{z_K - z_H}{2}\right) dt. \quad (5.24)$$

Після розділення підінтегрального виразу на реальну і уявну частини ($i = \sqrt{-1}$)

$$f(\xi) = \operatorname{Re}f(\xi) + i \operatorname{Im}f(\xi), \quad (5.25, \text{а})$$

де

$$\xi = \frac{z_K + z_H}{2} + t \frac{z_K - z_H}{2} \quad (5.25, \text{б})$$

знаходять значення двох інтегралів, що виникають, і, нарешті, значення інтегралу J .

5.12. Двократні та трикратні інтеграли

Значення кратних інтегралів можна обчислювати повторним застосуванням методів, побудованих для однократних інтегралів.

Для *двократних інтегралів*, наприклад, можна користуватися формулою

$$\int_{\alpha_1}^{\beta_1} \int_{\alpha_2}^{\beta_2} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M c_n c_m f(x_{1,n}, x_{2,m}), \quad (5.26)$$

де $\{c_n\}$ і $\{c_m\}$ – набори квадратурних коефіцієнтів, а $\{x_{1,n}\}$ і $\{x_{2,m}\}$ – набори квадратурних вузлів.

Аналогічну формулу можна побудувати і для *трикратних інтегралів*

$$\int_{\alpha_1}^{\beta_1} \int_{\alpha_2}^{\beta_2} \int_{\alpha_3}^{\beta_3} f(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3 = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L c_n c_m c_l f(x_{1,n}, x_{2,m}, x_{3,l}). \quad (5.27)$$

При обчисленні двократних та трикратних інтегралів алгоритми однократного інтегрування використовують *рекурентно*. Обсяг обчислювальних витрат у цих випадках пропорційний добуткам NM і NML відповідно, а при рівному числі вузлів ($M = L = N$) необхідні ресурси зростають як N^2 і N^3 .

5.13. Багатократні інтеграли

Будемо вважати, що шуканий інтеграл J_K кратності K зведений до стандартних меж інтегрування $[0, 1]$ за всіма K змінними інтегрування

$$J_K = \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ разів}} f(X) d^K X, \quad (5.28)$$

де вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ утворений з набору змінних інтегрування, а $f(X)$ – підінтегральна функція (у диференціалі $d^K X$ вказана вимірність – кратність інтегрування K).

Для обчислення визначеного інтегралу кратності K (5.28) М.М. Коробов побудував *оптимальні інтерполяційні формули* для скалярних функцій, що залежать від заданого набору з K аргументів. На цій основі запропоновано для обчислення певного інтегралу кратності K скористатися квадратурною формулою

$$\underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ раз}} f(X) d^K X = \sum_{m=1}^M c_m f(X_m), \quad (5.29)$$

для якої набір з M вагових коефіцієнтів $\{c_m\}$ та набір координат M -компонентних квадратурних вузлів $\{X_m\}$ обчислюють заздалегідь для різноманітних K . Таблиці цих величин побудовані для кратності $2 \leq K \leq 21$.

Алгоритм Коровова доцільно застосовувати при багаторазовому інтегруванні підінтегральних виразів гладкого типу.

У тих практичних випадках, коли підінтегральна функція має особливості (хоча і такі, що інтегруються) або, наприклад, задається умовними виразами або характеризується стрибками її значень, застосовують *метод статистичних випробувань* або *метод Монте-Карло*. Цей метод не має обмежень на величину кратності інтегрування (від неї залежать лише потрібні часові ресурси). Докладно з методом Монте-Карло можна познайомитися у відповідній темі.

У табл. 5.5 систематизовані дані про вживання деяких квадратурних алгоритмів для інтегралів заданої кратності. В цій таблиці символ "+" вказує на вживання методу, символ "±" – на часткову можливість застосування, а символ "-" на неможливість використання. З табл. 5.5 виходить, що по мірі збільшення кратності K інтегрування можливість застосування перерахованих алгоритмів зростає.

Таблиця 5.5 — Використання квадратурних алгоритмів для інтегралів заданої кратності

Кратність K	Алгоритм				
	Сімпсона	Чебишева	Гаусса	Коровова	Монте-Карло
1	+	+	+		+
2	±	+	+	+	+
3	-	±	±	+	+
4	-	-	-	+	+
≤ 21	-	-	-	+	+
> 21	-	-	-	-	+

У математичних забезпеченнях середовищ різних комп'ютерів, а також у багатьох спеціалізованих математичних пакетах (серед них відзначимо різні версії таких пакетів, як Maple, Mathematica, MathCAD, MatLab та Statistica) існують вбудовані підпрограми обчислення багатократних інтегралів з наперед заданою точністю. Але перед їх застосуванням необхідно обов'язково виконати перевірку на прикладі модельного інтегралу, результат інтегрування якого може бути визначений аналітично і тому його значення є відомим.

5.14. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на шість годин і містить три завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму чисельного інтегрування заданої функції у заданих межах. Програма повинна містити п'ять квадратурних алгоритмів, заснованих на формулах прямокутників (5.3)–(5.5), формулі трапецій (5.6) та формулі парабол (5.7).

Вхідні дані до програми:

a – нижня межа інтегрування;

b – верхня межа інтегрування;

$f(x)$ – функція, від якої шукається інтеграл;
 N – кількість кроків.

Результат роботи програми – масив, що містить значення п'яти обчислених інтегралів.

Варіанти

- а) $a = 1,0$; $b = 4,0$; $N = 32$; $f(x) = \exp(-x)$;
- б) $a = 0,0$; $b = 2,0$; $N = 80$; $f(x) = \sin(x)$;
- в) $a = 0,0$; $b = 5,0$; $N = 40$; $f(x) = \exp(-x^2)$;
- г) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $N = 40$; $f(x) = (1 + x)^{-1}$;
- д) $a = 2,0$; $b = 3,0$; $N = 40$; $f(x) = (1 + x^2)^{-1}$.

З а в д а н н я 2

Напишіть програму чисельного інтегрування функції. Використайте метод Чебишева.

Вхідні дані до програми :

a – нижня межа інтегрування;

b – верхня межа інтегрування;

$f(x)$ – підінтегральна функція;

N – кількість вузлів квадратурної формули.

Результат роботи програми – масив, що містить значення обчислених інтегралів.

Результати необхідно порівняти з аналітичними значеннями інтегралів.

Варіанти

- а) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $f(x) = 1 - 0,9x^3$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- б) $a = 0,0$; $b = 9,0$; $f(x) = x^2(1 + x)^{-1}$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- в) $a = 0,5$; $b = 1,9$; $f(x) = (2,3 + 0,7x)^{1/2}$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- г) $a = 0,0$; $b = 2,5$; $f(x) = (1,2 + 1,7x^2)^{-1/2}$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- д) $a = 0,0$; $b = 2,0$; $f(x) = -1,2 + x + x^2 + x^3$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$.

З а в д а н н я 3

Напишіть програму чисельного інтегрування функції. Використайте метод Гаусса.

Вхідні дані до програми :

a – нижня межа інтегрування;

b – верхня межа інтегрування;

$f(x)$ – підінтегральна функція;

N – кількість вузлів квадратурної формули.

Результат роботи програми – масив, що містить значення обчислених інтегралів.

Результати необхідно порівняти з аналітичними значеннями інтегралів, які отримані аналітично.

Варіанти

- а) $a = 1,1$; $b = 1,6$; $f(x) = x^2 \cdot \ln(x)$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- б) $a = 0,7$; $b = 1,2$; $f(x) = \cos(x) + 1$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- в) $a = 2,0$; $b = 3,5$; $f(x) = (x^2 - 1)^{1/2}$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- г) $a = 1,2$; $b = 2,4$; $f(x) = (0,5 + x^2)^{1/2}$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$;
- д) $a = 0,8$; $b = 1,6$; $f(x) = x \cdot (\ln(x) + 1)$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$.

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити:

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, який складається із вихідних даних і результатів чисельного інтегрування;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

5.15. Завдання для перевірки

- 1. У чому полягає суть методів чисельного інтегрування функцій?
- 2. Порівняти методи чисельного інтегрування за точністю на підставі залишкових членів квадратурних формул.
- 3. Проаналізуйте роботу квадратурних алгоритмів:
 - а) для сталої підінтегральної функції, $f(x) = \text{const}$;
 - б) підінтегральної функції лінійного вигляду.
- 4. Для підвищення точності чисельного інтегрування можливі два підходи. У першому з них збільшують кількість вузлів в обраній квадратурній формулі, в другому вхідний інтервал $[a, b]$ поділяється на сукупність підінтервалів, у кожному з яких використовують квадратурну формулу з фіксованою кількістю вузлів, а результати додають. Якому підходу надавати перевагу?
- 5. Запропонуйте та обґрунтуйте квадратурні алгоритми для розрахунку двократних інтегралів.
- 6. Розгляньте подвійний інтеграл

$$J(r) = \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy f(x, y)$$

з підінтегральною функцією (рис. 5.7)

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-r^2}} \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-r^2)} (x^2 - 2rxy + y^2) \right\}.$$

Припускаючи, що параметр r заданий ($-1 \leq r \leq 1$), розгляньте можливі алгоритми знаходження оцінки цього інтегралу. Дослідіть залежності від потрібної точності оцінки значення інтегралу.

Відповідь: $J(r) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2\pi} \arcsin r$.

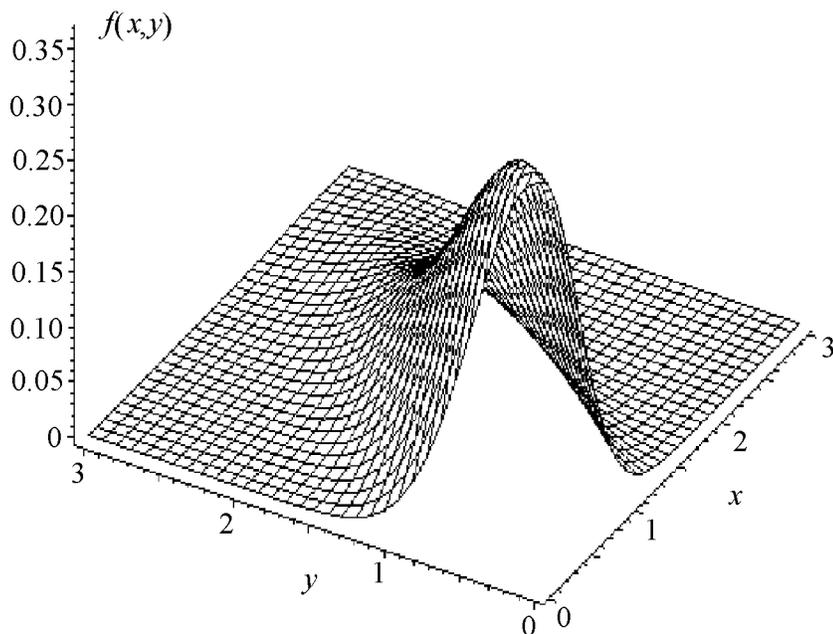


Рисунок 5.7 — Вигляд підінтегральної функції $f(x, y)$

7. Для обраного полінома другого степеня $P_2(x)$ перевірте справедливість формули (5.6).

8. Для обраного полінома третього степеня $P_3(x)$ перевірте справедливість формули (5.7).

9. Розгляньте приблизну формулу, що апроксимує алгоритм Гаусса для п'яти вузлів:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \{0,2572 [f(x_1) + f(x_5)] + 0,5 [f(x_2) + f(x_4)] + 0,4856 f(x_3)\},$$

де

$$x_1 = \frac{19a+b}{20}; x_2 = \frac{3a+b}{4}; x_3 = \frac{a+b}{2}; x_4 = \frac{a+3b}{4}; x_5 = \frac{a+19b}{20}.$$

Порівняйте точність цього алгоритма та алгоритма інтегрування Гаусса.

6. Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь

6.1. Основні теоретичні відомості

У багатьох практичних задачах доводиться мати справу з необхідністю розв'язування рівнянь, що містять похідні від функцій. Рівняння, в якому шукана функція міститься під знаком похідної, має назву *диференціального рівняння*. Розв'язати диференціальне рівняння – значить відшукати таку функцію, яка перетворить задане рівняння в тотожність. Існує багато прийомів для знаходження аналітичних розв'язків диференціальних рівнянь. Проте у більшості випадків використання класичних (аналітичних) методів є практично неможливим. Це зумовлює важливість чисельних методів для розв'язання диференціальних рівнянь, котрі є основою при побудові алгоритмів та програм.

Якщо невідома функція, що входить у диференціальне рівняння, залежить лише від однієї незалежної змінної, то таке диференціальне рівняння називається *звичайним*.

Розглянемо найпростіше звичайне диференціальне рівняння

$$y' = f(x, y) \quad (6.1)$$

із заданою правою частиною $f(x, y)$, яка у загальному випадку залежить від аргументу x та шуканої функції $y = y(x)$. Будь-яка функція, що задовольняє цьому рівнянню, має назву *загального розв'язку*.

Частинним розв'язком диференціального рівняння називається розв'язок, що може бути отриманий із загального при виконанні деякої умови. Хоча умови розв'язку можуть бути найрізноманітнішими, серед них найчастіше зустрічаються *початкові* та *межові*.

Головною задачею, що має відношення до диференціального рівняння (6.1), є *задача Коші* – знайти частинний розв'язок $y = y(x)$ цього рівняння, що задовольняє початковій умові $y(x_0) = y_0$.

Розв'язати диференціальне рівняння чисельним методом – означає знайти для заданої послідовності $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ та заданого значення y_0 такі значення $\{y_1, y_2, \dots, y_N\}$, що $y_n = y(x_n)$, де $n = 1, 2, \dots, N$.

Таким чином, чисельні методи замість знаходження аналітичної функції $y(x)$ дозволяють лише отримати таблицю значень цієї функції для заданої послідовності аргументів. Така послідовність має назву *аргументної сітки*. У випадку рівновіддалених аргументів стала відстань між сусідніми точками сітки має назву *сталого кроку інтегрування*. Таблиця результатів містить дані, що відрізняються від справжніх

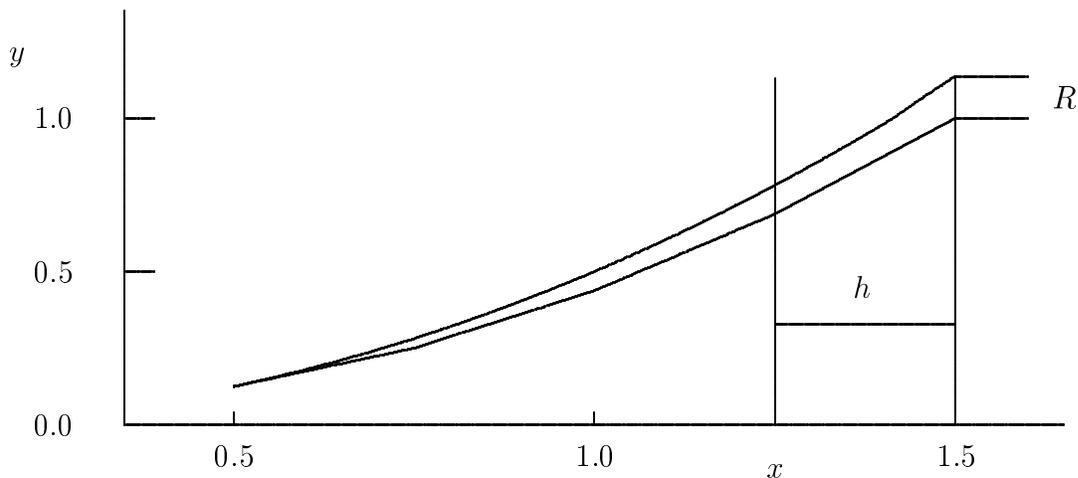


Рисунок 6.1 — Приклад розв’язання задачі Коші (кількість сталих кроків $N = 4$; плавна крива – точний розв’язок; ламана – результат ітераційного алгоритму)

(ідеальних). Різниця $|y(x_n) - y_n|$ між точним значенням функції у кожному з аргументних вузлів $0 \leq n \leq N$ та отриманими за чисельними методами значеннями має назву *похибки* R . Для зменшення похибки або вибирають більш прийнятний метод, або збільшують кількість вузлів N , тобто зменшують крок інтегрування h .

Найбільш поширені *ітераційні алгоритми* розв’язання задачі Коші на аргументному інтервалі $[a, b]$. У них згідно із заданою початковою умовою y_0 у точці $x_0 = a$ за допомогою рівняння (6.1) знаходять значення y_1 у наступній точці x_1 . За значенням y_1 у точці x_1 знаходять значення y_2 у точці x_2 і так далі, доки не будуть заповнені усі необхідні вузли (рис. 6.1) аж до точки $x_N = b$.

Розглянемо деякі з чисельних методів розв’язання задачі Коші.

6.2. Метод Ейлера

Хоча цей метод є порівняно грубим, покладені у його основу ідеї є початковими для ряду інших методів. Нехай задано диференціальне рівняння першого порядку

$$y' = f(x, y) \quad (6.2)$$

з початковою умовою

$$x = x_0, \quad y(x_0) = y_0. \quad (6.3)$$

Потрібно знайти розв’язок рівняння на відрізку $[a, b]$, де $a = x_0$.

Поділимо відрізок $[a, b]$ на N рівних частин і отримаємо послідовність

$$x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N,$$

де $h = (b - a) / N$ – сталий крок інтегрування, причому $x_0 = a$ та $x_N = b$.

Ітераційний алгоритм методу Ейлера такий:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (6.4)$$

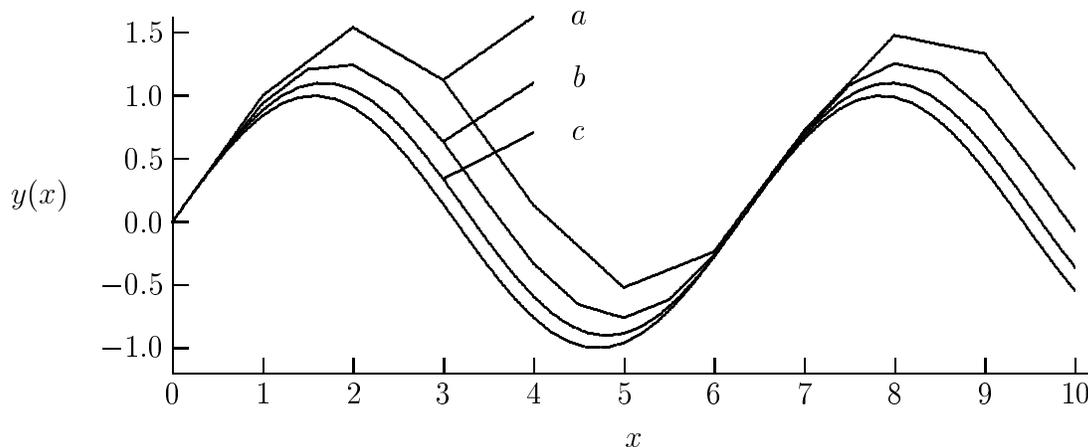


Рисунок 6.2 — До розв'язання методом Ейлера диференціального рівняння $y' = \cos(x)$ з початковою умовою $y(x_0) = 0,0$, $0 \leq x \leq 10$ та різною кількістю кроків N (плавна крива — аналітичний розв'язок $y(x) = \sin(x)$; $a - N = 10$, $b - N = 20$, $c - N = 50$)

Повторюючи цей процес, отримуємо таблицю значень $\{y\}$ розв'язків вхідного диференціального рівняння на сітці $[a, b]$.

Похибка R методу складає $O(h^2)$.

Метод Ейлера є *одноточковим*.

Незважаючи на те, що цей метод є порівняно грубим, його практичне застосування достатньо розповсюджене, бо потрібнує мало ресурсів. Його, зокрема, широко застосовують при побудові алгоритмів знаходження розв'язків диференціальних рівнянь у частинних похідних.

Приклад

Розглянемо диференціальне рівняння

$$y' = \cos(x), \quad y(x_0) = 0,0$$

на інтервалі $0 \leq x \leq 10$.

Потрібно знайти чисельний розв'язок цього рівняння з використанням описаного методу Ейлера та дослідити залежність від кількості кроків інтегрування N .

Розв'язання

Аналітичний розв'язок цього рівняння легко отримати: це функція $y(x) = \sin(x)$.

З метою порівняння роботи оберемо на інтервалі розв'язання відносно невелику кількість вузлів та відповідний крок інтегрування $h = 10/N$: а) $N = 10$, $h = 1,0$; б) $N = 20$, $h = 0,5$; в) $N = 50$, $h = 0,2$.

На рис. 6.2 наведені графічні залежності аналітичного розв'язку $y(x)$ та трьох чисельних. З рис. 6.2 можна бачити, що зі зростанням кількості кроків N (відповідно зі зменшенням величини кроку h) якість розв'язку поліпшується. Для більшої кількості вузлів N залежності на рис. 6.2 не наводяться, оскільки вони зливаються з графіком аналітичного розв'язку $y(x) = \sin(x)$.

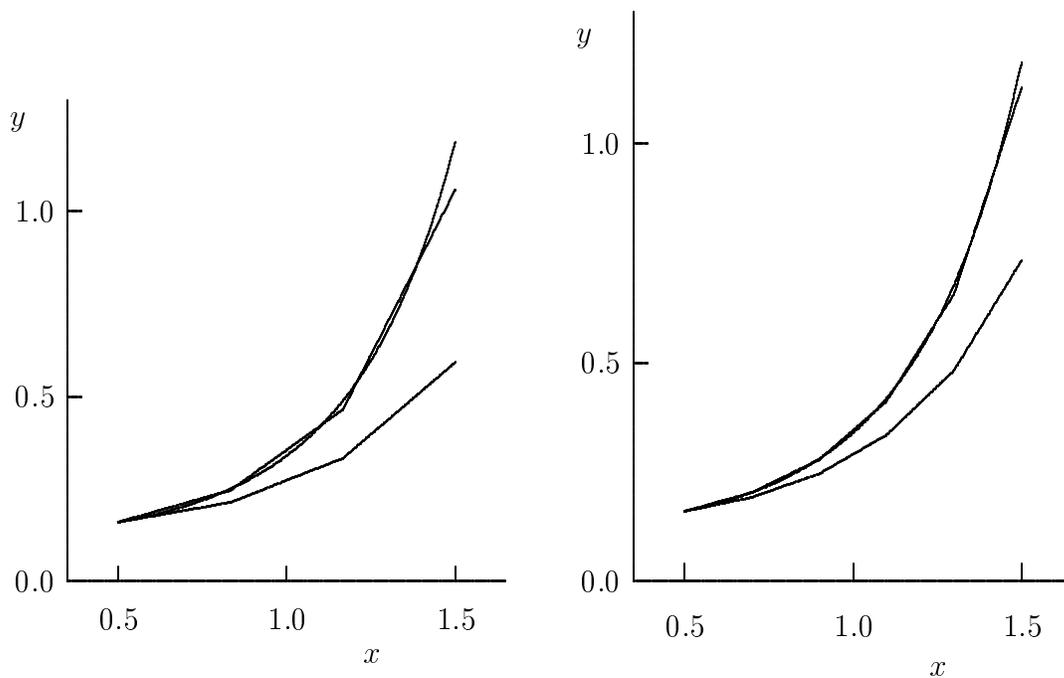


Рисунок 6.3 — Приклад чисельного інтегрування звичайного диференціального рівняння $y' = 2xy$ на інтервалі $[0,5; 1,5]$ з початковою умовою $y(0,5) = 0,16$ (кількість кроків дорівнює: ліворуч $N = 3$, праворуч $N = 5$; ламані: знизу — метод Ейлера, зверху — Ейлера–Коші; плавна крива — аналітичне рішення $y(x) = \exp(x^2)/8$)

6.3. Модифікований метод Ейлера

Цей метод ще часто називають *методом Ейлера-Коші*.

Часто використовують різні модифікації методу Ейлера. В одній з них кожний крок ітераційного алгоритму складається з двох операцій.

Спочатку знаходять

$$y_n^* = y_n + hf(x_n, y_n), \quad (6.5, a)$$

а потім

$$y_{n+1} = y_n + (h/2)[f(x_n, y_n) + f(x_n, y_n^*)]. \quad (6.5, b)$$

Цей метод двоточковий, оскільки на кожному кроці потрібно відшукувати значення правої частини рівняння $y' = f(x, y)$ у двох точках.

Похибка методу R залежить від величини кроку $h = (b - a)/N$ як $O(h^3)$.

Приклад застосування описаних двох методів наведений на рис. 6.3. Відносно точності алгоритму за порівняно невеликої кількості кроків ($N = 3$ та $N = 5$) можна робити висновок, якщо порівняти отримані чисельні результати з ходом аналітичного розв'язку. На практиці подібний розв'язок, як правило, відсутній.

Тому при практичній роботі з конкретним диференціальним рівнянням будують його аналог, що має аналітичний розв'язок. На моделі перевіряють алгоритм та вибирають його параметри, вивчають точність. Тільки після цього за допомогою чисельних методів знаходять розв'язок шуканого диференціального рівняння.

6.4. Метод Рунге-Кутти

Алгоритми, що належать до групи *методів Рунге-Кутти*, відрізняються один від одного обсягом обчислень та одержуваною при цьому точністю. Сутність цього методу полягає в тому, що перехід з одного аргументного вузла до наступного реалізується не одразу, а за допомогою обчислення значень у проміжних точках (аргументних вузлах), наприклад, двох, трьох або чотирьох.

Розглянемо схему методу Рунге-Кутти на прикладі *чотириточкового чисельного алгоритму*, що являє собою один з методів підвищеної точності. У рамках методу Рунге-Кутти чисельного розв'язку диференціального рівняння $y' = f(x, y)$ з початковою умовою $y(x_0) = y_0$ ітераційний алгоритм такий.

Спочатку для кожної пари поточних значень (x_n, y_n) визначають чотири допоміжні величини:

$$\begin{aligned} R_1 &= hf(x_n, y_n), \\ R_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + R_1/2), \\ R_3 &= hf(x_n + h/2, y_n + R_2/2), \\ R_4 &= hf(x_n + h, y_n + R_3), \end{aligned} \tag{6.6, a}$$

після чого знаходять

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4). \tag{6.6, b}$$

Похибка R методу Рунге-Кутти залежить від величини кроку h як $O(h^5)$.

Як правило, використовують сталу величину кроку h чисельного інтегрування. Однак можна побудувати варіант алгоритму, в якому крок h змінюється в процесі обчислень. В *адаптивних варіантах* алгоритму Рунге-Кутти величину кроку h можна змінювати у процесі обчислень. Це особливо зручно у тих випадках, коли шукана функція зазнає різких змін.

Розповсюджений *чотириточковий алгоритм Рунге-Кутти* і при розгляданні рівняння 2-го порядку

$$y'' = f(x, y, y') \tag{6.7}$$

з початковою умовою

$$y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y'_0. \tag{6.8}$$

При розв'язанні рівняння (6.7) спочатку для кожної трійки поточних значень (x_n, y_n, y'_n) визначають чотири допоміжні величини

$$\begin{aligned} R_1 &= hf(x_n, y_n, y'_n), \\ R_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_1, y'_n + \frac{1}{2}R_1\right), \\ R_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_2, y'_n + \frac{1}{2}R_2\right), \\ R_4 &= hf\left(x_n + h, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_3, y'_n + R_3\right), \end{aligned} \tag{6.9, a}$$

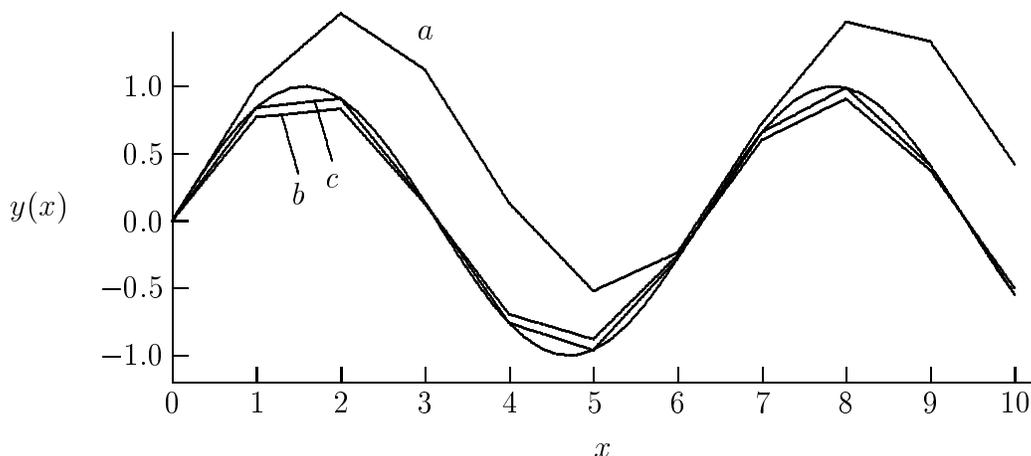


Рисунок 6.4 — До розв'язку диференціального рівняння $y' = \cos(x)$ з початковою умовою $y(x_0) = 0, 0 \leq x \leq 10, h = 1$. Плавна крива – аналітичний розв'язок $y(x) = \sin(x)$; $a - y_E(x)$, метод Ейлера; $b - y_{EC}(x)$, модифікований метод Ейлера-Коші; $c -$ розв'язок $y_{RK}(x)$ за методом Рунге-Кутти (практично збігається у вузлах з ідеальною кривою)

після чого знаходять

$$y_{n+1} = y_n + h \left[y'_n + \frac{1}{6} (R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4) \right], \quad (6.9, b)$$

$$y'_{n+1} = y'_n + \frac{1}{6} (R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4).$$

Похибка R цього варіанта методу Рунге-Кутти залежить від величини кроку h також як $O(h^5)$.

У практичних задачах чисельного аналізу метод Рунге-Кутти отримав широке застосування завдяки своїй відносній простоті та високій точності.

Приклад

Розглянемо диференціальне рівняння

$$y' = \cos(x), \quad y(x_0) = 0, 0$$

на інтервалі $0 \leq x \leq 10$.

Потрібно знайти його чисельний розв'язок з використанням трьох описаних алгоритмів: метода Ейлера, модифікованого метода Ейлера-Коші та метода Рунге-Кутти.

Розв'язання

Аналітичний розв'язок цього рівняння легко отримати, це функція $y(x) = \sin(x)$.

З метою порівняння роботи методів оберемо на інтервалі розв'язання відносно невелику кількість вузлів $N = 10$, тоді крок інтегрування буде дорівнювати $h = 1$. При виконанні чисельних розрахунків використаємо алгоритми, що відповідають формулам:

(6.4) – метод Ейлера,

(6.5) – модифікований метод Ейлера-Коші,

(6.6) – метод Рунге-Кутти.

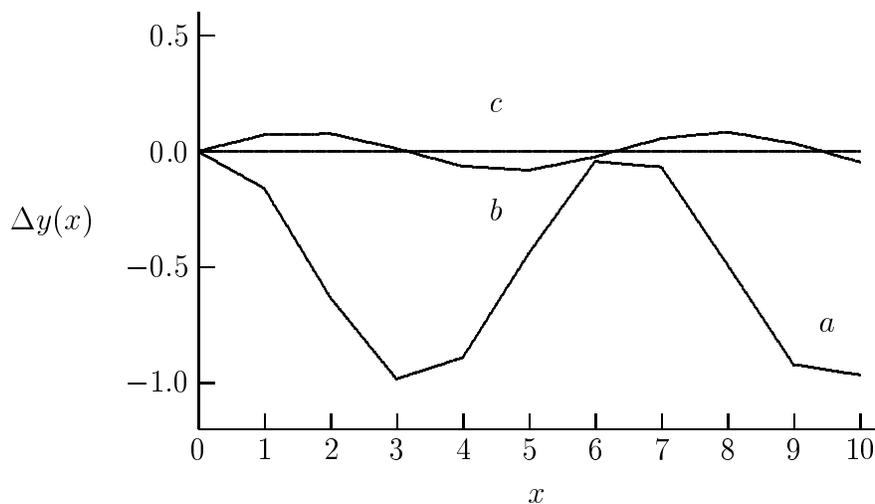


Рисунок 6.5 — Похибки $\Delta y(x)$ чисельних розв'язків диференціального рівняння $y' = \cos(x)$ з початковою умовою $y(x_0) = 0,0$, $0 \leq x \leq 10$, $h = 1$ ($a - y_E(x)$ – метод Ейлера; $b - y_{EC}(x)$ – модифікований метод Ейлера-Коші; $c - y_{RK}(x)$ – метод Рунге-Кутти)

На рис. 6.4 наведені графічні залежності для аналітичного розв'язку $y(x)$ та трьох чисельних:

$y_E(x)$ – метод Ейлера,

$y_{EC}(x)$ – модифікований метод Ейлера-Коші.

З рисунка видно, що розв'язок $y_{RK}(x)$ за методом Рунге-Кутти у вузлах практично збігається з ходом на графіку ідеальної залежності $y(x) = \sin(x)$.

Таблиця 6.1 — Похибки розв'язків диференціального рівняння

x_n	$y(x) - y_E(x)$	$y(x) - y_{EC}(x)$	$y(x) - y_{RK}(x)$
0,0000	0,0000	0,0000	0,000000
1,0000	-0,1585	0,0713	-0,000301
2,0000	-0,6310	0,0771	-0,000325
3,0000	-0,9830	0,0120	-0,000050
4,0000	-0,8910	-0,0641	0,000271
5,0000	-0,4394	-0,0813	0,000343
6,0000	-0,0436	-0,0237	0,000100
7,0000	-0,0674	0,0557	-0,000235
8,0000	-0,4889	0,0839	-0,000354
9,0000	-0,9206	0,0349	-0,000147
10,0000	-0,9656	-0,0461	0,000195

Значення похибок $\Delta y(x)$ розв'язків диференціального рівняння, що виникають у ході використання інтегруючого алгоритму, наведені в табл. 6.1. Також значення похибок можна бачити на рис. 6.5.

Отримані чисельні дані вказують на відносно більшу ефективність використання алгоритму Рунге-Кутти.

6.5. Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь з автоматичною зміною кроку

Якщо розв'язок диференціального рівняння (6.2) з умовою (6.3) потрібно розв'язати з високою точністю, то використовують алгоритми з автоматичною зміною кроку інтегрування. За високої точності й типу розв'язання у вигляді кривих з крутістю, що значно розрізняється, автоматична зміна кроку забезпечує зменшення загальної кількості кроків, різко зменшує можливість виникнення чисельної нестійкості, дає більш рівномірне розміщення точок на кривій.

Метод Рунг-Кутти з автоматичною зміною кроку полягає в тому, що після отримання значення y_{n+1} з початковим кроком h усі обчислення виконуються ще раз з кроком $h/2$. Отриманий результат y_{n+1}^* порівнюється з попереднім y_{n+1} . Якщо $|y_{n+1}^* - y_{n+1}| < \varepsilon$, де ε – похибка, що припускається, обчислення продовжують з кроком h ; у протилежному випадку величину кроку зменшують. Якщо вказана нерівність є занадто сильною, величину кроку збільшують.

Метод Рунге-Кутти-Мерсона з автоматичною зміною кроку забезпечує наближену оцінку похибки на кожному кроці інтегрування. Похибка інтегрування має порядок $O(h^5)$.

Цей метод реалізується таким алгоритмом:

1. Задають рівняння $y' = f(x, y)$, початкову умову $y(x_0) = y_0$, допустиму похибку ε та початковий крок інтегрування h .

2. Обчислюють допоміжні коефіцієнти:

$$\begin{aligned} K_0 &= hf(x_n, y_n), \\ K_1 &= hf\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{1}{3}K_0\right), \\ K_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{1}{6}K_0 + \frac{1}{6}K_1\right), \\ K_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{8}K_0 + \frac{3}{8}K_2\right), \\ K_4 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}K_0 - \frac{3}{2}K_2 + 2K_3\right). \end{aligned} \tag{6.10, a}$$

3. Знаходять приріст

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(K_0 + 4K_3 + K_4) \tag{6.10, b}$$

і похибку

$$R_{n+1} = \frac{1}{30}(-2K_0 + 9K_2 - 8K_3 + 4K_4). \tag{6.10, c}$$

4. Перевіряють виконання умов

$$|R_{n+1}| \leq \varepsilon, \quad |R_{n+1}| \geq \varepsilon/30. \tag{6.10, d}$$

Якщо перша умова (6.10d) не виконується, ділять крок h на 2 і повторюють обчислення з п. 2, відновивши початкові значення y_n . Якщо обидві умови (6.10d) виконуються, значення y_{n+1} виводять на друк. Якщо друга умова (6.10d) не виконується, крок h збільшують удвічі і обчислення знову повторюються з п. 2.

Метод Рунге-Кутти-Фельберга з автоматичною зміною кроку дає більш точну оцінку похибки на кожному кроці чисельного інтегрування і реалізується послідовним обчисленням за такими формулами.

1. Обчислюють допоміжні коефіцієнти:

$$\begin{aligned} K_0 &= hf(x_n, y_n), \\ K_1 &= hf\left(x_n + \frac{2}{9}h, y_n + \frac{2}{9}K_0\right), \\ K_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{12}K_0 + \frac{1}{4}K_1\right), \\ K_3 &= hf\left(x_n + \frac{3}{4}h, y_n + \frac{69}{128}K_0 - \frac{143}{128}K_1 + \frac{135}{64}K_2\right), \\ K_4 &= hf\left(x_n + h, y_n - \frac{17}{12}K_0 + \frac{27}{4}K_1 - \frac{27}{5}K_2 + \frac{16}{15}K_3\right), \\ K_5 &= hf\left(x_n + \frac{5}{6}h, y_n + \frac{65}{432}K_0 - \frac{5}{16}K_1 + \frac{13}{16}K_2 + \frac{4}{27}K_3 + \frac{5}{144}K_4\right). \end{aligned} \quad (6.11, a)$$

2. Знаходять прирощування

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{9}K_0 + \frac{9}{20}K_2 + \frac{16}{45}K_3 + \frac{1}{12}K_4 \quad (6.11, b)$$

і похибку

$$R_{n+1} = \frac{1}{150}K_0 - \frac{3}{300}K_2 + \frac{16}{75}K_3 + \frac{1}{20}K_4 - \frac{6}{25}K_5. \quad (6.11, c)$$

Якщо $|R_{n+1}| > \varepsilon$, крок h зменшується вдвічі. Якщо $|R_{n+1}| < \varepsilon/20$, крок h збільшується вдвічі.

Цей метод має похибку інтегрування порядку $O(h^5)$.

6.6. Розв'язування систем звичайних диференціальних рівнянь

Нехай задані $Y = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_M(x))$ – набір з M функцій, що залежать від аргументу x , та $F = (x, f_1, f_2, \dots, f_M)$ – набір з M функцій, що залежать від x та Y кожна.

Розглянемо таку систему звичайних диференціальних рівнянь:

$$Y'(x) = F(x, Y) \quad (6.12)$$

з початковою умовою $Y(x_0) = Y_0$.

Методи знаходження розв'язку системи диференціальних рівнянь будуються аналогічно тому, як це робилося у скалярному випадку, але з урахуванням вимірності M розглядуваної системи.

Нижче розглянемо випадок $M = 2$, коли система утворена двома рівняннями відносно функцій $y(x)$ та $z(x)$ з функціями $f(x, y, z)$ та $g(x, y, z)$ у правій частині рівнянь:

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y, z), & y(x_0) &= y_0, \\ z'(x) &= g(x, y, z), & z(x_0) &= z_0. \end{aligned} \quad (6.13)$$

А. Ітераційний алгоритм за методом Ейлера

На черговому n -му кроці обчислюють такі величини:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n, z_n), \\ z_{n+1} &= z_n + hg(x_n, y_n, z_n). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Б. Ітераційний алгоритм за методом Ейлера-Коші

Спочатку на n -му кроці обчислюють такі допоміжні величини:

$$\begin{aligned} y_n^* &= y_n + hf(x_n, y_n, z_n), \\ z_n^* &= z_n + hg(x_n, y_n, z_n), \end{aligned} \quad (6.15, a)$$

після чого знаходять значення y_{n+1} та z_{n+1} на наступному $(n + 1)$ -му кроці:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + (h/2)[f(x_n, y_n, z_n) + f(x_n, y_n^*, z_n^*)], \\ z_{n+1} &= z_n + (h/2)[g(x_n, y_n, z_n) + g(x_n, y_n^*, z_n^*)]. \end{aligned} \quad (6.15, b)$$

В. Ітераційний алгоритм за методом Рунге-Кутти

Спочатку на n -му кроці обчислюють такі допоміжні величини:

$$\begin{aligned} r_1 &= hf(x_n, y_n, z_n), & q_1 &= hg(x_n, y_n, z_n), \\ r_2 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_1, z_n + \frac{1}{2}q_1), & q_2 &= hg(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_1, z_n + \frac{1}{2}q_1), \\ r_3 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_2, z_n + \frac{1}{2}q_2), & q_3 &= hg(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_2, z_n + \frac{1}{2}q_2), \\ r_4 &= hf(x_n + h, y_n + r_3, z_n + q_3), & q_4 &= hg(x_n + h, y_n + r_3, z_n + q_3), \end{aligned} \quad (6.16, a)$$

після чого знаходять значення функцій y та z на наступному $(n + 1)$ -му кроці:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + (r_1 + 2r_2 + 2r_3 + r_4) / 6, \\ z_{n+1} &= z_n + (q_1 + 2q_2 + 2q_3 + q_4) / 6. \end{aligned} \quad (6.16, b)$$

Аналогічно будують алгоритми для розв'язання систем диференціальних рівнянь, що містять три і більше шуканих функцій.

У перерахованих методах нелегко здійснити прямий контроль якості обчислень, оскільки потрібна функція $y(x)$ не є відомою. Тому застосовують побічний контроль точності чисельного інтегрування диференціального рівняння шляхом порівняння в

усіх аргументних точках результатів розрахунку, одержаних при значеннях кроку h та $h/2$. До того ж величина кроку обирається такою, щоб похибка не перевищувала припустимої величини, у протилежному випадку крок зменшують.

У всіх випадках робочий алгоритм *перевіряють на тестовому прикладі*. Він обирається таким, що забезпечує можливість передати головні властивості функції, що досліджується. Цей алгоритм тестового прикладу повинен містити аналітичний розв'язок та можливість здійснювати повний поточний контроль.

Корисним є застосування *інваріантів задачі*, тобто величин, значення яких залишаються незмінними на інтервалі розв'язання.

Приклад

Розглянемо на інтервалі $(0 \leq t \leq 30)$ диференціальне рівняння другого порядку, що описує часову еволюцію згасаючого осцилятора

$$\frac{d^2}{dt^2} \eta(t) + 2\beta \frac{d}{dt} \eta(t) + \omega^2 \eta(t) = 0$$

з початковими умовами

$$\eta(0) = 0, \quad \eta'(0) = 1.$$

Для параметрів – декремента β та частоти коливань ω оберемо значення $\beta = 0, 2$ та $\omega = 1, 0$.

Аналітичний розв'язок рівняння, що розглядається, такий:

$$\eta(t) = \frac{1}{\sqrt{\omega^2 - \beta^2}} \exp(-\beta t) \sin(\sqrt{\omega^2 - \beta^2} t).$$

Для чисельного розв'язання рівняння еволюції осцилятора скористаємося алгоритмом (6.16).

Введемо позначення:

$$y(t) = \eta(t), \quad z(t) = \eta'(t);$$

при цьому $y(0) = 0, z(0) = 1$.

У нових позначеннях запишемо систему двох рівнянь

$$\begin{cases} dy(t)/dt = z(t), \\ dz(t)/dt = -2\beta z(t) - \omega^2 y(t). \end{cases}$$

Розіб'ємо аргументний інтервал $[0, 30]$ на $N = 300$ кроків розміром $h = 0,1$ кожний. Користуючись алгоритмом (6.16), побудуємо обчислювальну процедуру.

У задачі, що розглядається, не вдається побудувати часовий інваріант. Однак узагальнена енергія коливань осцилятора

$$W(t) = (z(t) + \beta y(t))^2 + \Omega^2 y^2(t)$$

знає експоненціального згасання, тому повинна бути незмінною величина

$$E = [(z(t) + \beta y(t))^2 + \Omega^2 y^2(t)] \exp(2\beta t).$$

З початкових умов маємо $E(t = 0) = (z(0) + \beta y(0))^2 + \Omega^2 y^2(0) = 1$.

У результаті розрахунків отримаємо $E(t = 30) = 0,9999958$, що за обраної величини кроку інтегрування $h = 0,1$ є достатнім.

Результати обчислень зображені на рис. 6.6, 6.7 та 6.8.

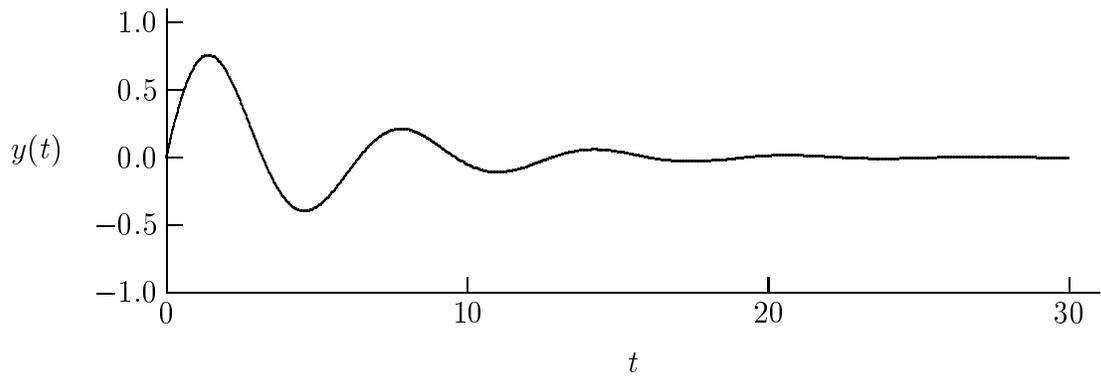


Рисунок 6.6 — Згасаючий осцилятор. Залежність $y(t)$

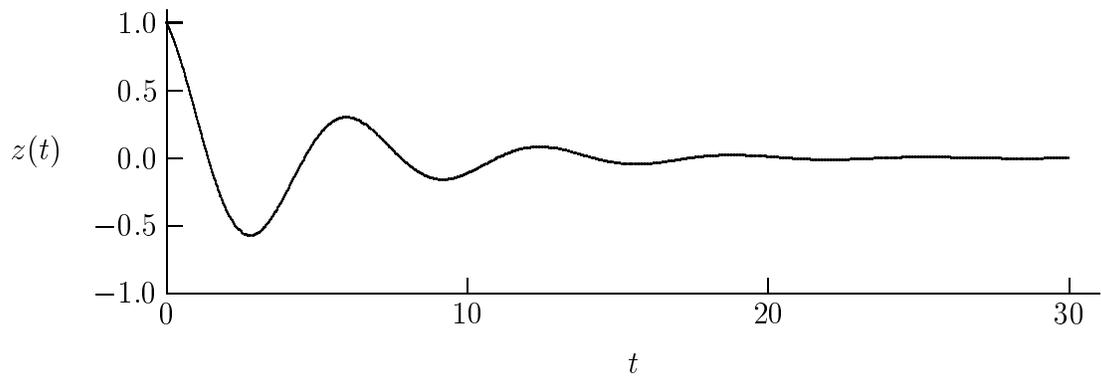


Рисунок 6.7 — Згасаючий осцилятор. Залежність $z(t)$

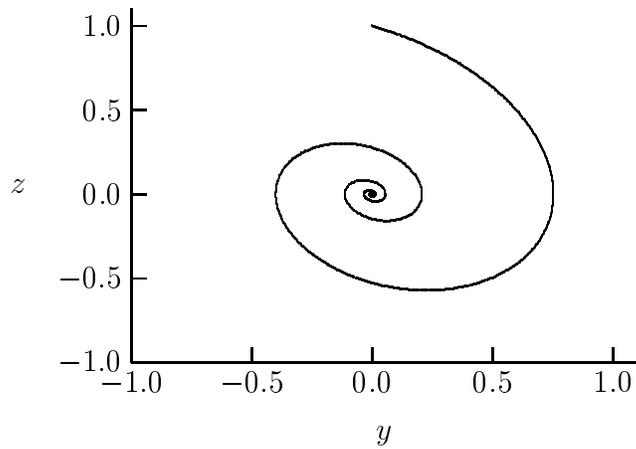


Рисунок 6.8 — Фазовий портрет параметричних залежностей $y(t)$ та $z(t)$ згасаючого осцилятора

6.7. Розв'язування звичайних диференціальних рівнянь другого та вищих порядків

При побудові чисельних алгоритмів розв'язання диференціальних рівнянь, в яких містяться другі чи більш високі похідні шуканої функції, використовується *метод зниження порядку диференціювання*.

Розглянемо цей метод на прикладі, коли в диференціальному рівнянні старшою похідною є похідна другого порядку

$$y'' = f(x, y, y') \quad (6.17)$$

з початковими умовами $y(x_0) = y_0$ та $y'(x_0) = y'_0$.

Введемо змінну $z = z(x)$ таку, що $y' = z$. Тоді рівнянню (6.17) буде еквівалентна така система диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} y'(x) = g(x, y, z), & y(x_0) = y_0, \\ z'(x) = f(x, y, z), & z(x_0) = z_0, \end{cases} \quad (6.18)$$

у якій $g(x, y, z) = z$.

Побудована система утворена вже з двох рівнянь першого порядку кожне. Число виниклих рівнянь збігається з порядком вхідного диференціального рівняння.

Аналогічно можна перетворити і диференціальне рівняння заданого порядку M вигляду $y^{(M)} = f(y, y', y'', \dots, y^{(M-1)})$ з M початковими умовами. Крім наявної функції y вводять ще набір з $(M - 1)$ функцій z_1, z_2, \dots, z_{M-1} таких, що $y' = z_1, z'_1 = z_2, \dots, z'_{M-2} = z_{M-1}$. Тоді разом з вхідним рівнянням одержують систему рівнянь першого порядку

$$\begin{cases} y'(x) = z_1, \\ z'_1(x) = z_2, \\ z'_2(x) = z_3, \\ \dots \dots \dots \\ z'_{M-2}(x) = z_{M-1}, \\ z'_{M-1}(x) = f(x, y, z_1, z_2, \dots, z_{M-1}), \end{cases} \quad (6.19)$$

при цьому початкові умови до нових функцій z_1, z_2, \dots, z_{M-1} повинні відповідати заданим початковим умовам до похідних вхідної функції $y(x)$.

Якщо тепер ввести M -компонентну вектор-функцію

$$Y = (y, z_1, z_2, \dots, z_{M-1}) \quad (6.20)$$

та позначити через вектор-функцію $F(x, Y)$ вирази, розташовані у правих частинах системи (6.19), то можна записати

$$Y' = F(x, Y). \quad (6.21)$$

Цю систему разом з початковими умовами до неї вже можна розв'язати чисельними методами, що описані вище, якщо в алгоритмах (6.4), (6.5), (6.6) скрізь замінити $y(x)$ та $f(x, y)$ на $Y(x)$ та $F(x, Y)$ відповідно.

Приклад

Розглянемо на інтервалі $(0 \leq t \leq 40)$ систему з двох диференціальних рівнянь другого порядку кожне, що використовується в теорії поля,

$$\begin{cases} d^2 y(t)/dt^2 = -y(t) z^2(t), \\ d^2 z(t)/dt^2 = -2y^2(t) z(t) - z^3(t) \end{cases}$$

з початковими умовами

$$y_0 = 0, 0; \quad z_0 = 0, 0; \quad z'_0 = 1, 0,$$

а початкову умову y'_0 задамо нижче.

Для чисельного розв'язання цієї системи рівнянь скористаємося алгоритмом (6.19). Введемо позначення:

$$y_1(t) = y(t), \quad y_2(t) = \frac{d}{dt} y(t), \quad y_3(t) = z(t), \quad y_4(t) = \frac{d}{dt} z(t).$$

У нових позначеннях запишемо систему чотирьох рівнянь:

$$\begin{cases} d y_1(t)/dt = y_2(t), \\ d y_2(t)/dt = -y_1(t) y_3^2(t), \\ d y_3(t)/dt = y_4(t), \\ d y_4(t)/dt = -2y_1^2(t) y_3(t) - y_3^3(t) \end{cases}$$

з початковими умовами:

$$\begin{aligned} y_1(0) = y_0 = 0, 0, & \quad y_2(0) = y'_0, \\ y_3(0) = z_0 = 0, 0, & \quad y_4(0) = z'_0 = 1, 0. \end{aligned}$$

Розіб'ємо аргументний інтервал $[0, 40]$ на $N = 160000$ кроків та оберемо при цьому величину кроку рівною $h = 40/160000 = 2,5 \cdot 10^{-4}$. Скористаємося алгоритмом (19), в якому кількість рівнянь буде $M = 4$. Тепер побудуємо обчислювальну процедуру.

У задачі, що розглядається, вдається побудувати часовий інваріант

$$W = \frac{1}{2} (y_2^2 + y_4^2) + y_1^2 y_3^2 + \frac{1}{2} y_3^4,$$

значення якого необхідно використати для контролю. З початкових умов маємо

$$W = \frac{1}{2} (y'^2(t) + z'^2(t)) = \frac{1}{2} (y_0'^2 + z_0'^2).$$

Результати обчислень зображені на рис. 6.9 для випадку $y'_0 = -0,1$ та на рис. 6.10 для випадку $y'_0 = 0,1$.

З цих рисунків видно, що відносно невелика зміна одної початкової умови в системі рівнянь приводить до помітної зміни вигляду розв'язку в цілому.

Чисельні ефекти такого типу прийнято називати *нестійкістю за Адамаром*.

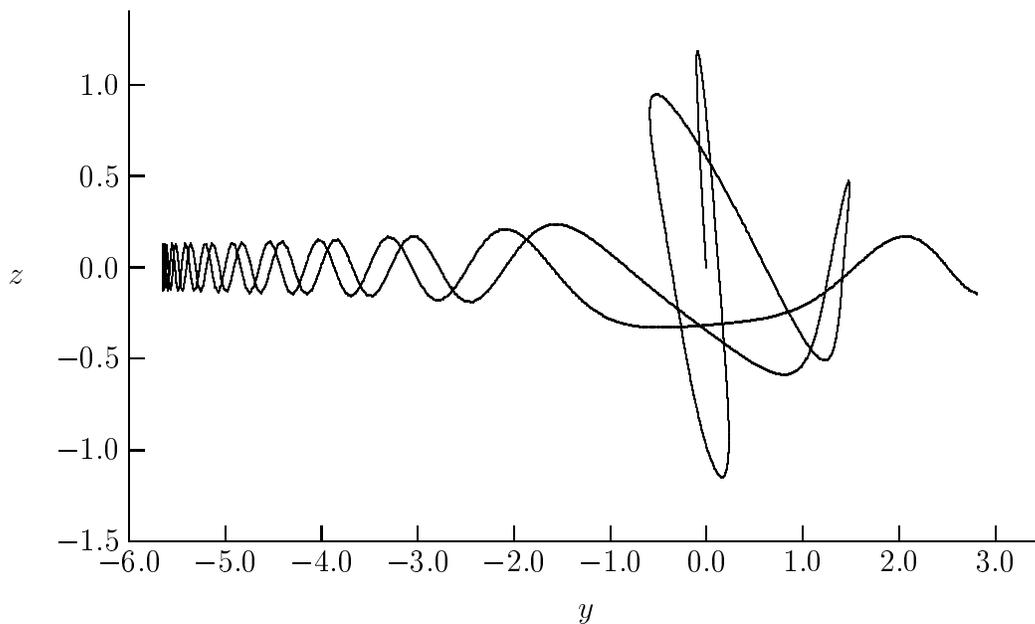


Рисунок 6.9 — Фазовий портрет компонент $y(t)$ та $z(t)$ системи (аргументний інтервал $0 \leq t \leq 40$, крок інтегрування $h = 2,5 \cdot 10^{-4}$; початкові значення: $y_0 = 0,0$; $z_0 = 0,0$; $y'_0 = -0,1$; $z'_0 = 1,0$)

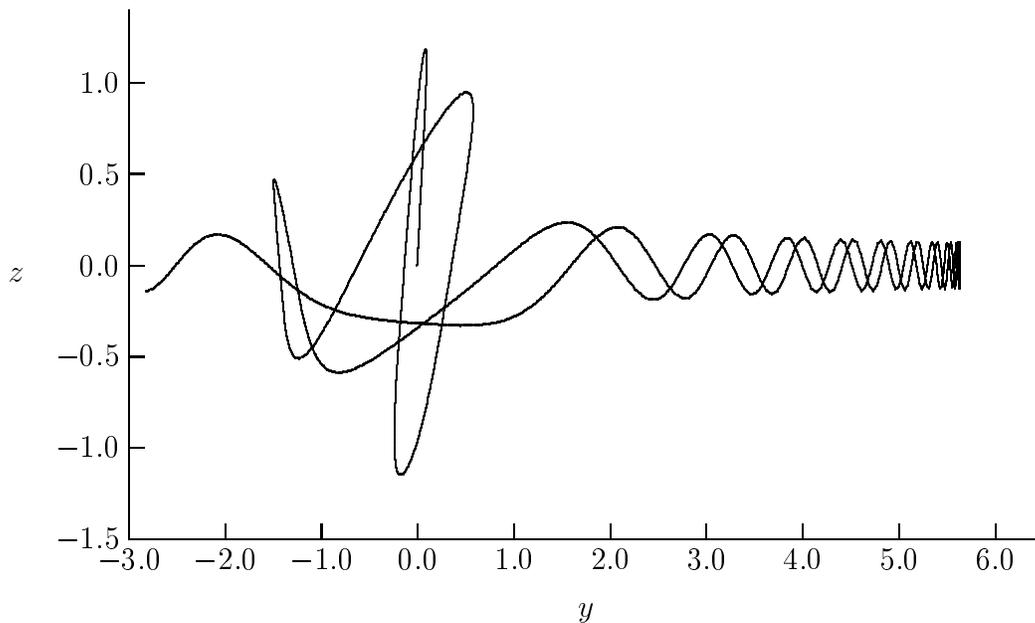


Рисунок 6.10 — Фазовий портрет компонент $y(t)$ та $z(t)$ системи (аргументний інтервал $0 \leq t \leq 40$, крок інтегрування $h = 2,5 \cdot 10^{-4}$; початкові значення: $y_0 = 0$; $z_0 = 0$; $y'_0 = 0,1$; $z'_0 = 1,0$)

6.8. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на чотири години і містить два завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму чисельного інтегрування звичайного диференціального рівняння з початковою умовою

$$y' = f(x, y); \quad y_0 = y(x_0)$$

однією з алгоричних мов.

Програма повинна містити три алгоритми знаходження розв'язку, що засновані на формулах методу Ейлера (6.4), модифікованій формулі Ейлера (6.5) та формулі методу Рунге–Кутти (6.6).

Вхідні дані до програми :

a – початок аргументного відрізка знаходження розв'язку, $x_0 = a$;

b – кінець аргументного відрізка знаходження розв'язку;

y_0 – початкове значення шуканої функції, $y_0 = y(x_0)$;

$f(x, y)$ – функція, що задана у правій частині рівняння;

M – кількість кроків табулювання функції $y(x)$ на відріжку $[a, b]$.

Результат роботи програми – масиви з M елементів, що містять значення шуканої функції $y(x)$ на відріжку $[a, b]$, та розв'язок диференціального рівняння, знайдений аналітично (з можливістю їх порівняння).

Варіанти

а) $a = 0,0$; $b = 2,0$; $M = 21$; $y' = -xy$; $y_0 = 1,0$;

б) $a = 0,0$; $b = 2,0$; $M = 21$; $y' = y + x$; $y_0 = \ln(2)$;

в) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $M = 21$; $y' = (3x - 12x^2)y$; $y_0 = 0,5$;

г) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $M = 21$; $y' = 2x \exp(-x^2)$; $y_0 = 1,0$;

д) $a = 0,0$; $b = 2,0$; $M = 21$; $y' = (1 + x^2)^{-1}$; $y_0 = 0,0$.

З а в д а н н я 2

Напишіть програму чисельного інтегрування системи з двох звичайних диференціальних рівнянь

$$Y' = F(x, Y); \quad Y_0 = Y(x_0)$$

однією з алгоричних мов.

Програма повинна містити два алгоритми знаходження розв'язку, що засновані на формулах методу Ейлера (6.4), модифікованій формулі Ейлера (6.5) та формулі методу Рунге–Кутти (6.6).

Вхідні дані до програми :

a – початок аргументного відрізка знаходження розв'язку, $x_0 = a$;

b – кінець аргументного відрізка знаходження розв'язку;

Y_0 – вектор початкових значень шуканих функцій, $Y_0 = Y(x_0)$;

$F(x, Y)$ – векторна функція, що задана у правій частині системи диференціальних рівнянь;

M – кількість кроків табулювання набору шуканих функцій на відрізку інтегрування $[a, b]$.

Результатом роботи програми є масиви з M елементів, що містять значення набору шуканих функцій $Y(x)$ на відрізку $[a, b]$ (з можливістю їх порівняння).

Варіанти

а) $a = 0,0, \quad b = 1,0, \quad M = 21,$

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 1,0, \\ z' = 1 - y + \exp(x), & z_0 = 1,0; \end{cases}$$

б) $a = 1,0, \quad b = 2,0, \quad M = 21,$

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 2,0, \\ z' = (y/x - 2,5z)/x, & z_0 = 3,5; \end{cases}$$

в) $a = 0,0, \quad b = 1,0, \quad M = 21,$

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 1,0, \\ z' = 2 - x + x^2 - y, & z_0 = 0,0; \end{cases}$$

г) $a = 0,0, \quad b = \pi, \quad M = 21,$

$$\begin{cases} y' = z + x + 1 + \sin(x), & y_0 = 0,1, \\ z' = x - y + 1 + \sin(x), & z_0 = 0,1; \end{cases}$$

д) $a = 0,0, \quad b = \pi, \quad M = 21,$

$$\begin{cases} y' = z + \sin(x) + \cos(x), & y_0 = 1,0, \\ z' = -y + \sin(x) - \cos(x), & z_0 = 0,0. \end{cases}$$

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити:

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, який містить таблицю вихідних даних в вузлах і таблицю результатів чисельного інтегрування заданого диференціального рівняння;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

6.9. Завдання для перевірки

1. У чому полягає суть методів чисельного інтегрування звичайних диференціальних рівнянь?
2. Здійсніть порівняння методів чисельного інтегрування звичайних диференціальних рівнянь щодо точності.
3. Проаналізуйте роботу алгоритмів знаходження розв'язку звичайного диференціального рівняння з початковими умовами у таких випадках: а) сталої правої частини, $f(x, y) = \text{const}$; б) правої частини, що дорівнює нулю.
4. Запропонуйте та обґрунтуйте чисельні алгоритми для знаходження розв'язку звичайного диференціального рівняння: а) другого порядку; б) третього порядку.
5. Для випадку звичайного диференціального рівняння з початковою умовою вивчіть залежність досягнутої на кінці аргументного інтервалу точності від величини кроку інтегрування у методі: а) Ейлера; б) Ейлера-Коші; в) Рунге-Кутти.
Запропонуйте схему чисельного експерименту для вивчення цієї залежності.
6. Складіть блок-схему алгоритму чисельного інтегрування диференціального рівняння за методом: а) Ейлера; б) Ейлера-Коші; в) Рунге-Кутти.
7. Побудуйте узагальнення алгоритму розв'язання системи диференціальних рівнянь (6.6)–(6.7) для $M = 2$ на випадок:
 - а) системи з трьох диференціальних рівнянь;
 - б) системи з чотирьох диференціальних рівнянь.
8. Запропонуйте варіант алгоритму розв'язання звичайного диференціального рівняння зі змінною величиною кроку. Зазначте приклади задач, для розв'язання яких подібний алгоритм є корисним.
9. Розгляньте "погіршений" варіант алгоритму розв'язання звичайного диференціального рівняння, у якому на кожному кроці вноситься деяка задана завада з відомими властивостями. Запропонуйте варіант алгоритму, що дозволяє при пошуці чисельного розв'язку послабити вплив завад.
10. Побудуйте варіант модифікованого методу Ейлера-Коші, який відрізняється від алгоритму (6.5).

7. Метод Монте-Карло

7.1. Основні теоретичні відомості

Чисельний метод розв'язування обчислювальних та імітаційних задач, який заснований на моделюванні випадкових величин або процесів і наступній побудові статистичних оцінок для цих величин, називається *методом статистичних дослідів*, або *методом Монте-Карло*.

7.2. Побудова методу Монте-Карло

Загальну схему методу Монте-Карло можна розглянути на прикладі побудови оцінки деякого (у загальному випадку багатократного) інтегралу по області G з підінтегральною функцією $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$

$$I_K = \underbrace{\int \dots \int}_{K \text{ разів}} f(x_1, x_2, \dots, x_K) dP(x_1, x_2, \dots, x_K). \quad (7.1)$$

Розглянемо наступне *вибіркове (емпіричне) середнє* від цієї функції $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$ (тут і далі значком-головкою "^^" вказується, що йдеться про *вибіркову оцінку* \hat{Z} розглядуваної величини Z)

$$\hat{f}_{\text{ср}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n)) \quad (7.2)$$

відносно вибірки з N реалізацій $\{x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n); n = 1, \dots, N\}$ K -вимірної випадкової величини (x_1, x_2, \dots, x_K) з відомою функцією розподілу $P(x_1, x_2, \dots, x_K)$, що характеризується диференціалом

$$dP(x_1, x_2, \dots, x_K) = p(x_1, x_2, \dots, x_K) dx_1 dx_2 \dots dx_K. \quad (7.3)$$

Кількість чисельних реалізацій N називається *обсягом вибірки*, а послідовність $\{f(x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n))\}$, $n = 1, 2, \dots, N$ утворює *вибіркову сукупність*.

Позначимо через вектор X K -вимірний аргумент $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ і через G довільну (задану) область інтегрування $X \in G$. Тоді в компактній формі запису формула (7.1) визначає багатократний інтеграл по цій області

$$I_K = \underbrace{\int \dots \int}_{K \text{ разів}} f(X) p(X) d^K X \quad (7.4)$$

від підінтегральної функції $f(X)$ з деякою ваговою функцією $p(X)$.

Загальна схема методу Монте-Карло при цьому вказує спосіб обчислення такого роду інтегралів (7.4) за допомогою знаходження вибіркового (емпіричного) середнього $\hat{f}_{\text{ср}}$ функції $f(X)$ за її N вибілковими значеннями:

$$\hat{f}_{\text{ср}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n). \quad (7.5)$$

В основі обчислення оцінки \hat{I}_K інтегралу (7.4) по вибілковим середнім (7.5) знаходиться просте наближення

$$\hat{I}_K = \hat{f}_{\text{ср}} V_K, \quad (7.6)$$

де V_K – обмежена область інтегрування у просторі вимірності K .

Значення $\hat{f}_{\text{ср}}$ в (7.6) обчислюються згідно з формулою (7.5) для N випадкових значень векторного аргументу $\{X_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N$, які є реалізацією (вибіркою) випадкової величини (вектору X) з густиною розподілу ймовірностей $p(X)$, що визначається ваговою функцією в інтегралі (7.4). При цьому припускається, що підінтегральна функція неперервна в області інтегрування, а вагова функція $p(X)$ має властивості густини розподілу ймовірностей певної випадкової величини X , тобто

$$p(X) \geq 0, \quad \forall X \in G, \quad \underbrace{\int \dots \int}_K p(X) d^K X = 1. \quad (7.7)$$

Співвідношення (7.5), (7.6) і складають обчислювальну схему методу Монте-Карло. Для її реалізації, передусім, вимагається *датчик випадкових чисел*, за допомогою якого одержують вибірки $\{X_n\}$, де $n = 1, \dots, N$, випадкових чисел (векторів) X , розподілених у відповідності з (7.7). Моделювання випадкових величин із заданим розподілом $p(X)$, як правило, здійснюється перетворенням одного або декількох незалежних значень стандартної випадкової величини, розподіленої в інтервалі $[0; 1]$.

Другий етап реалізації методу Монте-Карло – обчислення емпіричного середнього підінтегральної функції $\hat{f}_{\text{ср}}$ за формулою (7.5).

Нарешті, використання співвідношення (7.6) дає можливість за обчисленим значенням $\hat{f}_{\text{ср}}$ оцінити весь інтеграл (7.4).

Оцінка \hat{I}_K інтегралу I_K через свою природу є *випадковою величиною*. Якщо незалежно повторити процедуру знаходження оцінки \hat{I}_K інтегралу, буде отримано нове її значення – також випадкове. Однак зі збільшенням обсягу вибірки N ці величини групуються біля свого ідеального значення I_K , і розкидання оцінок \hat{I}_K біля I_K зменшується.

Помилка $\delta(\hat{I}_K)$ оцінки \hat{I}_K значення інтегралу I_K методом Монте-Карло обернено пропорційна кореню квадратному з числа випадкових дослідів N , тобто

$$\delta(\hat{I}_K) \approx \frac{\text{const}}{\sqrt{N}} \quad (7.8)$$

з деякою сталою const , і слабо зв'язана з кратністю інтегралу K . Саме тому застосування методу доцільно для обчислення інтегралів високої кратності.

Особливо ефективно застосування методу Монте-Карло у випадках, коли підінтегральний вираз достатньо складний або має вигадливу форму. Часто застосовують цей метод у задачах оцінки площ плоских фігур та об'ємів просторових тіл.

7.3. Побудова квадратурних алгоритмів на прикладі задачі оцінки числа π

Розглянемо задачу оцінки $\hat{\pi}$ значення числа π . Величину цієї константи ми добре знаємо – це 3,141593. . .

Для одержання необхідної оцінки розглянемо наступний підхід, у рамках якого використовуємо вбудовану функцію середовища Паскаль *Random*.

Припустимо, що в квадрат зі стороною 2 (тобто площею, що дорівнює 4) вписане коло одиничного радіусу. Тоді його площа дорівнює цьому значенню π . Нехай ми наугад кинули точку в квадрат. Влучивши в квадрат, ця точка може влучити (або ні) в круг (рис. 7.1).

Задаємося цілим числом N – кількістю наших спроб (*об'ємом* або *обсягом вибірки*). З N кинутих наугад точок певна їх частина виявиться в кругові. Нехай кількість цих точок (*кількість сприятливих наслідків*) виявиться рівним L .

Геометрично зрозуміло, що за досить великого обсягу вибірки (в межі – нескінченного) відношення L/N наближається до величини π . Такого роду твердження обґрунтовуються в теорії ймовірностей. Тому ми розглянемо чисельний експеримент, на підставі якого вивчимо ефективність такого роду дослідів.

7.4. Застосування випадкових величин при побудові квадратурних алгоритмів

Для отримання чергової випадкової точки в квадраті двічі звернемося до вбудованої функції *RANDOM*, що повертає два значення *Random* випадкової величини, рівномірно розподіленої в інтервалі $[0; 1]$.

За допомогою перетворення

$$X = -1 + 2 * \text{Random}, \quad Y = -1 + 2 * \text{Random}$$

ми отримаємо точку з координатами (X, Y) , рівномірно розподілену в квадраті, який має на площині ліву нижню вершину в точці $(-1; -1)$ та праву верхню вершину в точці $(1; 1)$. У нашому прикладі площа S_{maj} такого квадрату дорівнює 4 (цю величину прийнято називати *мажорантою*, оскільки квадрат включає цей круг).

Площа S круга (рис. 7.1) дорівнює $S_{\text{maj}} = \pi R^2 = \pi$, оскільки $R = 1$.

Отже, ми можемо перейти до побудови алгоритму отримання оцінки $\hat{\pi}$ числа π .

Питання, що має важливе практичне значення, це питання про необхідний часовий ресурс (тобто про величину обсягу вибірки N) для отримання із заданою точністю оцінки $\hat{\pi}$ величини числа π . Щоб дати відповідь на це питання, передбачимо у програмі цикл за зростаючими значеннями N , а саме $N = 2^m$, де m – поточний номер.

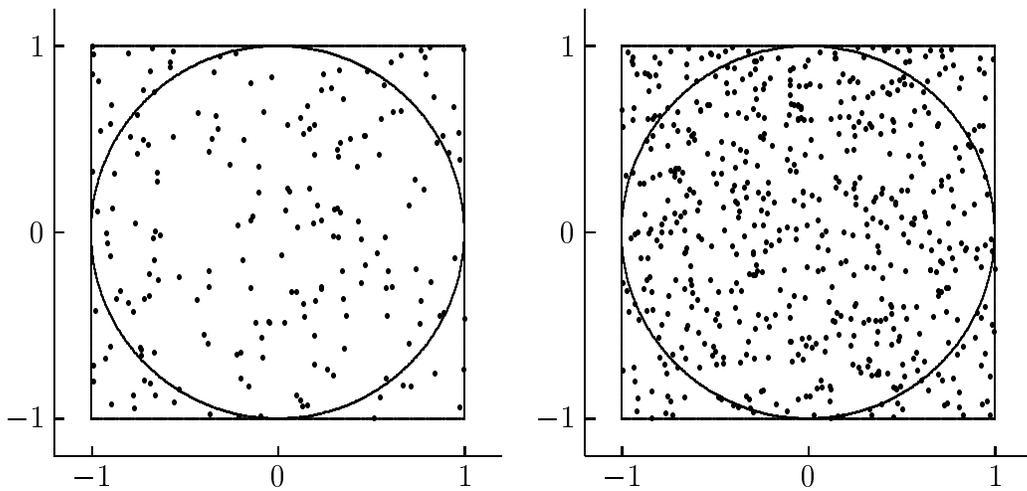


Рисунок 7.1 — До оцінки $\hat{\pi}$ числа π ; N — обсяг вибірки; зліва $N = 200$; праворуч $N = 600$

У табл. 7.1 наведений приклад результатів розрахунку цієї оцінки за методом статистичних випробувань.

Таблиця 7.1 — Залежність оцінки $\hat{\pi}$ числа π від обсягу N вибірки

Обсяг N	$\log_2 N$	Оцінка площі \hat{S}	Похибка $ \hat{S} - \pi $	$\lg \hat{S} - \pi $
2	1	4,000000	0,858407	-0,066307
4	2	2,000000	1,141593	0,057511
8	3	4,000000	0,858407	-0,066307
16	4	2,500000	0,641593	-0,192741
32	5	3,625000	0,483407	-0,315687
64	6	3,000000	0,141593	-0,848959
128	7	3,375000	0,233407	-0,631885
256	8	3,015625	0,125968	-0,899741
512	9	3,070313	0,071280	-1,147031
1024	10	3,105469	0,036124	-1,442205
2048	11	3,111328	0,030265	-1,519066
4096	12	3,151367	0,009775	-2,009904
8192	13	3,161621	0,020028	-1,698353
16384	14	3,145264	0,003671	-2,435213

З табл. 7.1 видно, що випадкові значення поточної оцінки $\hat{\pi}$ зі збільшенням обсягу вибірки все точніше наближаються до величини π . Так, для обсягу вибірки $N_{14} = 2^{14} = 16384$ оцінка \hat{S} площі S склала $\hat{S} = 3,145264$, тобто $\lg |\hat{\pi} - \pi| = -2,435213$ та $|\hat{\pi} - \pi| = 0,003671$.

Загальна тенденція вказує на поліпшення якості оцінки зі зростанням N , швидкість збіжності її до точного значення, однак, невелика.

А саме, з центральної граничної теореми теорії ймовірностей випливає, що у середньому для зменшення похибки оцінки $|\hat{\pi} - \pi|$ в K разів необхідно збільшити обсяг статистичних випробувань N в K^2 разів.

Таким чином, метод Монте-Карло вимагає значних часових ресурсів.

7.5. Розподіли випадкових величин

При обчисленні оцінки інтегралів загального вигляду (7.4) методом Монте-Карло виникає потреба генерування неперервних випадкових чисел із заданим законом розподілу $p(x)$.

Для простоти обмежимося розглядом одновимірних $K = 1$ густин розподілів $p(x)$, які найбільш розповсюджені на практиці.

Такими розподілами є наступні:

рівномірний розподіл

$$p(x) = 1/(b - a), \quad a \leq x \leq b; \quad (7.9)$$

нормальний розподіл Гаусса

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - m)^2}{2\sigma^2}\right), \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.10)$$

експоненційний розподіл

$$p(x) = \lambda \exp(-\lambda x), \quad 0 \leq x < \infty; \quad (7.11)$$

розподіл Коші

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\nu}{\nu^2 + x^2}, \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.12)$$

гамма-розподіл

$$p(x) = \frac{\beta^\alpha x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \exp(-\beta x), \quad 0 \leq x < \infty; \quad (7.13)$$

логарифмічний розподіл

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma x} \exp\left(-\frac{\ln^2 x}{2\sigma^2}\right), \quad 0 < x < \infty; \quad (7.14)$$

розподіл Стюдента

$$p(x) = \frac{\Gamma(n+1)/2]}{\sqrt{\pi n} \Gamma(n/2)} (1 + x^2/n)^{-(n+1)/2}, \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.15)$$

закон арксинуса

$$p(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{a^2 - x^2}}, \quad -a < x < a. \quad (7.16)$$

Аналогічні приклади розподілів відомі і для довільної кратності.

Найбільш розповсюдженими у практичних обчислювальних задачах є рівномірний (7.9) та нормальний (7.10) розподіли.

7.6. Рівномірно розподілені випадкові числа

Рівномірно розподілені випадкові числа, як правило, генеруються на відріжку значень $[0; 1]$, до того ж будь-яке значення q_n цього інтервалу рівномірне. Датчик послідовності чисел з такими властивостями називається *стандартним датчиком*. У розповсюджених алгоритмах, на яких засновані стандартні датчики, використовується відділення дробової частини від складного арифметичного виразу, що містить число, яке передує q_n .

В найпростішому випадку для отримання послідовності з N рівномірно розподілених на інтервалі $[0; 1]$ випадкових величин $\{q_n\}$ використовується рекурентний вираз:

$$Y_n = (\alpha Y_{n-1} + \beta) \bmod P, \quad q_n = Y_n / P, \quad (7.17)$$

де $n = 1, 2, 3, \dots, N$; α та β – константи; P – велике додатне число, кратне степеню 2. Операція $\bmod P$ діє таким чином:

$$Y_n \bmod P = \begin{cases} Y_n, & \text{якщо } Y_n \leq P, \\ Y_n - P, & \text{якщо } Y_n > P. \end{cases}$$

При відповідному виборі констант α і β та початкового ($n = 0$) значення Y_0 послідовності $\{Y_n\}$ за допомогою виразу (7.17) можна отримати послідовність рівномірно розподілених в інтервалі $[0; P]$ випадкових цілих чисел. Послідовність випадкових чисел $\{q_n\}$ в інтервалі $[0; 1]$ одержують діленням на величину P .

Як правило, перед використанням датчика випадкових чисел задається початкове значення Y_0 . Завдання різних Y_0 дозволяє формувати різноманітні послідовності випадкових чисел.

В дійсності одержують "псевдовипадкові" числа, тобто згодом через деяке велике число циклів послідовність повторюється. (В середовищі програмування Turbo Pascal замість того, щоб задавати на початку роботи стартове значення Y_0 , використовується команда *Randomize*, при цьому за стандартний застосовується датчик *Random*).

Перетворення рівномірно розподілених на відріжку $[0; 1]$ випадкових чисел q_n у випадкові числа x_n , рівномірно розподілені на відріжку $[a; b]$, здійснюється за допомогою формули

$$x_n = a + (b - a)q_n. \quad (7.18)$$

7.7. Нормально розподілені випадкові числа

Нормально розподілені випадкові числа можуть формуватися різноманітними методами. На практиці зручно використовувати методи, побудовані на перетвореннях стандартних рівномірних послідовностей $\{q_n; n = 1, \dots, N\}$ з густиною розподілу

$$\begin{cases} p(q) = 1, & \text{якщо } 0 \leq q \leq 1, \\ p(q) = 0 & \text{в протилежному випадку.} \end{cases} \quad (7.19)$$

Із закону великих чисел теорії ймовірностей випливає, що випадкова величина

$$Z = \sqrt{\frac{\alpha}{L}} \sum_{l=1}^L q_l - \beta \quad (7.20)$$

за великим L буде наближено характеризуватися нормальним розподілом. При цьому міра наближеності розподілу ймовірностей $p(x)$ до нормального (7.10) буде тим вище, чим більше число L доданків у (7.20). Зручно зажадати, щоб параметри густини (7.10) дорівнювали $m = 0$ та $\sigma = 1$. Це приводить до наступних значень параметрів α та β :

$$Z = \sqrt{\frac{12}{L}} \sum_{l=1}^L (q_l - 0,5). \quad (7.21)$$

Густина закону розподілу ймовірностей $p(x)$ буде лише асимптотично нормальною (вона стане нормальною за $L \rightarrow \infty$). Однак на практиці виявляється достатньо обмежитися фіксованою і порівняно невеликою кількістю L рівномірно розподілених випадкових величин.

Як правило, вибирають: $L = 12$, $L = 48$, $L = 108$, що дає можливість передати властивості випадкової величини в районі $|Z| \leq 3$. Це дає відповідно:

$$Z = \sum_{l=1}^{12} \left(q_l - \frac{1}{2} \right); \quad (7.22, a)$$

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{48} \left(q_l - \frac{1}{2} \right); \quad (7.22, b)$$

$$Z = \frac{1}{3} \sum_{l=1}^{108} \left(q_l - \frac{1}{2} \right). \quad (7.22, c)$$

Іншим практично поширеним методом отримання нормальних випадкових чисел з $m = 0$ та $\sigma = 1$ зі стандартною рівномірно розподіленою послідовністю $\{q_n; n = 1, \dots, N\}$ є метод, побудований на функціональних перетвореннях

$$\begin{cases} x = x_n = \sqrt{-2 \ln q_n} \cos(2\pi r_n), \\ y = y_n = \sqrt{-2 \ln q_n} \sin(2\pi r_n), \end{cases} \quad (7.23)$$

де q_n та r_n – два незалежних датчика випадкових рівномірно розподілених послідовностей.

Перетворення, зворотнє до (7.23), має вигляд

$$\begin{cases} \xi = \xi_n = \exp[-(x^2 + y^2)/2], \\ \eta = \eta_n = \arctg(y/x). \end{cases} \quad (7.24)$$

Спільна густина ймовірностей випадкових величин X, Y може бути визначена шляхом обчислення якобіана перетворення

$$D = \det \begin{pmatrix} \partial \xi / \partial x & \partial \eta / \partial x \\ \partial \xi / \partial y & \partial \eta / \partial y \end{pmatrix},$$

що для перетворень (7.23), (7.24) дає

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right). \quad (7.25)$$

З виразу (7.25) випливає, що спільна густина ймовірностей $p(x, y)$ може бути подана в вигляді множення густин

$$p(x, y) = p(x) \times p(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right).$$

Кожна з цих густин відповідає стандартному нормальному розподілу (7.10) з параметрами $m = 0$, $\sigma = 1$, до того ж випадкові величини X та Y при цьому статистично незалежні.

Тепер для отримання послідовності випадкових чисел z_n з нормальним законом розподілу (7.10) і довільними параметрами m та σ достатньо виконати лінійне перетворення

$$z_n = \sigma x_n + m \quad \text{або} \quad z_n = \sigma y_n + m. \quad (7.26)$$

7.8. Основні закони розподілу та моделювання випадкових величин

Крім двох законів розподілу (рівномірного та нормального), що описувалися вище, в практичному чисельному аналізі, використовуються багато інших. Наведемо способи генерації головних з них.

Прийемо, що в нашому розпорядженні існує стандартний датчик послідовності $\{\xi_n\}$, ($n = 1, 2, \dots$) значень випадкової величини, яка рівномірно розподілена на інтервалі $[0; 1]$, наприклад, датчик `random` з програмного середовища Pascal.

Інтервали між сусідніми точками в пуассонівському потоці підпорядковуються експоненціальному розподілу (7.11) з параметром λ . Тоді алгоритм генерації значень $\{x_n\}$ випадкової величини, що має експоненціальний розподіл, такий:

$$x_n = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi_n. \quad (7.27)$$

Відношення двох нормальних випадкових величин (з нульовими математичними сподіваннями та однаковими дисперсіями) підпорядковується розподілу Коші (7.12) з параметром ν . Алгоритм генерації значень $\{x_n\}$ випадкової величини, що підпорядковується розподілу Коші, такий:

$$x_n = \nu \operatorname{tg}(\pi \xi_n). \quad (7.28)$$

Сума з n незалежних випадкових величин, кожна з яких розподілена за експоненціальним законом, підпорядковується гамма-розподілу (7.13) з параметрами

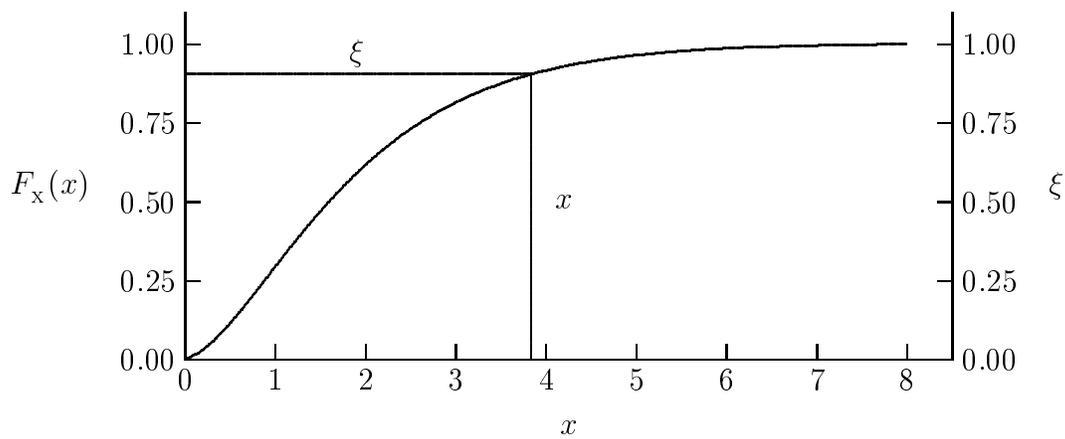


Рисунок 7.2 — До алгоритма генерації неперервної випадкової величини X з густиною $f_X(x) = x \exp(-x)$ та інтегральним законом розподілу ймовірностей $F_X(x) = 1 - (x + 1) \exp(-x)$; значенню $\xi = 0,9048$ рівномірної на $[0; 1]$ випадкової величини ξ відповідає значення $x = 3,8400$ неперервної випадкової величини X

β, n . Алгоритм генерації значень $\{x_n\}$ випадкової величини, що підпорядковується гамма-розподілу, наступний:

$$x_n = -\beta \ln \left(\prod_{j=1}^n \xi_j \right). \quad (7.29)$$

Закон арксинуса (7.16) описує розподіл миттєвих значень синусоїдального сигналу з випадковою рівномірною фазою та амплітудою a . Алгоритм генерації значень $\{x_n\}$ випадкової величини, що підпорядковується цьому розподілу, такий:

$$x_n = a \sin(\pi \xi_n). \quad (7.30)$$

В практиці програмування використовується багато інших алгоритмів генерації випадкових величин.

Метод генерації значень неперервних випадкових величин на основі функціонального перетворення.

В цьому методі (рис. 7.2) кожен випадкову величину ξ , яку отримують за допомогою стандартного датчика, піддають перетворенню за допомогою деякої функції

$$x = \Psi(\xi). \quad (7.31)$$

Якщо значення випадкової величини ξ з певною ймовірністю влучає в інтервал $(\xi', \xi' + d\xi')$, то з тією ж ймовірністю значення x виявиться у відповідному інтервалі $(x', x' + dx')$, тобто за умови (7.31) маємо

$$f_\xi(\xi') d\xi' = f_X(x') dx', \quad (7.32)$$

де $f_\xi(\xi)$ – густина розподілу випадкової величини ξ , а $f_X(x)$ – густина розподілу випадкової величини X .

Для рівномірно розподіленої випадкової величини на інтервалі $[0; 1]$ маємо $f_\xi(\xi) = 1$, тому $d\xi' = f_x(x') dx'$. Звідси отримуємо функціональний зв'язок між ξ та x :

$$\xi = \int_{-\infty}^x f_x(x') dx' \equiv F_x(x), \quad (7.33)$$

де $F_x(x)$ — функція розподілу випадкової величини x .

Нехай нам відома функція $\Phi(\xi)$, що обернена до функції $F_x(x)$. Тоді перетворення

$$x = F_x^{-1}(\xi) = \Phi(\xi) \quad (7.34)$$

дає можливість отримати випадкову величину X із заданим законом розподілу ймовірностей.

Таким чином, метод функціонального перетворення припускає генерацію вибіркового значення $\{\xi_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N$ та подальше перетворення їх в послідовність вибіркового значення $\{x_n\}$.

Практично інтервал $[0; 1]$ розбивають на певну кількість K послідовних підінтервалів, після чого запам'ятовують масив $\{\xi\}$ з $K + 1$ значень на їх межах. Ширина кожного з підінтервалів може бути обрана як сталою, так і змінною. Далі для кожного $\{\xi_k\}$, ($k = 1, 2, \dots, K$) знаходять розв'язок рівняння

$$\xi_k = F_x(x_k) = F_k, \quad (7.35)$$

що дає відповідні масиви $\{x\}$, $\{F\}$. Цю підготовчу роботу виконують заздалегідь, а масиви $\{\xi\}$, $\{x\}$ та $\{F\}$ запам'ятовують. При генерації на основі стандартного датчика за поточним випадковим значенням ξ знаходять такий номер m , що

$$F_m \leq \xi \leq F_{m+1}, \quad (7.36)$$

тоді поточна випадкова величина може бути обрана з інтервалу

$$x_m \leq x \leq x_{m+1}. \quad (7.37)$$

Для уточнення значення випадкової величини розповсюджений метод оберненої лінійної інтерполяції

$$x \rightarrow x_m + \frac{x_{m+1} - x_m}{F_{m+1} - F_m} (F_{m+1} - \xi). \quad (7.38)$$

Метод генерації значень дискретних випадкових величин на основі функціонального перетворення.

В рамках цього методу (рис. 7.3) для генерації значень m дискретної випадкової величини з розподілом амплітуд ймовірностей $\{P_m\}$, де $m = 0, 1, 2, \dots$, заздалегідь розраховують набір ймовірностей $\{F_m\}$ за правилом

$$F_m = \sum_{n=0}^m P_n. \quad (7.39)$$

Тепер при генерації на основі стандартного рівномірного на інтервалі $[0; 1]$ датчика по поточному випадковому значенню ξ знаходять такий номер m , що

$$F_m \leq \xi \leq F_{m+1}. \quad (7.40)$$

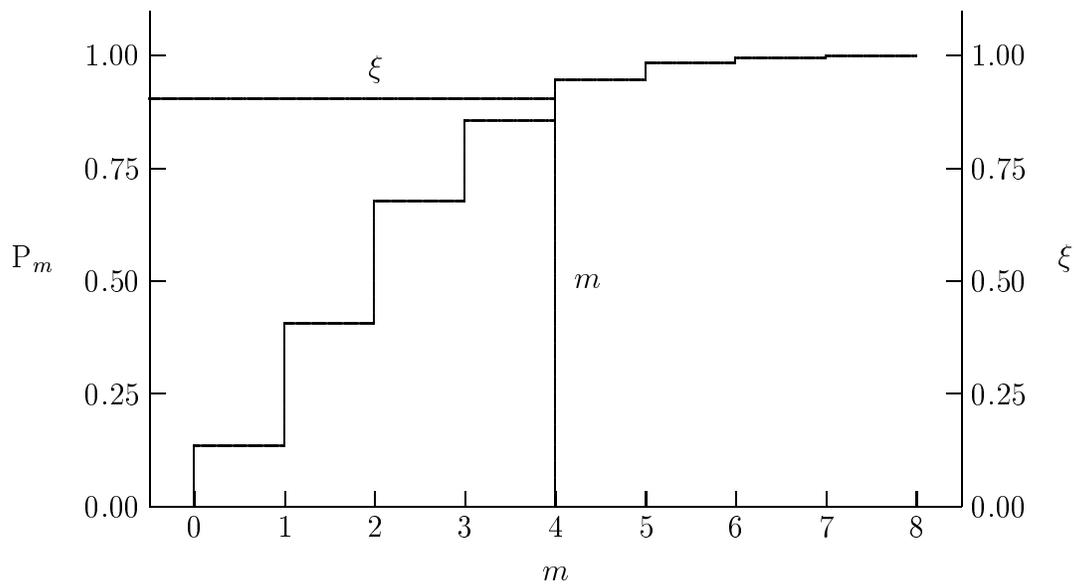


Рисунок 7.3 — До алгоритма генерації дискретної випадкової величини X з амплітудою ймовірності P_m ; значенню $\xi = 0,9048$ рівномірної на $[0; 1]$ випадкової величини ξ відповідає значення $m = 4$ дискретної випадкової величини X

Знайдений номер m і є поточним значенням дискретної випадкової величини X .

Метод Неймана генерації випадкових величин.

Цей метод побудований на "відбраковці" з вибірки випадкових величин тих з них, які задовольняють деякому критерію.

Розглянемо метод Неймана на прикладі генерації випадкової величини, що підпорядковується нормальному закону з нульовим математичним сподіванням та одиничною дисперсією. Для цієї випадкової величини введемо функцію

$$\rho(x) = \left(\max_x f_x(x) \right)^{-1} f_x(x) = \exp(-x^2/2). \quad (7.41)$$

Оберемо інтервал $-x_{\max} \leq x \leq x_{\max}$ такий, щоб інтегральна ймовірність

$$P = \int_{-x_{\max}}^{x_{\max}} f_x(x) dx \quad (7.42)$$

відрізнялася від 1 не більше, ніж задане число $\varepsilon \ll 1$, тобто $(1 - P) \leq \varepsilon$. Наприклад, для $x_{\max} = 3$ маємо $(1 - P) < 0,0027$ (правило "трьох сигм").

Тепер виконуємо наступні кроки алгоритму.

Крок 1. За допомогою двох незалежних стандартних датчиків випадкових чисел отримуємо пару випадкових чисел ξ та η , які мають рівномірний розподіл на інтервалі $[0; 1]$.

Крок 2. За допомогою одного з цих чисел отримуємо

$$x = -x_{\max} + 2\xi x_{\max}, \quad y = \rho_x(x). \quad (7.43)$$

Крок 3. Порівняємо дві величини η та y . Якщо $\eta > y$, то переходимо до кроку 1. Якщо $\eta \leq y$, випадкове число ξ запам'ятуємо.

Методом Неймана можна виконувати генерацію значень випадкової величини зі довільною густиною розподілу ймовірностей.

7.9. Статистичний аналіз датчиків випадкових чисел

Якість програмних датчиків випадкових чисел можна перевірити різноманітними способами. Розповсюдженим способом є застосування *гістограми* (рис. 7.4 та рис. 7.5).

При побудові гістограми виконують наступні кроки дій:

1. Задають обсяг вибірки N .
2. За допомогою обраного датчика отримують послідовність (*виборку*) випадкових чисел $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$.
3. Знаходять величини $M_{\max} = \max(x_n)$ та $M_{\min} = \min(x_n)$, ($n = 1, 2, \dots, N$) — максимум та мінімум вибірки, що визначають межі аналізу. Якщо межі аналізу заздалегідь відомі, як, наприклад, у випадку рівномірного датчика, то користуються відомими значеннями.
4. Задають кількість каналів аналізу гістограми M та ширину кожного каналу $h = (M_{\max} - M_{\min})/M$.
5. Масив G розмірності M , що призначений для результатів гістограмного аналізу, обнулюють.
6. Відкривають цикл за елементами вибірки $\{x_n\}$, ($n = 1, 2, \dots, N$).
- 6.1. Для кожного поточного елемента x_n визначають номер j каналу заповнення за правилом $j = [1 + x_n/h]$, де $[.]$ — символ цілої частини.
- 6.2. У канал за номером j додають одиницю, тобто $G[j] \rightarrow G[j] + 1$.
7. По завершенні циклу за елементами вибірки перевіряють, що сума $\sum_{j=1}^M G[j]$ збігається з обсягом вибірки N .

Гістограма дозволяє візуально засвідчуватися в якості давача.

За її допомогою можна знайти вибіркові характеристики, наприклад *вибіркове середнє* x_* та вибіркову дисперсію σ_*^2 :

$$\begin{aligned} x_* &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M h j G[j]; \\ \sigma_*^2 &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - x_*)^2 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M (h j - x_*)^2 G[j]. \end{aligned} \quad (7.44)$$

При необмеженому збільшенні обсягу вибірки та зменшенні при цьому ширини каналів аналізу гістограми її зовнішній вигляд (після нормування на обсяг вибірки N) стає все більш схожим на графік густини розподілу $f_x(x)$ відповідної випадкової величини, яка моделюється давачем.

Знайдені вибіркові середні x_* та σ_*^2 можна зіставити з їхніми ідеальними аналогами

$$m_p = \int x f_x(x) dx, \quad \sigma_p^2 = \int (x - m_p)^2 f_x(x) dx. \quad (7.45)$$

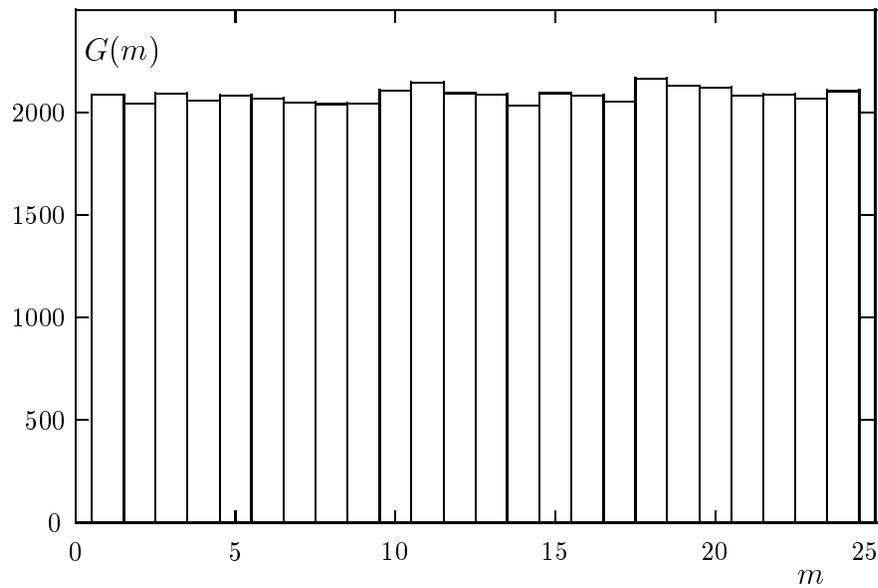


Рисунок 7.4 — Гістограма $G(m)$ рівномірного на інтервалі $(0; 1)$ датчика Random середовища Pascal (обсяг вибірки $N = 50000$; кількість каналів аналізу гістограми $M = 24$)

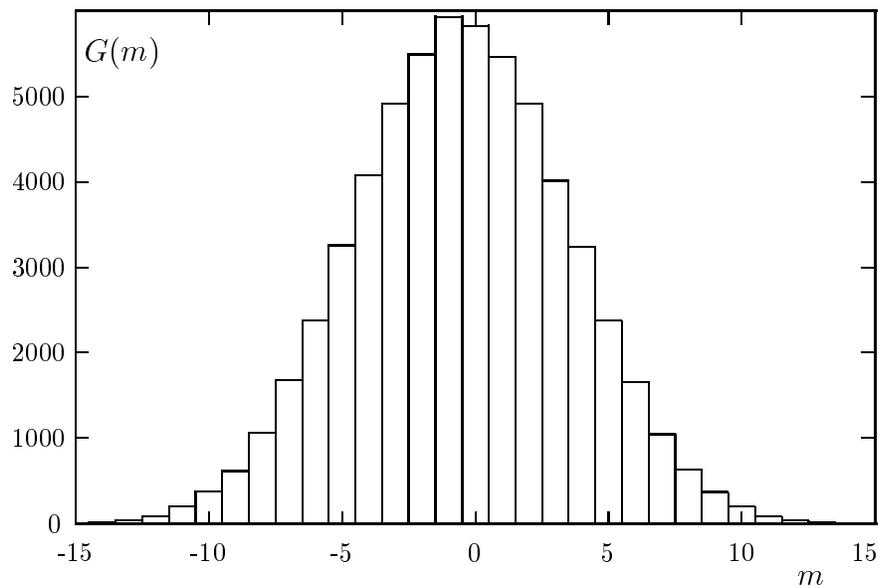


Рисунок 7.5 — Гістограма $G(m)$ нормального датчика з параметрами $m = 0$, $\sigma = 1$, заснованого на датчикові Random середовища Pascal (обсяг вибірки $N = 60000$; ширина кроку аналізу гістограми $h = 0,25$)

В математичній статистиці докладно обмірковується порівняння вибірових характеристик та аналіз властивостей вибірових даних. У ньому опрацьовані різноманітні методи порівняння, аналізу, побудови критеріїв та прийняття статистичних рішень.

7.10. Застосування методу Монте-Карло для обчислення інтегралів

Значна частина величин, що є об'єктом обчислень у різноманітних прикладних завданнях, є або інтегралами, або виражаються через інтеграли загального вигляду (7.4). Часто аналітично обчислити такого роду інтеграли у замкнутій формі неможливо. Особливо це відноситься до багатократних інтегралів, оскільки при їх обчисленні за допомогою стандартних методів чисельних квадратур кількість доданків зростає при збільшенні кратності інтегралу надзвичайно швидко. Так, якщо ми розбиваємо інтервал зміни кожної змінної на десять частин, то для обчислення потрібного інтегралу необхідно знаходити суму приблизно 1000 складових. Для обчислення ж 20-кратного інтегралу зажадається складання порядку 10^{20} складових, що практично нездійсненно. Жодним чисельним методом рішення таких задач є метод Монте-Карло, схема якого стисло викладена вище.

Обчислення простих інтегралів

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \quad (7.46)$$

може розглядатися як окремий випадок процедури (7.5), (7.6) для випадку одиначної вагової функції $p(x) = 1$ та скалярного аргументу x . Схема методу Монте-Карло для цієї задачі приймає вигляд

$$I_1 \rightarrow \hat{I}_1 = \frac{b-a}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n), \quad (7.47)$$

де $\{x_n; n = 1, 2, \dots, N\}$ — випадкові рівномірно розподілені в інтервалі $[a, b]$ числа.

Датчик таких чисел реалізується згідно алгоритму (7.18) зі стандартної послідовності $\{q_n; n = 1, 2, \dots, N\}$. Алгоритм (7.47) аналогічний методу прямокутників знаходження значення певного інтегралу.

Обчислення кратних інтегралів реалізується за тією ж схемою. Розглянемо, наприклад, випадок трикратного інтегралу

$$I_3 = \iiint_G f(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3, \quad (7.48)$$

у якому область інтегрування обмежена паралелепіпедом

$$G : \{a_1 \leq x_1 \leq b_1; a_2 \leq x_2 \leq b_2; a_3 \leq x_3 \leq b_3\}.$$

Заміною змінних

$$x_i = a_i + (b_i - a_i)y_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (7.49)$$

інтеграл (7.46) зводиться до вигляду

$$I_3 = (b_1 - a_1)(b_2 - a_2)(b_3 - a_3) \iiint_g f(y_1, y_2, y_3) dy_1 dy_2 dy_3. \quad (7.50)$$

Тут $f(y_1, y_2, y_3)$ — підінтегральна функція, що записана у нових змінних y_1, y_2, y_3 , а через g позначена область інтегрування за змінними y_1, y_2, y_3 .

Використовуючи датчик випадкових чисел, рівномірно розподілених на інтервалі $[0; 1]$, за схемою методу Монте-Карло (7.5), (7.6) одержуємо оцінку інтегралу (7.31) у вигляді

$$I_3 \rightarrow \hat{I}_3 = \frac{1}{N} (b_1 - a_1)(b_2 - a_2)(b_3 - a_3) \sum_{n=1}^N f(y_{1,n}, y_{2,n}, y_{3,n}). \quad (7.51)$$

7.11. Обчислення багатократних інтегралів

При розрахунках оцінок багатократних інтегралів зручно заздалегідь шляхом заміни змінних інтегрування перейти до стандартних меж інтегрування $[0; 1]$ по кожній з них (рис. 7.6).

Будемо вважати, що вхідний інтеграл кратності K вже зведений до такого стандартного вигляду аналогічно процедурі (7.48)–(7.51), а виникаючий при цьому передінтегральний множник використовується у заключному результаті, і розглянемо K -вимірний інтеграл, що зведений до стандартного вигляду, тобто

$$I_K = \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ разів}} f(x_1, \dots, x_K) dx_1 \dots dx_K, \quad (7.52)$$

до того ж вважаємо, що підінтегральна функція $f(x_1, \dots, x_K)$ є інтегруємою. Дотримуючись методу Монте-Карло, розглянемо набір, що містить послідовність незалежних величин $\{\theta_k\}$, $k = 1, \dots, K$. Кожна з цих величин є випадковою величиною з густиною розподілу $p_k(\theta_k) = 1$, якщо $0 \leq \theta_k \leq 1$, і $p_k(\theta_k) = 0$ в іншому випадку.

Утворимо тепер з набору незалежних величин $\{\theta_k\}$ випадковий вектор $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_K)$. Реалізації цього вектору рівномірно заповнюють простір, обмежений гіперкубом Ω зі стороною, яка дорівнює 1.

Тоді

$$I_K = \int_V f(\Theta) d^K \Theta = M_{\Theta} [f(\Theta)], \quad (7.53)$$

де V — об'єм одиничного гіперкуба; $M_{\Theta} [f(\Theta)]$ — математичне сподівання відносно випадкового вектора Θ .

Розглянемо послідовність значень, побудовану з реалізацій випадкового вектора Θ . Виконавши обчислення за формулою

$$y_n = f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}), \quad (7.54)$$

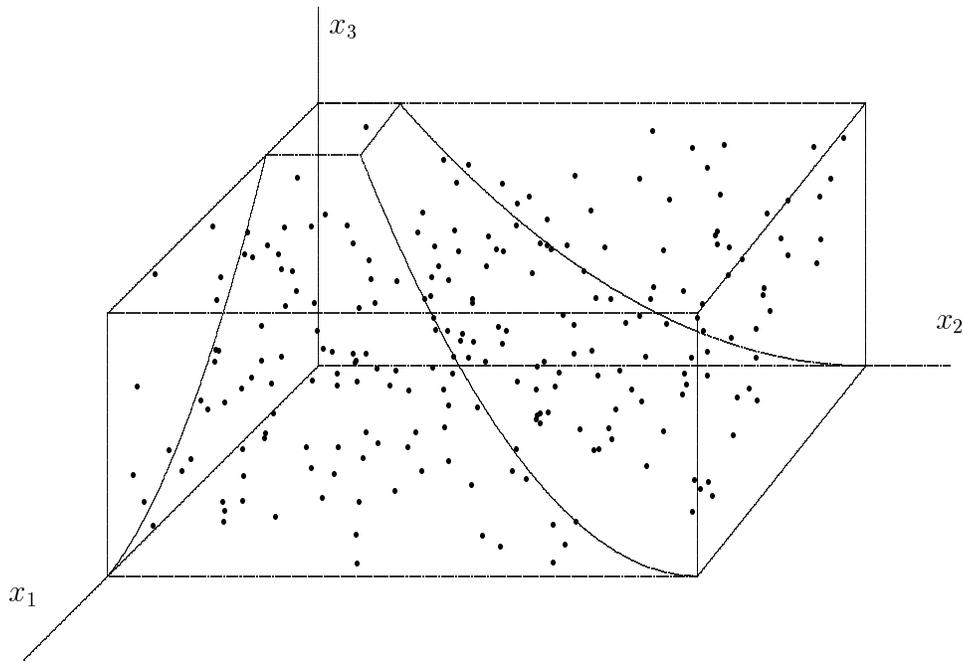


Рисунок 7.6 — До оцінки об'єму складного тривимірного тіла (обсяг вибірки $N = 200$)

одержимо послідовність y_1, y_2, \dots, y_N з N реалізацій можливих значень випадкової величини

$$Y_n = f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}). \quad (7.55)$$

Зі способу утворення послідовності $\{y_n\}$ випливає, що випадкові величини $\{Y_n\}$ взаємно незалежні і мають один і той же закон розподілу. Тому, скориставшись законом великих чисел теорії ймовірностей, отримаємо наступний *алгоритм чисельної оцінки інтегралу I_K* :

$$\hat{I}_{K,N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Y_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}). \quad (7.56)$$

Тут важливо відзначити, що необхідний об'єм обчислень залежить від K вже не за степеневим законом, а росте пропорційно кратності інтегрування K (при фіксованих інших параметрах).

Оцінка $\hat{I}_{K,N}$ (7.56) є також випадковою величиною, відповідною величині обсягу вибірки N . При цьому зі збільшенням N послідовні реалізації цієї випадкової величини мають тенденцію групуватися біля ідеального рівня – інтегралу I_K .

Перейдемо до визначення величини необхідного обсягу статистичних випробувань N для оцінки ймовірності похибки $\hat{I}_{K,N}$ при заданій довірчій ймовірності і довірчому інтервалі.

Розглянемо наступну подію: *{відносна похибка оцінки $\hat{I}_{K,N}$ величини I_K не перевищує α }* та поставимо питання про ймовірність цієї події.

Нехай з ймовірністю q відносна похибка оцінки $\hat{I}_{K,N}$ величини I_K не перевищує α , тобто

$$\Pr \left\{ \alpha I_K \left(D_N [\hat{I}_{K,N}] \right)^{-1/2} \leq \gamma \right\} = q, \quad (7.57)$$

де $\alpha = |I_K - \hat{I}_{K,N}| / I_K$ – межа похибки, що припускається;

$$\gamma = \Phi^{-1}(q);$$

$\Phi(z) = (2\pi)^{-1/2} \int_0^z \exp(-t^2/2) dt$ – функція Лапласа;

$D_N [\hat{I}_{K,N}]$ – дисперсія оцінки величини $\hat{I}_{K,N}$:

$$D_N [\hat{I}_{K,N}] = \frac{1}{N} \left(M_{\Theta} [f^2(\Theta)] - \{M_{\Theta} [f(\Theta)]\}^2 \right). \quad (7.58)$$

Інакше отриманий вираз можна записати у вигляді

$$D_N [\hat{I}_{K,N}] = \frac{1}{N} C_1, \quad (7.59)$$

де C_1 – деяка константа задачі, пов'язана з конкретним виглядом підінтегральної функції.

Включаючи в цю константу невідоме, але *точно* значення I_K , одержимо вираз, що описує шукану залежність для обсягу вибірки

$$\Pr \left\{ \alpha \sqrt{N/C_1} \leq \gamma \right\} \approx q. \quad (7.60)$$

Чим менше параметр α , тим точніше одержувана оцінка. Відповідно довіра до неї тим більша, чим більша ймовірність q .

На практиці звичайно вибирають величини параметра α та ймовірності q такими: $\alpha = 0,05$ й $q = 0,9$ (цьому значенню q відповідає $\gamma = 1,65$). Для цих значень статистичних параметрів алгоритму одержимо з (7.60) наступну формулу для шуканого обсягу вибірки

$$N \approx C_1 (\gamma/\alpha)^2. \quad (7.61)$$

Ця отримана величина – необхідний обсяг статистичної вибірки (верхня межа N). Вона гарантує при виконанні розрахунку інтегралу I_K отримання його оцінки $\hat{I}_{K,N}$, яка не відхиляється з імовірністю q від справжнього значення з відносною похибкою α .

З (7.61) не вдається одержати кількісну залежність для N , оскільки невідома константа C_1 . На практиці виразом (7.61) користуються, експериментуючи з різними значеннями обсягу вибірки, послідовно їх подвоюючи.

Якщо інтерпретувати довірчий інтервал α як відносну похибку оцінки ε , то з (7.61) випливає

$$\varepsilon \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \gamma C_1, \quad (7.62)$$

тобто зі збільшенням обсягу вибірки в N разів, похибка оцінки інтегралу зменшується в \sqrt{N} разів. Тому як похибку $\varepsilon = \varepsilon_N$ послідовно використовують наступну характеристику:

$$\varepsilon_N = |\hat{I}_{K,2N} - \hat{I}_{K,N}| / \hat{I}_{K,2N}, \quad (7.63)$$

де $\hat{I}_{K,N}$ та $\hat{I}_{K,2N}$ – величини оцінок при подвоєнні обсягу вибірки N .

З (7.62) випливає, що реалізації оцінок $\hat{I}_{K,N}$ для різноманітних N мають обгинаючу похибку зверху, що пропорційна $N^{-1/2}$. Тому в логарифмічних змінних

графічна залежність цієї обгинаючої $\log_2(\varepsilon_N)$ від $\log_2 N$ повинна мати тангенс кута нахилу, що дорівнює $-\frac{1}{2}$, тобто, наприклад, при кожному збільшенні в чотири рази обсягу N похибка ε_N повинна зменшитися в $\sqrt{4} = 2$ рази.

7.12. Застосування методу Монте-Карло для оцінки об'єму циліндра

Розглянемо циліндр висотою $H = 1$ та радіусом колової основи $R = 1$.

Поставимо задачу знаходження оцінки об'єму такого циліндра за допомогою методу Монте-Карло (рис. 7.7).

Оцінка об'єму циліндра знаходиться за формулою

$$\hat{V}_N = V_{\text{maj}} \cdot \frac{L}{N}, \quad (7.64)$$

де $V_{\text{maj}} = 4R^2H$ – об'єм мажоранти (в даному прикладі – об'єм паралелепіпеда); N – кількість усіх точок (обсяг вибірки); L – кількість точок, що потрапили у циліндр (число сприятливих наслідків).

Тут ще раз підкреслимо, що оцінка \hat{V}_N є випадковою величиною, а її значення будуть різними для різних обсягів вибірки N .

Для оцінки об'єму циліндра організуємо цикл викликів датчика і здобудемо послідовність випадкових точок $\{(X_n, Y_n, Z_n)\}$, $n = 1, \dots, N$. Повна кількість таких точок є обсяг вибірки N . Вся вибірка міститься у паралелепіпеді та належить мажоранті, при цьому певна її частина належить циліндру.

Перетворимо трійку чисел (X_n, Y_n, Z_n) в нову (u_n, v_n, w_n) за правилом:

$$\begin{aligned} u_n &= (2X_n - 1)R, \\ v_n &= (2Y_n - 1)R, \\ w_n &= Z_n H. \end{aligned} \quad (7.65)$$

Кожна точка з координатами (u_n, v_n, w_n) знаходиться у мажоранті. Вимогою виконання сприятливого наслідку, тобто влучення цієї точки у циліндр, є

$$(u_n^2 + v_n^2) \leq R^2. \quad (7.66)$$

Нехай для обсягу вибірки N , обсяг підвибірки точок, що відповідають сприятливій вимозі належати циліндру, дорівнює в результаті досліді L .

Побудуємо файл даних, в який виведемо використовані величини $\lg(N)$ та $\lg \Delta_V(N) = \lg(|V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|)$ (для абсолютної похибки). В файл даних також виведемо засновані на них величини $\log_2(N)$ та $\lg \delta_V(N) = \lg(|V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|/V_{\text{ideal}})$ (для відносної похибки).

За даних, здобутих в результаті багатократного виконання програми, побудуємо залежність.

На рис. 7.8 наведено всю сукупність здобутих експериментальних даних (вказані набором точок). З рис. 7.8 видно монотонне зменшення відносної похибки,

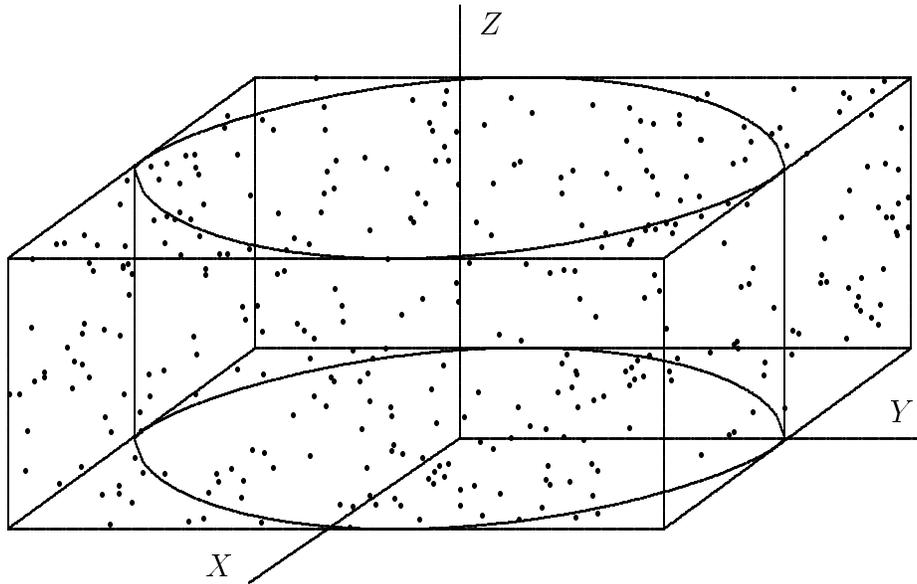


Рисунок 7.7 — До задачі оцінки об'єму циліндра (обсяг вибірки $N = 300$)

тобто покращання точності оцінок. Видно також, що набір точок добре огинається (мажорується) зверху прямою.

Проаналізуємо чисельні результати, здобуті на підставі рис. 7.8. Оскільки відносна похибка

$$\delta_V(N) = \frac{|V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|}{V_{\text{ideal}}} \quad (7.67)$$

залежить від обсягу вибірки N як

$$\delta_V(N) \approx \frac{\text{const}}{\sqrt{N}}, \quad (7.68)$$

то (використовуючи десятковий логарифм)

$$\lg \delta_V(N) \approx \lg \text{const} - \frac{1}{2} \lg N. \quad (7.69)$$

З цього випливає, що тангенс кута нахилу мажоруючої залежності $\delta(N)$ в подвійній логарифмічній шкалі повинен дорівнювати $-\frac{1}{2}$. Побудуємо цю залежність на підставі здобутих даних. Виберемо два периферійних значення $N_8 = 2^8 = 256$ та $N_{18} = 2^{18} = 262144$.

Для них величини відносної похибки дорівнюють $\lg \delta_V(N_8) = -0,730$ та $\lg \delta_V(N_{18}) = -2,424$.

Для тангенса кута нахилу $\text{tg}\psi$ мажоруючої прямої з експериментальних даних здобудемо

$$\text{tg}\psi \approx \frac{\lg \delta_V(N_8) - \lg \delta_V(N_{18})}{(\log_2 N_8 - \log_2 N_{18}) \lg 2} \approx \frac{-0,73 + 2,424}{(8 - 18) 0,3010} = -0,563. \quad (7.70)$$

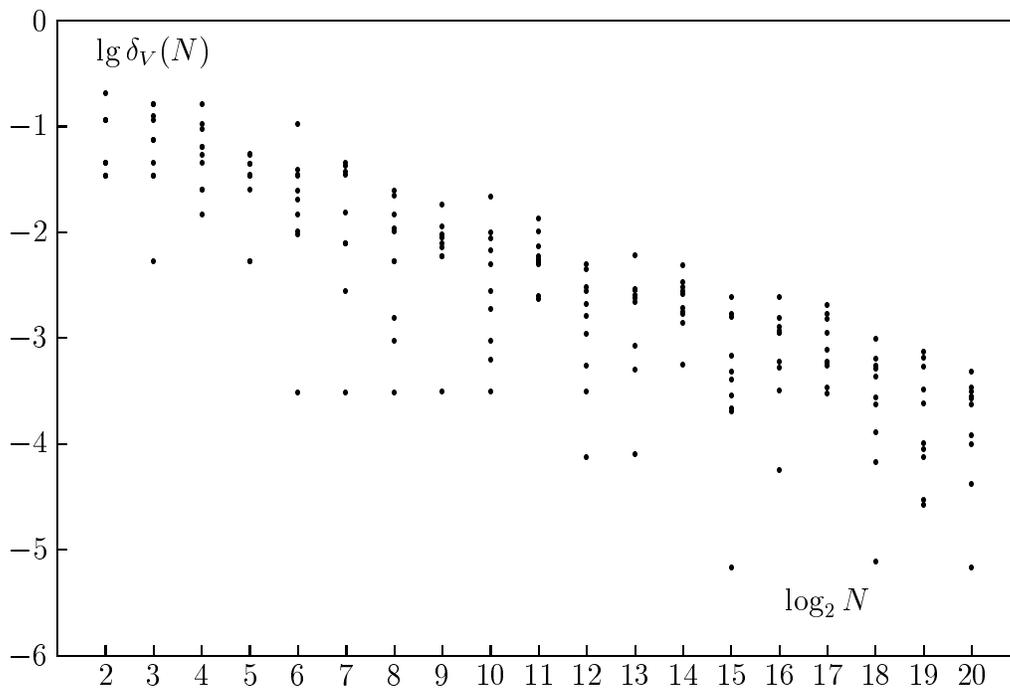


Рисунок 7.8 — Набір експериментальних даних в задачі оцінки об'єму циліндра

Одержаний результат також добре відповідає його теоретичному прототипу, що дорівнює $-\frac{1}{2}$, якщо прийняти до уваги невелику величину $2^8 = 256$. Цей результат обґрунтовує застосування використаної методики обчислення потрібних оцінок.

Задасмося тепер припустимою величиною ε похибки результату і виберемо, наприклад, $\varepsilon = 10^{-2}$.

З рис. 7.8 видно, що виконання вимоги $\delta_V(N) < \varepsilon = 10^{-2}$ гарантується для обсягу вибірки N , що дорівнює $N_{17} = 2^{17} = 131072$. В результаті розрахунків здобудемо для розкиду потрібної оцінки об'єму циліндра $\Delta(V_{N_{17}}) = 0,0035$.

Таким чином знаходимо, що потрібна оцінка така :

$$\hat{V}_{N_{17}} = 3,1451 \pm 0,0035, \quad (7.71)$$

при цьому ідеальне значення дорівнює

$$V_{\text{ideal}} = \pi R^2 H = 3,14159. \quad (7.72)$$

Порівняння отриманих величин вказує на достатньо досягнену точність. Здобуті значення наведено у табл. 7.2.

Тут відзначимо, що розглянута задача оцінки має модельний характер і в неї відоме точне значення V_{ideal} потрібного об'єму циліндра. Оскільки на практиці таке точне значення, як правило, є невідомим, обчислення $\lg \delta_V(N)$ виконують, наприклад, шляхом порівняння наступної оцінки \hat{V}_N із середньовибірковою оцінкою (при даному N).

Переваги застосування методу Монте-Карло при чисельному інтегруванні :

1. Метод вільний від будь-яких припущень щодо регулярності (гладкості) підінтегральної функції або міри її складності.

Таблиця 7.2 — Результати обчислень оцінки \hat{V} об'єму V циліндра

Обсяг вибірки N	16	4096	131072	1048576
Оцінка об'єму циліндра \hat{V}_N	2,56	2,792	3,233	3,1456
Точний об'єм циліндра V_{ideal}	3,14159	3,14159	3,14159	3,14159
Похибка $\Delta_V(N)$ оцінки	0,58	0,35	0,09	0,0041
Логарифм похибки $\lg \delta_V(N)$	-1,451	-2,498	-3,569	-3,773

2. Метод конструктивний для областей інтегрування складної або вигадливої форми, в тому числі для областей, межі яких знаходяться за виконання деяких заданих умов.

3. Метод конструктивний при знаходженні інтегралів довільної кратності, в тому числі і при великому числі вимірів.

Деякі недоліки методу :

1. Межі помилок обчислення цих величин не визначені достеменно, вони містять деяку випадковість.

2. Статистична похибка одержуваної оцінки спадає поволі (з порядком спадання $N^{-1/2}$), а для її зменшення необхідно створювати спеціальні алгоритми, що залежать від особливостей задачі.

3. З метою поліпшення ефективності методу необхідно для кожного конкретного багатократного інтегралу спеціально створювати мажоранту.

4. Необхідно користуватися давачем випадкових чисел, послідовність яких має достатньо великий період повторення і рівномірно заповнює стандартний інтервал.

Метод Монте-Карло застосовується при розв'язанні достатньо широкого класу обчислювальних задач. Серед них можна, в доповнення до вже вказаних, відзначити :
 генерацію випадкових процесів та полів;
 знаходження розв'язків диференціальних рівнянь;
 моделювання еволюції складних систем, до яких є недоцільним застосування аналітичних методів та багато ін.

7.13. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на чотири години і містить два завдання.

З а в д а н н я 1

Складіть програму генерування нормально розподілених випадкових чисел за двома методами :

за методом усереднення (7.21);

за методом функціональних перетворень (7.23).

Параметри, що задаються, є обсяг вибірки N , середнє значення m і середньоквадратичне відхилення σ .

Побудуйте гістограму отриманої вибірки, вибравши належним чином 12 підінтервалів області перегляду за аргументом.

Порівняйте середній термін, необхідний для отримання вибірки фіксованого обсягу $N = 10^3$ двома різноманітними методами (7.21) і (7.23).

Варіанти

- а) $N = 1000$; $\sigma = 0,05$; $m = 1,0$;
- б) $N = 1000$; $\sigma = 0,10$; $m = 1,0$;
- в) $N = 1000$; $\sigma = 0,20$; $m = 1,0$;
- г) $N = 1000$; $\sigma = 0,05$; $m = 0,0$;
- д) $N = 1000$; $\sigma = 0,10$; $m = 0,0$;
- е) $N = 1000$; $\sigma = 0,20$; $m = 0,0$.

З а в д а н н я 2

Складіть програму обчислення певних інтегралів методом Монте-Карло. Дослідіть точність обчислення інтегралів залежно від обсягу вибірки K . Обмежтесь при цьому значеннями $N = 250, 500, 1000, 2000, 4000, 8000, 1600$.

Варіанти

- а) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $f(x) = 0,5x + x \cdot \ln(x)$;
- б) $a = 2,0$; $b = 3,0$; $f(x) = \ln(x + 2)/x$;
- в) $a = 1,2$; $b = 2,2$; $f(x) = 2,6x^2 \ln(x)$;
- г) $a = 0,5$; $b = 1,5$; $f(x) = (x^2 + 1) \sin(x - 0,5)$;
- д) $a = 2,0$; $b = 3,0$; $f(x) = x^2 \cos(x/4)$;
- е) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $f(x) = 3x + \ln(x)$.

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити:

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів обчислення інтегралів з використанням методу Монте-Карло згідно з завданням;
- 5) інтерпретацію отриманих результатів.

7.14. Завдання для перевірки

1. Розкрийте суть методу Монте-Карло. Проаналізуйте збіжність статистичних оцінок до істинного значення в залежності від величини обсягу вибірки.

2. Вкажіть переваги і недоліки методу Монте-Карло.

3. Порівняйте способи знаходження значень певних інтегралів, оснований: а) на методі Монте-Карло; б) на методі прямокутників.

4. Запропонуйте варіанти розглянутих алгоритмів, що дозволять одержувати випадкову оцінку розв'язку звичайного диференціального рівняння. Проаналізуйте окремо випадки задачі з початковими та межовими умовами.

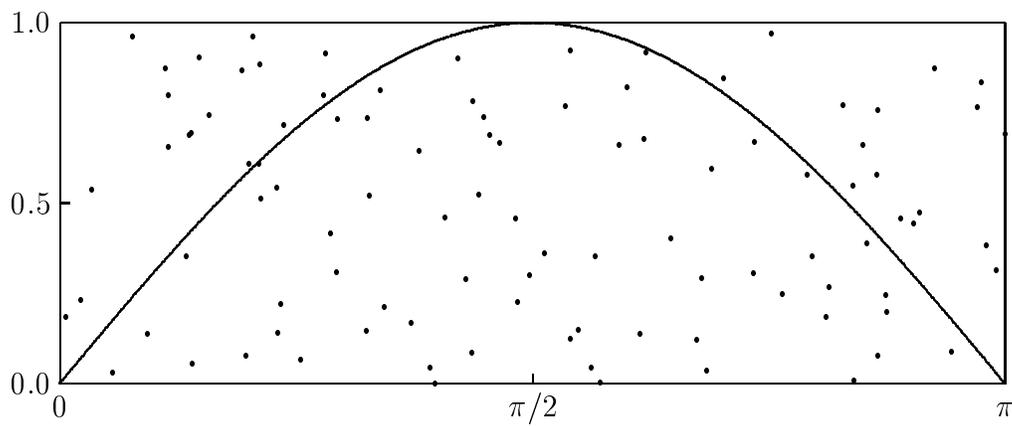


Рисунок 7.9 — До оцінки площі під аркою синусоїди

5. Перевірте справедливість формул (7.22). Знайдіть середнє значення і дисперсію випадкових величин, що одержуються.

6. Використовуючи метод Монте-Карло, складіть програму обчислення площ фігур, обмежених заданими поверхнями G . Перевірте правильність обчислень на прикладі оцінки площі фігури S , що обмежена на площині xOy кривими: $-1 \leq x \leq 1$, $y = x^3/4$, $y = x^2$, $y = (x + 4)/3$ (відповідь: $S = 19/6$).

7. Використовуючи метод Монте-Карло, складіть алгоритм та програму обчислення об'ємів тіл, обмежених заданими поверхнями G . Перевірте правильність обчислень на прикладі оцінки об'єму V тіла, обмеженого у просторі поверхнями $z^2 = xy$, $x = 1$, $x = 0$, $y = 1$, $y = 0$ (відповідь: $V = 1/2$).

8. Використовуючи метод Монте-Карло, складіть програму обчислення площі плоскої фігури, обмеженою віссю абсцис та аркою синусоїди $\sin(x)$ на інтервалі $[0; \pi]$ (рис. 7.9). Проаналізуйте величину обсягу вибірки N , що необхідна для досягнення заданої точності δ обчислень.

9. Запропонуйте схему, основувану на методі Монте-Карло, для одержання оцінок особливих інтегралів. Проаналізуйте такі випадки:

особливість в одному або в обох межах інтегрування;

особливість в підінтегральному виразі.

10. У середині заданого круга випадково вибираються точки A і B . Опишіть алгоритм оцінки середньої відстані AB .

11. У середині заданого трикутника з вершинами A, B, C випадково вибирається точка D . Опишіть алгоритм оцінки середньої відстані AD .

12. Запропонуйте розвиток розглянутих алгоритмів, що дозволить збільшити швидкість збіжності випадкової оцінки до істинного значення.

13. Запропонуйте схему, основувану на методі Монте-Карло, для отримання оцінок довжини заданих кривих на площині. Проаналізуйте випадок кола, еліпса та ділянки параболи.

14. *Задача Архімеда.* Нехай сфера описана цилиндром. Відомо, що відношення ξ їх об'ємів дорівнює $2/3$. Користуючись методом статистичних іспитів, запропонуйте обчислювальну схему знаходження оцінки $\hat{\xi}$ відношення ξ .

8. Розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних

8.1. Основні теоретичні відомості

У загальному випадку *диференціальне рівняння в частинних похідних другого порядку* з двома незалежними змінними x та y має вигляд

$$F(u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}) = 0, \quad (8.1)$$

де u – функція, що відшукується, u_x, u_y – перші частинні похідні, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy} – другі частинні похідні по аргументах x та y . *Розв'язком* рівняння (8.1) називається функція $u = u(x, y)$, що перетворює це рівняння на тотожність.

Рівняння (8.1) називається *лінійним*, якщо воно першого степеня відносно шуканої функції $u(x, y)$ та всіх її похідних, тобто воно може бути записане у вигляді

$$\begin{aligned} &A(x, y)u_{xx} + 2B(x, y)u_{xy} + C(x, y)u_{yy} + \\ &+ a(x, y)u_x + 2b(x, y)u_y + c(x, y)u = f(x, y), \end{aligned} \quad (8.2)$$

де коефіцієнти A, B, C та a, b, c , а також функція f можуть залежати лише від x та y . Якщо коефіцієнти A, B, C та a, b, c не залежать від аргументів x та y , то рівняння (8.2) є лінійним диференціальним рівнянням зі сталими коефіцієнтами.

При аналізі диференціальних рівнянь в частинних похідних розглядають величину $D = AC - B^2$ – *дискримінант* рівняння. Залежно від його знаку диференціальне рівняння (8.2) належить до одного з таких типів:

$D > 0$ – *еліптичний* тип,

$D = 0$ – *параболічний* тип,

$D < 0$ – *гіперболічний* тип

та, якщо D не зберігає сталого знаку, – *змішаний* тип.

8.2. Параболічні диференціальні рівняння в частинних похідних

Застосування чисельних методів для знаходження розв'язків диференціальних рівнянь в частинних похідних характеризується великою різноманітністю.

Далі будемо розглядати диференціальні рівняння в частинних похідних параболічного типу.

Диференціальне рівняння в частинних похідних у загальному випадку має нескінченну множину розв'язків. Для знаходження конкретного розв'язку, пов'язаного з фізичним, технічним або економічним процесом, до рівняння необхідно висунути додаткові умови.

Ця додаткова інформація часто має вигляд *початкової умови* або *крайових (межових) умов*.

Умова, що стосується початкового моменту часу, називається *початковою*.

Умови, що стосуються фіксованого значення координат (як правило, це координати межових точок), називаються *межовими*.

Розглянемо однорідний тонкий стрижень, що розміщений уздовж осі Ox . Температура $T = T(x, t)$ точки з абсцисою x для кожного моменту часу t задовольняє рівнянню *теплопровідності*

$$T_t(x, t) + qT_{xx}(x, t) = f(x, t), \quad (8.3)$$

де q – стала, яка залежить від якості матеріалу стрижня та $f(x, t)$ – функція, пов'язана з розподілом джерела теплоти.

Нехай у початковий момент часу $t = 0$ задано розподіл температури вздовж осі Ox

$$T(x, 0) = T_0(x) \quad (8.4)$$

і закони зміни температури на межах $x_{\min} = 0$ та $x_{\max} = L$:

$$T(0, t) = \varphi(t), \quad (8.5a)$$

$$T(L, t) = \psi(t). \quad (8.5b)$$

Знаходження розв'язку $T = T(x, t)$ рівняння (8.3), яке задовольняє умовам (8.4)–(8.5), називається *задачею Коші*.

У задачі Коші потрібно знайти розподіл температури $T = T(x, t)$ уздовж стрижня в будь-який момент часу t .

8.3. Метод сіток розв'язування параболічного диференціального рівняння в частинних похідних

Найпоширенішим чисельним методом розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних є *кінцево-різницевий метод сіток*.

Розглянемо цей метод на прикладі звичайного рівняння

$$T_t(x, t) = T_{xx}(x, t) \quad (8.6)$$

з умовами (8.4) та (8.5). Для цього використаємо просторово-часову систему координат (x, t) . У півсмузі $t > 0$, $0 \leq x \leq L$ побудуємо *прямокутну сітку* (рис. 8.1)

$$x = x_n = nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (8.7)$$

$$t = t_m = m\tau, \quad m = 0, 1, 2, \dots, M.$$

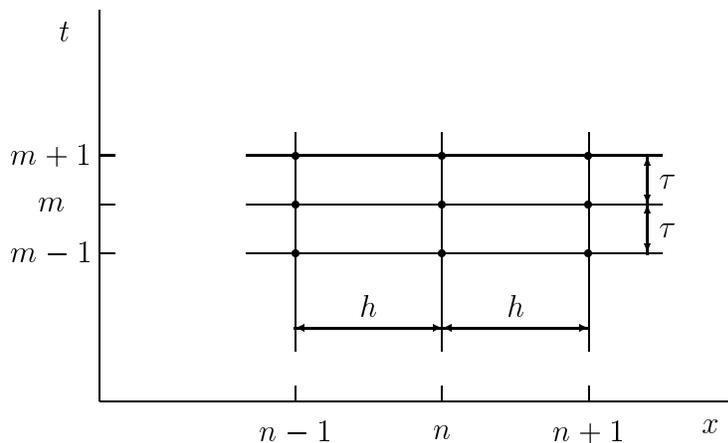


Рисунок 8.1 — Приклад просторово-часової сітки: h – крок по просторовій змінній x , τ – крок по часовій змінній t

де $h = L/N$ – крок уздовж осі x та $\tau = h^2/2$ – крок уздовж осі t .

Для набору просторово-часових вузлів у прямокутній сітці позначимо

$$T(x_n, t_m) = T_{n,m}. \quad (8.8)$$

Використаємо тепер таку *кінцево-різницеву апроксимацію похідних*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} &\approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}); \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n+1,m} - T_{n,m}); \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}). \end{aligned} \quad (8.9)$$

Тоді, замінюючи рівняння (8.6) кінцево-різницеvim рівнянням, одержуємо

$$\frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}) = \frac{1}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}),$$

що дає

$$T_{n,m+1} = T_{n,m} + \frac{\tau}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}). \quad (8.10)$$

З (8.10) бачимо, що коли відомі значення функції $T(x, t)$ у точках m -го шару $t = m\tau$, то за допомогою цієї формули можна *рекурентно* обчислити значення $T(x, t)$ у точках наступного $(m + 1)$ -го шару $t = (m + 1)\tau$. Для початкового шару $t = 0$ значення $T(x, t)$ визначаються з початкових умов із заданою функцією T_0 :

$$T(x_n, 0) = T_0(x_n), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (8.11)$$

Для значень функції $T(x, t)$ у межових вузлах $(0, t_m)$ використовуються межові умови

$$T(0, t_m) = \varphi(t_m), \quad T(L, t_m) = \psi(t_m), \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (8.12)$$

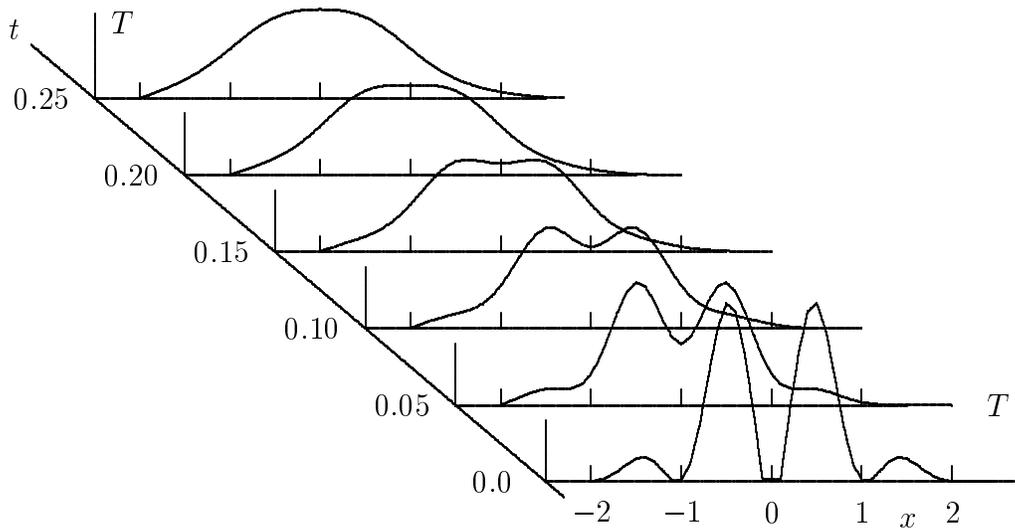


Рисунок 8.2 — Еволюція чисельного розв'язку $T(x, t)$ диференціального рівняння в частинних похідних

Використовуючи (8.10) та (8.12), за формулою (8.9) послідовно обчислюємо $T(x_n, t_1)$ – значення шуканої функції у вузлах першої смуги; потім $T(x_n, t_2)$ і далі до $T(x_n, t_M)$. У результаті одержимо значення двовимірного масиву $\{T\}$ шуканої функції, які визначені на аргументній сітці (8.7).

На рис. 8.2 подано приклад розв'язання параболічного диференціального рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} T = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T$$

з початковою умовою $T(x, 0) = 3 \sin^2(3x) \exp(-x^2)$. Для алгоритму були вибрані кроки: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$.

8.4. Апроксимаційні шаблони для перших та других частинних похідних

Кусково-різницеві апроксимації для частинних похідних є найбільш розповсюдженим підходом до чисельного інтегрування диференціальних рівнянь у частинних похідних. Частинні похідні замінюються відповідними різницевиими співвідношеннями (центрованими або нецентрованими) по відповідних незалежних змінних.

З простих елементів будуються більш складні обчислювальні шаблони для диференціальних рівнянь. Складні шаблони будуються суперпозицією відповідних обчислювальних шаблонів. Таким чином одержують шаблони для комбінацій різних частинних похідних високого порядку. Для побудови більш точних (тобто, що мають меншу похибку апроксимації) шаблонів необхідно використовувати більшу кількість вузлів.

З метою наочного подання кусково-різницевих апроксимацій виду (8.9) використовують шаблони, рисунки для яких наводяться нижче. В цих шаблонах у центрі

кожного кола вказуються коефіцієнти апроксимацій, що використовуються.

Домовимось, що горизонтальний напрямок відповідає змінній x , а вертикальний – другій змінній t . Додатному приросту по вертикальній (або горизонтальній) лінії відповідає верхній (правий) кінець, від’ємному – нижній (лівий) кінець. Центральному колу відповідає вузол сітки з координатами (n, m) .

Наведемо шаблони для частинних похідних за незалежною змінною x .

Для *першої* похідної (рис. 8.3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n,m} - T_{n-1,m}) = \frac{1}{h} \times \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{+1} \text{---} \textcircled{0} \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n+1,m} - T_{n,m}) = \frac{1}{h} \times \textcircled{0} \text{---} \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{+1} \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{2h} (T_{n+1,m} - T_{n-1,m}) = \frac{1}{2h} \times \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{0} \text{---} \textcircled{+1} \end{aligned}$$

Рисунок 8.3 — Апроксимаційні шаблони першої похідної по x

Для *другої* (центрована апроксимація) похідної (рис. 8.4):

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T_{n,m} \approx \frac{T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}}{h^2} \approx \frac{1}{h^2} \times \textcircled{+1} \text{---} \textcircled{-2} \text{---} \textcircled{+1}$$

Рисунок 8.4 — Апроксимаційний шаблон другої похідної по x

Наведені обчислювальні шаблони містять тільки горизонтальні елементи, оскільки часова змінна t є фіксованою.

Перші два шаблони для $\partial T_{n,m}/\partial x$ є нецентрованими (верхній та середній), останній шаблон є центрованим. Вибір з цих шаблонів пов’язаний з місцем координати x , в якій обчислюється похідна.

Наведені апроксимаційні шаблони триточкові. На практиці для підвищення точності розрахунків використовують шаблони, які містять і більшу кількість вузлів сітки, наприклад, п’ять.

Аналогічно просторовим шаблонам одержують шаблони для незалежної часової змінної t (в вертикальному напрямку).

Наведемо шаблони для частинних похідних по незалежній змінній t (рис. 8.5).

Перші два шаблони для $\partial T_{n,m}/\partial t$ є нецентрованими, останній шаблон є центрованим. Вибір з цих шаблонів пов’язаний місцем координати t , в якій обчислюється похідна.

З метою довести до мінімуму розповсюдження помилок використовують як центровані апроксимації, так і апроксимації, що побудовані на лівих або правих різностях, особливо при розрахунку межових чи початкових умов.

Наведені обчислювальні шаблони містять тільки вертикальні елементи, тому що просторова змінна x є фіксованою.

Для *першої* похідної (рис. 8.5):

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m} - T_{n,m-1}) = \frac{1}{\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{0} \\ | \\ \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-1} \end{array}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}) = \frac{1}{\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-1} \\ | \\ \textcircled{0} \end{array}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{2\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m-1}) = \frac{1}{2\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{0} \\ | \\ \textcircled{-1} \end{array}$$

Рисунок 8.5 — Апроксимаційні шаблони першої похідної по t

Для *другої* похідної (центрована апроксимація) (рис. 8.6):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau^2} (T_{n,m+1} - 2T_{n,m} + T_{n,m-1}) = \frac{1}{\tau^2} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-2} \\ | \\ \textcircled{+1} \end{array}$$

Рисунок 8.6 — Апроксимаційний шаблон другої похідної по t (центрована апроксимація)

Наведемо також апроксимаційний шаблон для *змішаної* похідної по обох незалежних змінних x та t (рис 8.7):

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{4h\tau} (T_{n+1,m+1} - T_{n+1,m-1} - T_{n-1,m+1} + T_{n-1,m-1}) = \frac{1}{4h\tau} \times \begin{array}{ccc} & \textcircled{-1} & \textcircled{+1} \\ & / \quad \backslash & \\ & \textcircled{0} & \\ & \backslash \quad / & \\ \textcircled{+1} & & \textcircled{-1} \end{array}$$

Рисунок 8.7 — Апроксимаційний шаблон другої змішаної похідної по x і t (центрована апроксимація); складові з нульовими коефіцієнтами, за винятком центрального, не вказано

При розв'язанні задач з диференціальними рівняннями в частинних похідних з трьома незалежними змінними апроксимаційні шаблони будуть аналогічно.

8.5. Стійкість кінцево-різницевої схеми для розв'язування параболічного рівняння в частинних похідних

Повернемося ще раз до початкового параболічного рівняння

$$u_t - qu_{xx} = 0, \quad (8.13)$$

де q – стала.

Оскільки існують похибки апроксимації, пов'язані з кроками в часі та просторі, вивчимо ефективність і стійкість кінцево-різницевого методу розв'язання цього рівняння. Для аналізу стійкості введемо *Фур'є-моду* залежної змінної

$$u(x, t) = U(t) \exp(imx) \quad (8.14)$$

($i = \sqrt{-1}$ – уявна одиниця) і підставимо цю функціональну форму у різницеve рівняння

$$u_{n,m+1} = u_{n,m} + \frac{q\tau}{h^2} (u_{n+1,m} - 2u_{n,m} + u_{n-1,m}). \quad (8.15)$$

Це дає

$$\begin{aligned} U_{m+1} \exp(imx_n) &= \\ &= U_m \exp(imx_n) + \frac{q\tau}{h^2} U_m [\exp(imx_{n+1}) - 2\exp(imx_n) + \exp(imx_{n-1})], \end{aligned}$$

або, оскільки $x_n = nh$,

$$U_{m+1} = U_m \left(1 + 2 \frac{q\tau}{h^2} (\cos(mh) - 1) \right). \quad (8.16)$$

Рівняння (8.16) пов'язує амплітуду Фур'є-моди на послідовних часових шарах. Фур'є-моді відповідає множник переходу для m -го шару

$$g_m = 1 - 4q \frac{\tau}{h^2} \sin^2(mh/2). \quad (8.17)$$

Необхідною та достатньою умовою *стійкості* схеми розв'язання, що розглядається, є умова

$$g_m < 1 + O(\tau),$$

справедлива для всіх мод. З (8.17) маємо

$$\left| 1 - 4q \frac{\tau}{h^2} \sin^2(mh/2) \right| < 1.$$

Узявши максимальне значення величини $\sin^2(mh/2)$, одержимо умову стійкості у вигляді

$$\tau < 0,5 h^2/q. \quad (8.18)$$

Таким чином, для того, щоб забезпечити стійкість чисельного алгоритму розв'язання, необхідно вибрати часовий крок τ менший, ніж максимально припустимий крок (8.18). Нерівність такого роду, яка містить гарантію стійкості методу, називається *умовою Куранта-Фридрікса-Леві*.

У схемі, що розглядається, точність за часовим кроком має порядок $O(\tau)$, а за просторовим – порядок $O(h^2)$.

8.6. Похибка методу сіток

У параболічному диференціальному рівнянні в частинних похідних

$$\frac{\partial}{\partial t} U = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U \quad (8.19)$$

введемо, як і раніше, сітку :

$$\begin{aligned} x = x_n = nh, & \quad n = 0, 1, 2, \dots, N, \\ t = t_m = m\tau, & \quad m = 0, 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (8.20)$$

де $\tau = sh^2$, а параметр s – стала, значення якої визначимо нижче.

Як було показано вище, диференціальні оператори $\partial/\partial x$ та $\partial/\partial t$ при побудові чисельного алгоритму апроксимуються кінцево-різницеви операторами. Заміна диференціальних операторів на їх різницеві аналоги вносить похибки в чисельний розв'язок рівняння. Оскільки є помилки апроксимації, пов'язані з кроками за часом і в просторі, розглянемо ефективність і стійкість кінцево-різницевого методу розв'язання цього рівняння. Величини h (крок уздовж осі x) та τ (крок уздовж осі t) різні. Позначимо $u_{n,m} = U(x_n, t_m)$ та, замінивши (8.19) кінцево-різницеви рівнянням, одержимо

$$\frac{1}{sh^2} (u_{n,m+1} - u_{n,m}) = \frac{1}{h^2} (u_{n-1,m} - 2u_{n,m} + u_{n+1,m}),$$

що дає

$$u_{n,m+1} = su_{n-1,m} + (1 - 2s)u_{n,m} + su_{n+1,m}. \quad (8.21)$$

Диференціальний оператор позначимо

$$L[u] = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \frac{\partial}{\partial t} u, \quad (8.22)$$

а диференціально-різницеви оператор

$$L_h[u] = \frac{1}{h^2} (u_{n-1,m} - 2u_{n,m} + u_{n+1,m}) - (u_{n,m+1} - u_{n,m}), \quad (8.23)$$

який відповідає диференціальному оператору $L[u]$.

Різниця

$$R_h[u] = L_h[u] - L[u] \quad (8.24)$$

називається *похибкою апроксимації*. Вона виникає при заміні оператора $L[u]$ оператором $L_h[u]$. У вузлах сітки $L[u] = 0$ та $R_h[u] = L[u]$. Для визначення цієї похибки врахуємо, що

$$\begin{aligned} u_{n+1,m} &= u(x_n + h, t_m); \\ u_{n-1,m} &= u(x_n - h, t_m), \\ u_{n,m+1} &= u(x_n, t_m + sh^2). \end{aligned} \quad (8.25)$$

Розкладемо $L_h[u]$ за формулою Тейлора в околі точки (x_n, t_m) :

$$L_h[u] = h^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{s}{2} \right) \frac{\partial^4}{\partial x^4} u_{n,m} + h^4 \left(\frac{1}{360} - \frac{s^2}{6} \right) \frac{\partial^6}{\partial x^6} u_{n,m} + O(h^6) + \dots$$

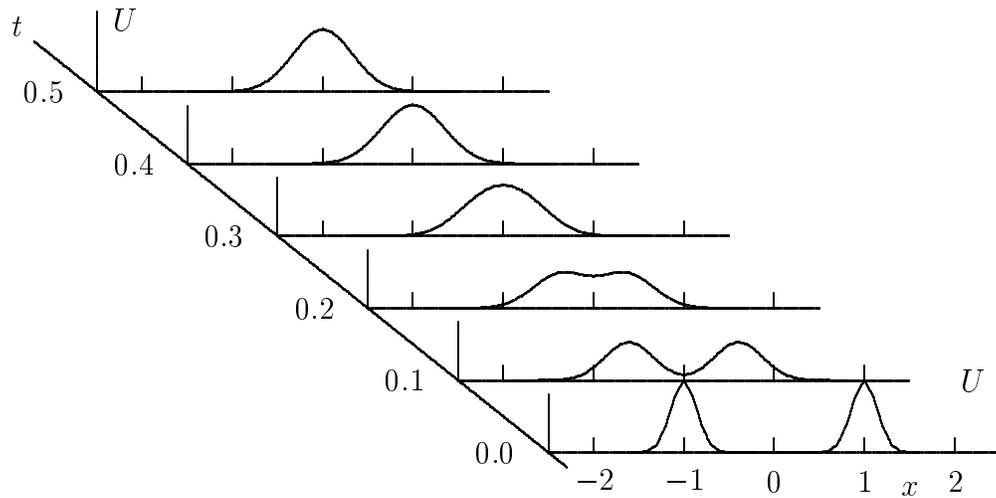


Рисунок 8.8 — Еволюція чисельного розв'язку $U(x, t)$ диференціального рівняння в частинних похідних $\partial U/\partial t = \nu \partial(xU)/\partial x + q \partial^2 U/\partial x^2$ з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-0,5(x-1)^2/\sigma^2] + \exp[-0,5(x+1)^2/\sigma^2]$ (параметри: $\nu = 5,0$; $q = 0,5$; $\sigma = 0,15$; кроки алгоритму: $h = 0,05$; $\tau = 0,001$)

Візьмемо для s значення $s = 1/6$. Тоді одержимо

$$L_h[u] = -\frac{h^4}{540} \frac{\partial^6}{\partial x^6} u_{n,m} + O(h^6). \quad (8.26)$$

При такому значенні s для похибки одержимо оцінку $R_h[u] = O(h^4)$, а при іншому значенні величини s дістанемо $R_h[u] = O(h^2)$.

Ітераційна розрахункова формула (8.21) при $s = 1/6$ приймає вигляд

$$u_{n,m+1} = \frac{1}{6} (u_{n-1,m} + 4u_{n,m} + u_{n+1,m}). \quad (8.27)$$

На рис. 8.8 поданий приклад розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних

$$\partial U/\partial t = \nu \partial(xU)/\partial x + q \partial^2 U/\partial x^2$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-0,5(x-1)^2/\sigma^2] + \exp[-0,5(x+1)^2/\sigma^2]$. Для алгоритму були вибрані кроки: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$.

8.7. Різницєва схема для розв'язування рівняння Шредінгера

Велику кількість задач квантової механіки можливо сформулювати в термінах розв'язування рівняння Шредінгера.

У скалярному випадку рівняння Шредінгера має вигляд

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = q \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi - V(x) \Psi, \quad (8.28)$$

де i – уявна одиниця, q – стала величина, $V(x)$ – задана потенційна функція.

Диференціальне рівняння (8.28) відрізняється від вже досліджених параболічних рівнянь множителем – уявною одиницею. Окрім розв’язку $\Psi(x, t)$ при розв’язуванні квантовомеханічних завдань ще будують залежності для зв’язаною з нею додатковою функцією $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$.

При побудові кінцево-різницевої схеми розв’язання параболічного рівняння (8.28) врахуємо, що функція $\Psi(x, t)$ є комплексновизначеною. Тому використовуємо на сітці (8.20) *двошарову апроксимацію* для часової похідної

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{n,m} \approx \frac{1}{2\tau} (\Psi_{n,m+2} - \Psi_{n,m}) \quad (8.29a)$$

та *одношарову апроксимацію* для просторової похідної

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{n,m} \approx \frac{1}{h^2} (\Psi_{n+1,m} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n-1,m}). \quad (8.29b)$$

Тоді одержимо алгоритм ($0 \leq n \leq N$, $0 \leq m \leq M$)

$$\Psi_{n,m+2} = \Psi_{n,m} + \frac{2i\tau q}{h^2} (\Psi_{n+1,m} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n-1,m}) - 2i\tau V(x_n) \Psi_{n,m}, \quad (8.30)$$

у якому задану початкову умову $\Psi(x, 0)$ потрібно реалізувати двічі для заповнення значень $\Psi_{n,0}$ та $\Psi_{n,1}$.

Умову стійкості кінцево-різницевої схеми для розв’язання рівняння Шредінгера визначимо, зображуючи, як це було подано вище, функцію $\Psi(x, t)$ у вигляді розкладання за просторовими модами Фур’є. Для моди з номером k маємо $\Psi(x, t) = U_k(t) \exp(ikx)$, де $U_k(t)$ – її амплітуда. Маючи на увазі дослідження стійкості, опустимо у (8.28) додаток $V(x)\Psi(x, t)$. Тоді кінцево-різницевий аналог рівняння (8.29) для k -ї амплітуди має вигляд

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i\tau} \left[u_{k,m+1} \exp(i(m+1)x_k) - u_{k,m-1} \exp(i(m-1)x_k) \right] = \\ & = \frac{q}{h^2} u_{k,m} \left[(\exp(imx_{k-1}) - 2\exp(imx_k) + \exp(imx_{k+1})) \right]. \end{aligned}$$

Позначимо $\rho_m = u_{k,m} \exp(ix_k)$. Тоді після перетворень для цієї нової амплітуди одержимо різницеве рівняння

$$\rho_{m+1} - \rho_{m-1} = -\frac{4iq\tau}{h^2} \sin^2(mh/2). \quad (8.31)$$

Маючи на увазі гірший випадок, замінимо $\sin^2(mh/2)$ на одиницю. Тоді розв’язання різницевого рівняння $\rho_{m+1} - \rho_{m-1} = -4iq\tau/h^2$ будемо шукати у вигляді степеневі функції $\rho = \lambda^m$. Це дає характеристичне рівняння

$$\lambda^2 + \lambda \frac{4iq\tau}{h^2} - 1 = 0, \quad (8.32)$$

розв’язок якого такий:

$$\lambda_{1,2} = -2iq\tau/h^2 \pm \sqrt{-(2q\tau/h^2)^2 + 1}. \quad (8.33)$$

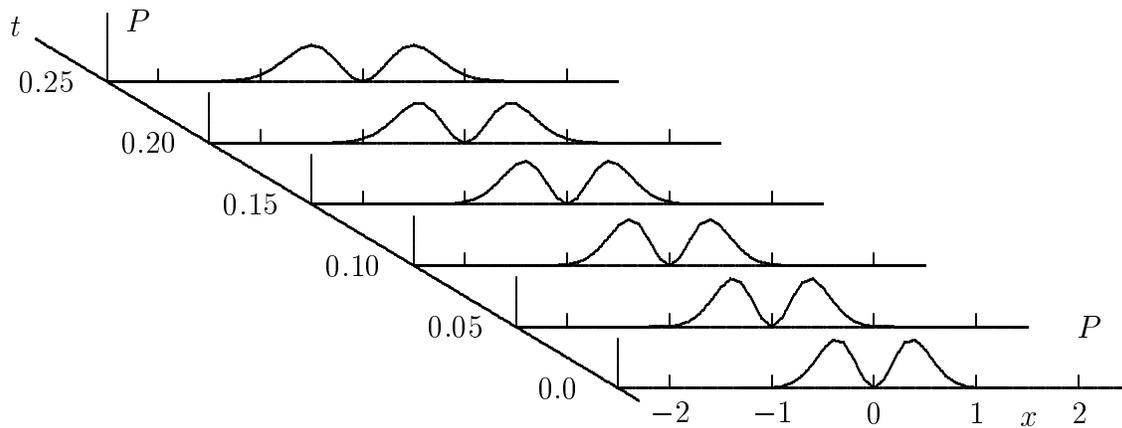


Рисунок 8.9 — Еволюція квадрата модуля $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ чисельного розв'язку диференціального рівняння Шредингера в частинних похідних $i^{-1}\partial\Psi/\partial t = 0,5\partial^2\Psi/\partial x^2 - x^2\Psi$ у потенціалі $V(x) = x^2$ з початковою умовою $\Psi(x, 0) = \sin(2x)\exp(-0,5x^2)$ (кроки алгоритму: $h = 0,05$; $\tau = 0,001$)

Умова стаціонарності $|\lambda_{1,2}|^2 = 1$ має місце тільки, якщо виконується $2q\tau/h^2 \leq 1$.

Отже, для стаціонарності розв'язання рівняння (8.28) за допомогою апроксимації (8.29) потрібне виконання нерівності

$$\tau \leq 0,5 h^2/q, \quad (8.34)$$

яка пов'язує часовий та просторовий кроки.

Інформаційне трактування одержаного співвідношення у тому, що часовий наслідок не може відбутися раніше, ніж подіє просторова причина.

На рис. 8.9 показано приклад розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних

$$i^{-1}\partial\Psi/\partial t = 0,5\partial^2\Psi/\partial x^2 - x^2\Psi$$

з початковою умовою $\Psi(x, 0) = \sin(2x)\exp(-0,5x^2)$ у потенціалі $V(x) = x^2$. Для алгоритму були вибрані кроки: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$.

8.8. Завдання на лабораторну роботу

Лабораторна робота розрахована на чотири години і містить два завдання.

З а в д а н н я 1

Напишіть програму знаходження чисельного розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних, використовуючи кінцево-різницьвий метод сіток.

У півсмузі $0 \leq t \leq t_{\max}$ та $0 \leq x \leq x_{\max}$ за допомогою програми знайдіть наблизений розв'язок рівняння

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

з початковою умовою $T(x, 0) = [(x - a)^2 + a^2]^{-1}$.

У програмі повинен бути використаний алгоритм (8.9).

Вхідні дані до програми :

x_0, x_{\max} – ліва та права межі просторового шару;

t_0, t_{\max} – початковий та кінцевий часові моменти;

N – кількість просторових вузлів;

a, q – параметри задачі;

$u(x_0, t) = \varphi(t)$ та $u(x_{\max}, t) = \psi(t)$ – крайові умови.

Результат роботи програми – масив, що містить значення шуканої функції.

Результати оформити графічно.

Варіант 1

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 6,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 0,0; N = 15;$

$a = 1,0; 2,0; 3,0; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22;$

$\varphi(t) = 0,3; \psi(t) = 0,7.$

Варіант 2

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 10,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 1,5; N = 15;$

$a = 3,0; 5,0; 7,0; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22;$

$\varphi(t) = 0,3; \psi(t) = 0,7.$

Варіант 3

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 20,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 2,0; N = 15;$

$a = 6,0; 10,0; 14,0; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22;$

$\varphi(t) = 0,3; \psi(t) = 0,7.$

З а в д а н н я 2

Напишіть програму знаходження чисельного розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних, використовуючи кінцево-різницький метод сіток.

За допомогою програми знайдіть у півсмузі $0 \leq t \leq t_{\max}$, $0 \leq x \leq x_{\max}$ наблизений розв'язок рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} U = \nu \frac{\partial}{\partial x} (xU) + q \frac{\partial^2}{\partial x^2} U$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-10(x - 10x_{\max})^2]$ та нульовою межевою умовою.

У програмі повинен бути використаний алгоритм (8.18).

Вхідні дані до програми :

x_0, x_{\max} – ліва та права межі просторового шару;

t_0, t_{\max} – початковий та кінцевий часові моменти;

N – кількість просторових вузлів,

ν, q – параметри.

Результат роботи програми – масив, що містить значення шуканої функції.
Результати оформити графічно.

Варіант 1

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 2,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 1,0; N = 15;$
 $\nu = 0,5; 1,0; 1,5; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Варіант 2

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 5,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 2,0; N = 15;$
 $\nu = 1,0; 1,5; 2,0; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Варіант 3

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 10,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 4,0; N = 15;$
 $\nu = 1,5; 2,0; 2,5; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Вказівки до оформлення роботи

Звіт про виконану роботу має містити:

- 1) зміст завдання;
- 2) використані формули;
- 3) текст програми;
- 4) протокол виконання чисельних експериментів, який містить таблицю початкових і результати чисельного розв'язування параболічного диференціального рівняння в частинних похідних, зведених у таблиці та поданих таблично;
- 5) інтерпретацію здобутих результатів.

8.9. Завдання для перевірки

1. У чому полягає суть кінцево-різницевого методу знаходження чисельного розв'язання параболічного диференціального рівняння у частинних похідних?

2. Побудуйте алгоритм розв'язання рівняння (8.3) для випадків, коли коефіцієнт q є: а) функцією часової змінної; б) функцією просторової змінної.

3. Нехай у граничних умовах (8.11) відомо, що $T(0, t_{\max}) = \alpha$, $T(L, t_{\max}) = \beta$, де α та β – сталі. Проаналізуйте хід розв'язання $T(x, t)$ рівняння (8.6) для випадку великих t .

4. Для рівняння

$$\frac{\partial T}{\partial t} = q \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

з параметром q , величина якого відмінна від одиниці, проаналізуйте похибку кінцево-різницевого методу сіток. Одержіть для цього рівняння ітераційну розрахункову формулу, аналогічну алгоритму (8.18).

5. Для рівняння

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nu \frac{\partial U}{\partial x} + \nu x U + q \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-(x - a)^2]$, де q, a – задані сталі, побудуйте кінцево-різницевий алгоритм розв'язання.

6. Функція $U = U(x, y, t)$ залежить від двох просторових аргументів x та y , а також від часового аргументу t . Для рівняння

$$\frac{\partial U}{\partial t} = q_1 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + q_2 \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$$

з початковою умовою $U(x, y, 0) = [(x + a)(y + b)]^{-1}$ побудуйте кінцево-різницевий алгоритм розв'язання, вважаючи величини q_1, q_2, a та b заданими.

7. Для рівняння Шредінгера ($i = \sqrt{-1}$ – уявна одиниця, q та r – задані сталі)

$$i \frac{\partial U}{\partial t} = q \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + r x^2 U,$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-(x - 1)^2]$ побудуйте кінцево-різницевий алгоритм знаходження розв'язку.

8. Нехай для диференціального рівняння (8.12) дана різницева схема

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(U_{n,m+1} - U_{n,m}) &= \frac{b}{h^2}(U_{n+1,m+1} - 2U_{n,m+1} + U_{n-1,m+1}) + \\ &+ \frac{1-b}{h^2}(U_{n+1,m} - 2U_{n,m} + U_{n-1,m}). \end{aligned}$$

Знайдіть, за якого значення параметра b порядок апроксимації буде другим за t і четвертим за h .

9. Для рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} U = \frac{\partial}{\partial x} \left((0, 1 + \cos^2 x) \frac{\partial}{\partial x} U \right)$$

побудуйте стійку кінцево-різницеву схему другого порядку апроксимації за t та h .

10. Побудуйте апроксимаційний шаблон для похідних функції $f(x, y)$:

$$\begin{aligned} \text{а) } \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, y); & \quad \text{б) } \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(x, y); & \quad \text{в) } \frac{\partial^4}{\partial x^4} f(x, y); \\ \text{г) } \frac{\partial^4}{\partial y^4} f(x, y); & \quad \text{д) } \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} f(x, y); & \quad \text{е) } \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(x, y). \end{aligned}$$

Додаток

Д.1. Фонд залікових завдань для самостійної роботи

Задачі цього додатку можуть бути використані при проведенні самостійних робіт. Зокрема, їх можна використати при виконанні семестрових завдань.

ЗМІСТ ЗАВДАНЬ

Завдання 1

На інтервалі $[0; 5]$ функція $x(t)$ задана за допомогою диференціального рівняння

$$\frac{d}{dt}x = (1+t)x + 1 - 3t^3 + t^2, \quad x(0) = 0.$$

Трьома різними чисельними методами знайдіть розв'язок.

Завдання 2

Задано функцію

$$f(x) = \sin\left(\frac{N+1}{2}x\right) - q \sin\left(\frac{N}{2}x\right), \quad 0 \leq x \leq 2\pi.$$

Для заданих значень параметрів — ціле N та $q \leq 1$ — чисельно відшукайте усі нулі функції $f(x)$. Зафіксувавши $N = 3$, побудуйте графік залежності знайдених нулів від q в інтервалі $0,05 \leq q \leq 0,95$.

Завдання 3

Функцію $f(x) = \ln(x^{1/2})$ задано на інтервалі $[4; 9]$ таблицею з N рівновіддалених вузлів.

Для кількості вузлів $N = 10, 15, 20$ відшукайте першу, другу та третю похідні цієї таблично заданої функції, значення яких порівняйте з їх аналітичними аналогами.

Завдання 4

Чисельно дослідіть СЛАР залежно від значень параметра λ

$$\begin{cases} (\lambda + 1)x_1 + x_2 + x_3 = \lambda^2 + 3\lambda, \\ x_1 + (\lambda + 1)x_2 + x_3 = \lambda^3 + 3\lambda, \\ x_1 + x_2 + (\lambda + 1)x_3 = \lambda^4 + 3\lambda. \end{cases}$$

Завдання 5

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла двома методами

$$J = \int_0^2 \frac{\sin(x^2)}{x^2} dx.$$

Завдання 6

Функція $f(\alpha, \beta)$ має таке інтегральне подання :

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx.$$

З точністю 0,001 знайдіть значення $f(-1/2, -2)$.

Завдання 7

За допомогою чисельних методів знайдіть розв'язок рівняння

$$y' = (1+y^2)^{1/2}(1+x^2)^{-1/2}$$

за $y_0 = 0$, $0 \leq x \leq 10$.

Завдання 8

Для функції $f(x) = x^4 - 2ax^2 + b$ вкажіть такі інтервали значень параметрів a і b , за яких $f(x)$ буде мати 0, 2 або 4 дійсних кореня. Результати підтвердіть чисельно.

Завдання 9

Для $n = 2, 3, 4$ знайдіть з точністю 0,001 значення інтеграла

$$J_n = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2(nt)}{\sin^2(t)} dt.$$

Завдання 10

Знайдіть значення інтеграла J : а) аналітично; б) чисельно з точністю 0,0001 для таких значень параметра $A = 0,1, 1,0, 10,0$

$$J = \int_1^{\infty} \frac{dx}{\operatorname{sh}(Ax)}.$$

Завдання 11

За допомогою формули Гамільтона-Келі знайдіть зворотну матрицю A^{-1} , якщо

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ q & 3 & 1 \\ 0 & q & 3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 12

Дано куб зі стороною L .

Використовуючи метод Монте–Карло, побудуйте алгоритм оцінки довжини головної діагоналі куба.

Завдання 13

Для двох (3×3) -матриць A та B відомо, що $AB = 0$ і $BA \neq 0$.

Побудуйте алгоритм отримання заданої кількості N різних пар матриць з такою властивістю.

Завдання 14

Область D завдана умовами $x \geq 0$, $y \geq 0$, $(x + y - 1) \leq 0$.

Знайдіть з точністю 0,001 значення подвійного інтеграла

$$J = \int_D \int (x^2 + y^2) dx dy.$$

Завдання 15

На інтервалі $[-2, 2]$ функція $f(x) = \arctg(x) - 1$ задана таблицею з N рівновіддалених вузлів.

Використовуючи цю таблицю даних, побудуйте інтерполяційний поліном. Для випадків $N = 7, 9, 11, 13$ знайдіть нуль отриманого полінома і порівняйте його з нулем вихідної функції.

Завдання 16

Знайдіть чисельно корені рівняння двома методами

$$\exp(-x) = q \arcsin(x), \quad q = 0, 1, 0, 2, \dots, 1, 0.$$

Завдання 17

Чисельно знайдіть 5 матриць, що комутують з матрицею

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ q & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 18

Дано дві кулі радіусом R_1 та R_2 з центрами (x_1, y_1, z_1) та (x_2, y_2, z_2) відповідно.

Припускаючи ці 8 величин заданими, знайдіть за допомогою методу Монте–Карло об'єм їх області перекриття. Відповідь порівняйте з результатом, одержаним аналітично.

Завдання 19

Розв'яжіть чисельно систему нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} \sin(x + 1) - 1 = 1, \\ 2x + \cos(y) = 2. \end{cases}$$

Завдання 20

Знайдіть значення параметра q , за яких матриця A має ранг, що дорівнює 1, 2 і 3,

$$A = \begin{pmatrix} 1,7 & 0,8 & 0,9 \\ 0,8 & 0,7 & 0,3 \\ 1,5 & 1,5 & q \end{pmatrix}.$$

Завдання 21

Для заданої матриці

$$A = \begin{pmatrix} 1,7 & 0,8 & 0,9 \\ 0,8 & 0,7 & 0,3 \\ 1,5 & 1,5 & q \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3, 4, 5,$$

знайдіть матриці $B = \ln(A)$ та $C = \exp(B)$.

Завдання 22

Знайдіть чисельно усі нулі функції двома методами

$$f(x) = x^3 + \alpha x^2 - \beta^2 x - \beta^3, \quad 1 \leq \beta \leq 2, \quad \Delta\beta = 0,1.$$

Завдання 23

Для послідовності $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ відомі початкові умови $u_0 = \alpha$, $u_1 = \beta$, а також рекурентне співвідношення

$$u_n = u_{n-1} + u_{n-2}, \quad n = 2, 3, \dots, N.$$

Знайдіть за даного n аналітичний вираз для u_n . За $\alpha = 1, \beta = 1$ і $\alpha = 0, \beta = 1$ результат перевірте чисельно для $N = 14$.

Завдання 24

На інтервалі $[0, 3]$ функція $f(x) = (1 + x^2)^{-1} - \frac{1}{2}$ задана таблицею з N рівновіддалених вузлів.

Використовуючи цю таблицю, побудуйте інтерполяційний поліном. Для випадків $N = 7, 9, 11, 13$ знайдіть нуль отриманого полінома і порівняйте його з нулем вихідної функції.

Завдання 25

Рівняння руху першої точки ("зайця") таке:

$$dy/dx = 2x, \quad y(0) = 0, \quad 0 \leq x \leq 10.$$

Друга точка ("вовк"), починаючи з місця $(10; 0)$, завжди має швидкість, що за модулем дорівнює V . У кожний момент часу друга точка рухається у напрямку до першої.

Враховуючи параметр V заданим, знайдіть чисельно графіки руху цих точок. Знайдіть, за яких значень швидкості V друга точка обов'язково дожене першу.

Завдання 26

Для матриці

$$A = \begin{pmatrix} 1,0 & 2,9 & q \\ 2,4 & 1,0 & 1,4 \\ 1,4 & 1,4 & 3,4 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2,$$

знайдіть матриці $B = \sin(A)$ та $C = \cos(B)$, спектри яких порівняйте.

Завдання 27

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла двома методами

$$J = \int_0^1 (1+t^2)(4+t^2)^{-1/2} dt.$$

Отримане значення порівняйте з його аналітичним аналогом.

Завдання 28

Функція $f(\alpha, \beta)$ має таке інтегральне подання:

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx.$$

З точністю 0,001 знайдіть значення $f(5, 1/5)$.

Завдання 29

Знайдіть з точністю 0,001 значення подвійного інтеграла

$$J = \iint_D \exp(-x^2 - y^2) dx dy,$$

якщо областю D є коло $(x^2 + y^2) \leq 4$.

Завдання 30

Знайдіть значення інтеграла

$$J = \int_0^{\pi/4} \sin(x^2) dx$$

за формулою Чебишова та за формулою Гаусса. Результати порівняйте.

Завдання 31

Враховуючи, що $-1 \leq \beta \leq 1$ та $\Delta\beta = 0, 1$, за допомогою методу Монте-Карло знайдіть нулі функції $f(x) = x^2 + x + \beta$.

Завдання 32

Знайдіть усі нулі функції $f(x) = x^3 - 5x + b$, враховуючи, що $0 \leq b \leq 2$ і $\Delta b = 0, 1$.

Завдання 33

Дані значення аргументів x_1, x_2, x_3, x_4 та відповідні їм значення функції y_1, y_2, y_3, y_4 . Через вузли $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4)$ проведена парабола $P_3(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$.

Знайдіть коефіцієнти полінома $P_3(x)$: а) аналітично; б) чисельно, рахуючи координати вузлів заданими.

Завдання 34

Знайдіть чисельно з точністю 0,0001 значення інтегралів

$$J_1 = \int_0^{\infty} (1+x^2)^{-1} dx, \quad J_2 = \int_0^{\infty} (1+x^3)^{-1}(1+x^2)^{-1} dx.$$

Результати порівняйте.

Завдання 35

Двома методами знайдіть чисельно корені рівняння

$$x^3 - 3x^2 - 9x + k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, 10.$$

Завдання 36

Для $n = 2, 3, 4$ знайдіть з точністю 0,0001 значення інтеграла

$$J_n = \int_0^n (nx - x^2)^{1/2} dx.$$

Завдання 37

Знайдіть чисельно розв'язок диференціального рівняння

$$y'' + (1 - y^2)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq X,$$

де $X = 2, 4, 6, 8, 10$, з умовами $y_0 = 0, y'_0 = 1$.

Побудуйте графічні залежності.

Завдання 38

З точністю 0,0001 знайдіть значення інтеграла

$$J = \int_0^{\infty} (1+x^3)^{-1} dx,$$

яке порівняйте з його аналітичним аналогом.

Завдання 39

Функція $f(x) = 1/\operatorname{ch}(x)$ на інтервалі $[-5; 5]$ зображена масивом з $N = 51$ рівновіддалених вузлів.

За допомогою чисельного диференціювання визначте координати: а) екстремуму; б) точок перегину.

Завдання 40

На інтервалі $[4; 9]$ функція $f(x) = \exp(x^{1/2})$ задана набором з N рівновіддалених вузлів.

Для кількості вузлів $N = 10, 15, 20, 25$ знайдіть першу, другу та третю похідні, значення яких порівняйте з їх аналітичними аналогами.

Завдання 41

На колі радіусом $R = 2$ вибрано та зафіксовано дві точки A і B .

За допомогою методу Монте–Карло оцініть довжину L хорди, яка поєднує ці точки.

Завдання 42

За допомогою формули Гамільтона–Келі знайдіть зворотну матрицю A^{-1} , якщо

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ q & 3 & 1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 43

З точністю 0,001 знайдіть значення подвійного інтеграла

$$J = \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy \exp(-x^2 - y^2).$$

Завдання 44

Знайдіть усі нулі функції комплексновизначеного аргументу z

$$f(z) = (z - q)^2 z^* - (z^* - q)^2 z, \quad q = 0, 25; 0, 50; 0, 75.$$

Завдання 45

На інтервалі $(0 \leq x \leq 4\pi)$ за допомогою чисельних методів знайдіть розв'язок рівняння

$$y'' - 2y' + y = 2 \sin x, \quad y_0 = 0, \quad y'_0 = 0.$$

Завдання 46

Знайдіть чисельно на інтервалі $[0, 4\pi]$ усі нулі функції

$$f(x) = A \cos(x) + \sin(x^2),$$

враховуючи, що параметр A змінюється в інтервалі $[0, 2]$ з кроком 0,2.

Завдання 47

Дано дві 2×2 -матриці A та B .

Побудуйте алгоритм розв'язання рівняння $AX + XA^T = B$. Алгоритм перевірте чисельно.

Завдання 48

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла

$$J = \int_0^{\pi/3} (1 - \sin^4 x)^{1/2} dx.$$

Завдання 49

Дано матрицю A таку, що

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналітично та чисельними методами знайдіть: а) матрицю A ; б) матрицю $\operatorname{ch}(\pi A)$; в) матрицю $\operatorname{sh}(\pi A)$.

Завдання 50

Чисельно дослідіть СЛАР залежно від значення параметра λ

$$\begin{cases} \lambda x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + \lambda x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + x_2 + \lambda x_3 = 1. \end{cases}$$

Завдання 51

На інтервалі $[-3\pi/2; 3\pi/2]$ знайдіть з точністю 0,0001 нулі функції

$$f(x) = 0,03 \operatorname{tg}(x) - 10x.$$

Завдання 52

Розв'яжіть чисельно систему нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} \sin(y - 0,5) - x = 1,2, \\ \cos(x - 2,0) + y = 0,0. \end{cases}$$

Завдання 53

Розв'яжіть чисельно систему нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} \sin(y) - 2x = 2,5, \\ \cos(x - 1) + y = 1,5. \end{cases}$$

Завдання 54

Точку масою m при $t = 0$ на висоті h кидають вздовж вертикалі з початковою швидкістю v_0 . Відомо, що в момент часу $t = T$ ця точка знаходиться на нульовій висоті.

Знайдіть співвідношення між параметрами v_0 та T , за якого це можливо. Перевірте результат чисельно, описавши рух точки диференціальним рівнянням.

Завдання 55

На інтервалі $(0 \leq t \leq 50\pi)$ розв'яжіть аналітично та чисельно систему диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} dx/dt = -y, & x(0) = 1, 0, \\ dy/dt = x, & y(0) = 1, 0. \end{cases}$$

Значення у початковій та кінцевих точках порівняйте.

Завдання 56

Для $N = 4, 5, 6$ та 7 знайдіть детермінант матриці A , якщо відомо, що $A_{nm} = \min(n, m)$, $1 \leq n, m \leq N$.

Завдання 57

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла

$$J = \int_0^1 \sqrt{-\ln t} dt.$$

Завдання 58

В інтервалі $0 \leq t \leq 6\pi$ знайдіть чисельно розв'язання диференціального рівняння

$$y''' + 3y'' + 4y' + 2y = \sin(2t), \quad y_0 = 0, \quad y'_0 = 0, \quad y''_0 = 0.$$

Завдання 59

На інтервалі $[-2\pi; 2\pi]$ знайдіть нулі функції $f(x) = \operatorname{ctg}(x) + bx$ двома методами, якщо $-3 \leq b \leq 3$ з кроком $\Delta b = 0, 1$.

Завдання 60

Для функції $f(\alpha, \beta)$, яка має таке інтегральне подання

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx,$$

вказіть чисельно, що $f(2, 4) = f(1/2, 1/4)$.

Завдання 61

Знайдіть розв'язок системи рівнянь (при $A = 3, 4, 5, 6$)

$$\begin{cases} 2x^2 + 3y^2 - 6y - A = 0, \\ 3x^2 - 3y^2 + 4x - 2 = 0. \end{cases}$$

Завдання 62

Для $N = 4, 5, 6$ та 7 знайдіть детермінант матриці A , якщо відомо, що $A_{nm} = |n - m|$, $1 \leq n, m \leq N$.

Завдання 63

Подано тіло, що має форму тора. Радіус осі кола тора дорівнює R_1 , радіус кола, отриманий при розсіканні тора, дорівнює R_2 .

Враховуючи параметри R_1 і R_2 заданими, знайдіть об'єм тора: а) аналітично; б) за допомогою методу Монте-Карло.

Завдання 64

Знайдіть значення контурного інтеграла

$$J = (2\pi i)^{-1} \oint (z - 3/4)^{-1} \sin(2\pi z) dz,$$

узявши два різних контури, які містять точку $z = 3/4$.

Завдання 65

Для матриці

$$A = \begin{pmatrix} 2,7 & 0,8 & 0,9 \\ 2,8 & 0,7 & 0,3 \\ 2,5 & 1,5 & q \end{pmatrix}$$

знайдіть значення q , за яких матриця A має ранг, рівний 1, 2, 3.

Завдання 66

Для даної матриці

$$A = \begin{pmatrix} 0,7 & 1,6 & 0,3 \\ 1,6 & -q & 0,8 \\ 0,8 & 0,3 & 1,6 \end{pmatrix}, \quad q = -1, -2, -3,$$

знайдіть матриці $B = \operatorname{arcsh}(A)$ та $C = \operatorname{sh}(B)$. Спектри знайдених матриць порівняйте.

Завдання 67

Знайдіть з точністю 0,001 значення інтеграла

$$J = \int_{\pi/3}^{\pi/2} \frac{1}{\sin^3 t} dt.$$

Завдання 68

Знайдіть з точністю 0,001 значення подвійного інтеграла

$$J = \iint_D x(1 - x^2 - y^2)^{1/2} dx dy,$$

якщо областю D є коло $(x^2 + y^2) \leq 1$.

Завдання 69

Для $N = 4, 5, 6$ та 7 знайдіть детермінант матриці A , якщо відомо, що $A_{nm} = \max(n, m)$, $1 \leq n, m \leq N$.

Завдання 70

Тіло рухається за законом

$$d^2x/dt^2 = \alpha t + \beta, \quad \alpha, \beta = \text{const.}$$

Відомо, що $x(0) = 0$ та $x(T) = L$, де T та L задані.

Знайдіть співвідношення, що пов'язують параметри α та β , виконання якого забезпечує при заданих початкових умовах справедливості умов на фініші. Отриманий аналітично результат перевірте, чисельно розв'язавши рівняння руху тіла.

Завдання 71

Для даної матриці

$$A = \begin{pmatrix} 2,5 & 1,0 & 1,5 \\ q & 3,0 & 1,5 \\ 1,5 & 1,5 & 3,5 \end{pmatrix}, \quad q = 5, 6, 7,$$

знайдіть матриці $B = \sin(A)$ і $C = \arcsin(B)$. Спектри визначених матриць порівняйте.

Завдання 72

Розв'яжіть чисельно систему нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} \cos(y - 1) + x = 1,0, \\ \sin(x + 1) + 2y = 1,6. \end{cases}$$

Завдання 73

Чисельно знайдіть значення інтеграла

$$J(k) = \int_0^{\pi/2} (1 - k^2 \sin^2 x)^{-1/2} dx$$

для $0 \leq k \leq 0,9$, якщо $\Delta k = 0,1$.

Завдання 74

Дана матриця

$$A = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix}.$$

Для параметрів $\varphi = \pi/6$ та $\varphi = \pi/4$ знайдіть A^{100} : а) за допомогою характеристичного багаточлена; б) чисельно. Результати порівняйте.

Завдання 75

Знайдіть спектр наступної матриці:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & q & 0 & 0 \\ q & 1 & q & 0 \\ 0 & q & 1 & q \\ 0 & 0 & q & 1 \end{pmatrix}, \quad q = 0, \frac{1}{4}, \frac{2}{4}, \frac{3}{4}, 1.$$

Завдання 76

Поданий квадрат зі стороною $L = 2$. Проведено чотири кола кожне радіусом $R = L$, з центрами, які визначені у вершинах квадрата.

Знайдіть площу геометричного місця точок, спільного для усіх чотирьох кіл:
а) аналітично, б) методом Монте-Карло.

Завдання 77

Знайдіть чисельно розв'язок диференціального рівняння

$$Ay'' + (1 - y^2)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

де $A = 2, 4, 6, 8, 10$, за умов $y_0 = 0$, $y'_0 = 1$. Побудуйте графічні залежності.

Завдання 78

Чисельно знайдіть усі матриці, які комутують з матрицею

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & q \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 79

Використовуючи інтерполяційний поліном Лагранжа з кількістю вузлів $N = 10$, знайдіть з точністю 0,0001 нуль функції $y(x) = \sin(x)$ в інтервалі $[2; 4]$.

Завдання 80

На інтервалі $[2; 3]$ функція $f(x) = \ln(x - 1,5)$ подана таблицею з N рівновіддалених вузлів.

Використовуючи цю таблицю, побудуйте інтерполяційний поліном. Для випадків $N = 7, 9, 11$ знайдіть нуль знайденого полінома і порівняйте його з нулем вихідної функції.

Завдання 81

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла двома методами

$$J = \int_0^{\pi/3} (1 - \sin^2 x)^{-1/2} dx.$$

Завдання 82

Функція $f(x) = \cos(x^{1/2})$ подана на інтервалі $[4; 9]$ таблицею з N рівновіддалених вузлів.

Для кількості вузлів $N = 10, 15, 20$ знайдіть першу, другу і третю похідні цієї таблично заданої функції, значення яких порівняйте з їх аналітичними аналогами.

Завдання 83

Двома методами визначте чисельно корені рівняння

$$A \exp(-x^2) = \operatorname{ch}(x), \quad A = 10, 12, \dots, 20.$$

Завдання 84

Функція $f(x) = \exp(-x^2)$ на інтервалі $[-5; 5]$ зображена масивом з $N = 21$ рівновіддалених вузлів.

За допомогою чисельного диференціювання визначте координати: а) екстремуму; б) точок перегину.

Завдання 85

Обчисліть інтеграл

$$J = \frac{8}{3} \int_{-1}^1 x^4 (1-x^2)^{-1/2} dx$$

а) аналітично; б) чисельно.

Завдання 86

Чисельно знайдіть усі матриці, які комутують з матрицею

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ q & 3 & 1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 87

Функція $y(x)$ має таке інтегральне подання:

$$y(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt.$$

В аргументному інтервалі $[0; 3]$ з кроком $\Delta x = 0,1$ побудуйте чисельний алгоритм, який дозволяє знайти значення функції $y(x)$.

Завдання 88

На інтервалі $[1; 2]$ розв'яжіть аналітично і чисельно систему

$$\begin{cases} dy/dx = z - y, & y(1) = 1, \\ dz/dx = z + y, & z(1) = 1. \end{cases}$$

Завдання 89

На інтервалі $0 \leq x \leq 4$ за допомогою чисельних методів знайдіть розв'язок рівняння

$$y'' - 2y' + y = 2\text{sh}(x), \quad y_0 = 0, \quad y'_0 = 0.$$

Завдання 90

За допомогою формули Гамільтона-Келі знайдіть зворотну матрицю A^{-1} , якщо

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 \\ q & 3 & 1 & 0 \\ 0 & q & 3 & 1 \\ 0 & 0 & q & 3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 91

Двома методами визначте чисельно корені рівняння

$$\ln(x) + (x + 1)^3 + k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, 10.$$

Завдання 92

За допомогою чисельного інтегрування і методу діхотомії розв'яжіть рівняння

$$\int_0^x \exp(t) dt = qx, \quad q = 1, 2, 3, 4.$$

Завдання 93

На інтервалі $[0; 2]$ розв'яжіть чисельно рівняння

$$y'' + 0,1y' + (1 + Ax/10)y = 0,$$

з умовами $y_0 = 1, y'_0 = 2$.

На інтервалі $0 \leq A \leq 10$ з кроком $\Delta A = 0,5$ побудуйте залежність $y(2)$ як функцію A .

Завдання 94

Трьома способами визначте чисельно корені рівняння

$$2x + \ln(2x + 3) = A, \quad A = 0, 1; 0, 2; \dots, 1, 0.$$

Здобуті корені порівняйте.

Завдання 95

Для матриці A знайдіть значення параметра q , за яких вона має ранг, що дорівнює 1, 2 і 3,

$$A = \begin{pmatrix} 6 & q & -1 & 2 \\ 7 & -1 & 1 & 5 \\ 8 & 10 & -6 & 1 \end{pmatrix}.$$

Завдання 96

Знайдіть чисельно розв'язок диференціального рівняння

$$Ay''' + y'' + 2y' + y = \exp(2t),$$

де $A = 1$ та 2 ; $0 \leq t \leq 1$, за умов $y_0 = 0, 1, y'_0 = 0, y''_0 = 0$.

Чисельний розв'язок порівняйте з його аналітичним аналогом.

Завдання 97

Для значень параметра $x = 1, 2, 3, 4, 5$ обчисліть двома способами з точністю 0,0001 інтеграл

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

Завдання 98

Подано дві матриці :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Знайдіть чисельно і аналітично: а) $\exp A$, $\sin(\pi A)$, $\cos(\pi A)$; б) $\exp B$, $\sin(\pi B)$, $\cos(\pi B)$.

Завдання 99

Обчисліть інтеграл

$$J(a, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

з точністю 0,001 для випадків: $a = 0$, $a = 1$ і $\sigma = 0, 1$, $\sigma = 1$.

Завдання 100

Чисельно знайдіть усі матриці, які комутують з матрицею

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ q & 3 & 1 \\ 0 & q & 3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 101

Матриця розміром (4×4) заповнена або нулями, або одиницями.

Чисельно знайдіть матрицю такого типу, визначник якої найбільший.

Те ж завдання, але для матриць розміром (5×5) та (6×6) .

Завдання 102

Подано дві матриці :

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

де $0 \leq \alpha \leq 1$, $\Delta\alpha = 0, 2$.

Отримавши характеристичний багаточлен для цих матриць, знайдіть матриці A^{-1} та B^{-1} . Результат перевірте чисельно і прямим обчисленням.

Завдання 103

За допомогою формули Гамільтона-Келі знайдіть зворотну матрицю A^{-1} , якщо

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & q \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 104

Для даної матриці знайдіть значення параметра q , за яких вона має ранг, що дорівнює 1, 2 і 3.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & q & -1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 & 5 \\ 1 & 10 & -6 & 1 \end{pmatrix}.$$

Завдання 105

Для функції

$$f(x; q) = x^{x^q} - q, \quad 0 < q < 1,$$

відомо, що на інтервалі $[0, 1]$ вона має дійсний нуль кратності 2.

Знайдіть з точністю 0,0001 значення параметра q , яке відповідає цій умові.

Завдання 106

Дана матриця A така, що

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналітично і чисельними методами знайдіть: а) матрицю A ; б) матрицю $\operatorname{ch}(\pi A)$; в) матрицю $\operatorname{sh}(\pi A)$.

Завдання 107

Знайдіть чисельно розв'язок диференціального рівняння

$$Ay''' + y'' + 2y' + y = (1 + t^2)^{-1},$$

де $A = 1, 2$; $0 \leq t \leq 1$, за умов $y_0'' = 0, 1$, $y_0' = 0$, $y_0 = 0$.

Чисельний розв'язок порівняйте з його аналітичним аналогом.

Завдання 108

Про функцію $y(x)$ відомо, що

$$\text{а) } \int_{-\infty}^{\infty} y(x) dx = 1; \quad \text{б) } \sigma^2 dy/dx + xy = 0.$$

Для $\sigma = 1$ та $\sigma = 2$ аналітично і чисельно визначте функцію $y(x)$ на інтервалі $[-5; 5]$.

Завдання 109

Знайдіть чисельно значення інтеграла та розв'язок на інтервалі $[1; 10]$ диференціального рівняння

$$J = \int_1^{10} (1 + x^2)^{-1} dx, \quad dy/dx = (1 + x^2)^{-1}, \quad y(1) = 0.$$

Отримані значення J та $y(10)$ порівняйте.

Завдання 110

Функція $f(x) = (1 + x^2)^{-1}$ на інтервалі $[-5; 5]$ зображена масивом з $N = 51$ рівновіддалених вузлів.

За допомогою чисельного диференціювання визначте координати: а) екстремуму; б) точок перегину.

Завдання 111

За допомогою формули Гамільтона–Келі знайдіть зворотні матриці A^{-1} та B^{-1} , якщо

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ q & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ q & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3.$$

Завдання 112

Знайдіть з точністю 10^{-4} значення інтеграла

$$J = \int_0^{\pi} e^{-x} \sin^2 x \, dx.$$

Завдання 113

Методом Монте–Карло знайдіть площу фігури, обмеженої кривими

$$y = \exp(-x^2), \quad y = -\exp(-x^2), \quad x = \exp(-y^2), \quad x = -\exp(-y^2).$$

Отриману площу порівняйте з її аналітичним аналогом.

Завдання 114

На інтервалі $[0; 2]$ чисельно знайдіть усі дійсні нулі функції

$$f(x) = x^{x^{0,9}} - 0,9.$$

Завдання 115

Чисельно дослідіть СЛАР в залежності від значення параметра λ

$$\begin{cases} (\lambda + 1)x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + (\lambda + 1)x_2 + x_3 = \lambda, \\ x_1 + x_2 + (\lambda + 1)x_3 = \lambda^2. \end{cases}$$

Завдання 116

Функція $f(\alpha, \beta)$ має наступне інтегральне подання:

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1 - x^2)(1 + x^2)^{-1}(1 + x^4)^{-1/2} \, dx.$$

Чисельно перевірте, що $f(1, 2) = f(-2, -1)$.

Завдання 117

Подані вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ і матриця A з елементами

$$A_{nm} = x_n x_m, \quad 1 \leq n, m \leq N.$$

Для $N = 6$ і будь-яких обраних трьох векторів $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ чисельно знайдіть $\text{rang}(A)$.

Д.2. Фонд завдань для курсової роботи

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ КУРСОВИХ РОБІТ ЗА ДИСЦИПЛІНИ — "ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ"

Ці методичні вказівки містять збірку завдань для курсових та позааудиторних робіт з дисципліни "Чисельні методи".

Мета даних методичних вказівок — виробити навички щодо побудови типових алгоритмів розв'язання основних задач чисельного аналізу, реалізації обчислювальних завдань на ЕОМ та оформлення наукового документу.

1. ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

Звіт про курсову роботу є науковим документом, в якому викладаються вичерпні відомості про виконану роботу. Матеріал, що відбирається для включення до звіту, повинен бути оброблений і систематизований.

Форма подання і оформлення документа в цілому повинні відповідати прийнятим стандартам.

Загальними вимогами до звіту є:

- чіткість побудови;
- логічна послідовність викладання матеріалу;
- стислість й чіткість формулювань;
- конкретність результатів роботи;
- доказовість висновків.

2. СТРУКТУРА ЗВІТУ

Звіт про курсову роботу повинен містити в означеній нижче послідовності:

- титульний аркуш;
- реферат (анотація);
- завдання;
- зміст;
- основну частину;
- список літератури;
- додатки.

Титульний аркуш повинен бути виконаний за стандартною формою.

У рефераті повинні бути стисло викладені основні відомості про проведену роботу з урахуванням стандартних вимог щодо його оформлення.

Основна частина звіту включає такі розділи :

- вступ;
- аналітичний огляд;
- обґрунтування обраного напрямку;
- методика виконання роботи;
- результати роботи та їх обговорення;
- заключення (висновки).

Розділ "Вступ" повинен бути присвячений стислій характеристиці стану проблеми, якій присвячена робота, а також меті роботи.

У розділі "Аналітичний огляд" необхідно систематизовано відбити стан питання, якому присвячена дана робота.

У розділі "Обґрунтування вибраного напрямку" повинно бути дано обґрунтування обраного напрямку з урахуванням конкретних умов проведення курсової роботи.

Розділ "Методика виконання роботи" повинен викладатися докладно з обґрунтуванням її вибору. Якщо в роботі застосовувались загальноприйняті методи, то їх опис дуже докладно викладати не слід. У цьому розділі необхідні посилання на відповідні джерела документальної інформації. Разом з тим, текст цього розділу повинен показати певне володіння необхідними чисельними методами.

У розділі "Результати роботи та їх обговорення" наводяться остаточні результати (у цифровій та графічній формі) й типові проміжні, що дадуть правильне уявлення про їхню якість, точність й відтворюваність. При обговоренні результатів необхідно провести порівняння їх з наявними відомими даними.

Розділ "Заключення" повинен містити стислий виклад результатів роботи та їх оцінку. В кінці "Заключення" слід зазначити, чим завершена робота: отриманням наукових даних, розробкою наукових методів та принципів дослідження, отриманням кількісних та якісних характеристик.

До списку літератури включають всі використані джерела, які слід розташувати у порядку появи посилань у тексті.

До додатків слід включати допоміжні матеріали, що при включенні їх до основної частини звіту загромождають текст. До допоміжних матеріалів відносяться :

- математичні розрахунки,
- таблиці та графіки допоміжних цифрових даних,
- роздруковки чисельних даних та листингі текстів програм.

3. ЗМІСТ ЗАВДАНЬ

Завдання 1

За допомогою чисельних алгоритмів знаходження нулів заданої функції і визначення значення однократного інтеграла знайдіть з точністю 0,0001 перші три нулі функції

$$f(z) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(t) \exp[z \cos(t)] dt.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 2

Ортогональні поліноми Чебишова першого роду $T_n(x)$ є розв'язками звичайного диференціального рівняння другого порядку

$$(1 - x^2)f''(x) - xf'(x) + n^2f(x) = 0.$$

Для $n = 1, 2, 3$ побудуйте чисельний алгоритм і знайдіть значення функції $f(x)$ на інтервалі $[0, 0; 1, 0]$ з кроком табулювання 0,02. Порівняйте знайдені значення з результатом обчислення поліномів Чебишова за допомогою явного виразу $T_n(x) = \cos[n \arccos(x)]$. Результати оформити графічно.

Завдання 3

Для полінома заданого степеня N , що має набір комплексних нулів напишіть чисельну процедуру визначення його коефіцієнтів. Задавши чисельно набір нулів, степінь та точність, знайдіть набір коефіцієнтів полінома.

Завдання 4

Для заданої квадратної матриці A відомо, що вона задовольняє рівнянню $A = E + A^{-1}$, де E — одинична матриця.

Побудуйте чисельну процедуру, що дозволить знаходити задану кількість N таких матриць, обравши при цьому вимірність K матриці рівною $K = 2, 3, 4$.

Завдання 5

Логарифмічна похідна гамма-функції Ейлера $\Gamma(x)$ задається за допомогою виразу $\Psi(x) = \frac{d}{dx} \ln[\Gamma(x)]$, а в свою чергу гамма-функція $\Gamma(x)$ визначається інтегральним поданням

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

Побудуйте чисельний алгоритм і знайдіть значення $\Gamma(x)$ в аргументному інтервалі $[1, 0; 5, 0]$ з кроком табулювання 0,25. Після цього за допомогою алгоритма чисельного диференціювання таблично заданої функції знайдіть для тих же значень аргумента значення функції $\Psi(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 6

Напишіть програму знаходження чисельного розв'язання параболічного диференціального рівняння в часинних похідних. Скористайтесь кінцево-різницеvim методом сіток.

За допомогою програми знайдіть в області $0 \leq t \leq t_{\max}$, $0 \leq x \leq x_{\max}$ розв'язок рівняння

$$\frac{\partial T}{\partial t} = q \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

з початковою умовою $T(x, 0) = [(x - a/2)^2 + a^2]^{-1}$.

Вхідні дані до програми:

x_0, x_{\max} — ліва та права межі просторового шару;

t_0, t_{\max} — початковий та кінцевий часові моменти;

N — кількість просторових вузлів;

a, q — параметри задачі;

$T(x_0, t) = \varphi(t)$ та $T(x_{\max}, t) = \psi(t)$ — межові умови.

Результат роботи програми — масив, що містить значення цієї функції. Результати оформити графічно.

Завдання 7

З точністю 0,0001 знайдіть такі значення параметра α , за яких інтеграл

$$J(\alpha) = \pi^{-1} \operatorname{ch}(\pi) \int_0^{\alpha} \frac{\cos(x)}{\operatorname{ch}(x/2)} dx$$

прийме значення, які дорівнюють 0, $1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$.

Завдання 8

Побудуйте чисельний алгоритм, що дозволить знаходити задану функцію від заданої матриці

$$A = \begin{pmatrix} q & 0,5 & 0,5 \\ 0,5 & -0,5 & 1,0 \\ 0,5 & 1,0 & q \end{pmatrix}.$$

На основі побудованого алгоритму перевірте правильність матричної тотожності $\sin^2 A + \cos^2 A = E$ при значеннях параметра q в інтервалі $[5, 0; 10, 0]$ з кроком табулювання 0,25.

Завдання 9

Ортогональні поліноми Чебишова другого роду $U_n(x)$ є розв'язками звичайного диференціального рівняння другого порядку

$$(1 - x^2)f''(x) - xf'(x) + n^2f(x) = 0.$$

Для $n = 1, 2, 3$ побудуйте чисельний алгоритм і знайдіть значення функції $f(x)$ на інтервалі $[0, 0; 1, 0]$ з кроком табулювання 0,02. Порівняйте знайдені значення з результатом обчислення поліномів Чебишова за допомогою явного виразу $U_n(x) = \sin[n \arccos(x)]$. Результати оформити графічно.

Завдання 10

Для заданої матриці A розміром N ($N = 4$ і $N = 8$) знайдіть обернену матрицю $B = A^{-1}$ двома способами: а) методом Гаусса; б) на основі кліточного розбиття. Нехай матриця $C = AB$ і E — одинична матриця. За допомогою критерію $J_N = \left(\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N (C_{nm} - E_{nm})^2 \right)^{1/2}$ порівняйте обидва означених способи знаходження оберненої матриці.

Завдання 11

Функція $y = y(x)$ визначається рівнянням

$$x^y = \varepsilon y^x, \quad 0 < \varepsilon < 1.$$

Для обраного значення ε і вибраного аргументного інтервала й крока Δx у ньому побудуйте таблицю значень функції $y(x)$ й її похідної $y'(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 12

Інтеграл Френеля $C(x)$ і $S(x)$ визначаються виразами

$$C(x) = \int_0^x \cos(t^2) dt, \quad S(x) = \int_0^x \sin(t^2) dt.$$

Побудуйте чисельний алгоритм знаходження значень інтегралів Френеля. Для аргументного інтервала $[0, 0; 15, 0]$ з кроком табулювання $0,10$ знайдіть значення означених функцій з точністю $0,0001$. Побудуйте графіки для інтегралів Френеля, а також графік їх параметричної залежності (спіраль Корню).

Завдання 13

Нехай A — матриця з елементами $(n = 1, 2, \dots, N)$

$$A_{n,n} = 1, \quad A_{1,N} = A_{N,1} = q, \quad A_{n,n+1} = A_{n+1,n} = q,$$

інші елементи матриці дорівнюють нулю.

Для випадків $N = 5$, $N = 6$ та $q = \pm 0,5$ знайдіть спектр матриці A . Знайдені значення власних чисел перевірте, зіставивши зі значенням визначника вхідної матриці.

Завдання 14

Побудуйте чисельний алгоритм, що дозволить знайти задану функцію від матриці

$$A = \begin{pmatrix} 0,4 & 0,3 & 0,6 \\ 0,9 & q & -1,2 \\ 1,0 & 0,6 & q \end{pmatrix}.$$

На основі алгоритму переконатися у правильності матричної тотожності $\operatorname{tg}(2A) = 2\operatorname{tg}(A)[E - \operatorname{tg}^2(A)]^{-1}$ за значень параметра q в інтервалі $[0, 2; 1, 4]$ з кроком табулювання $0,1$.

Завдання 15

Визначити з точністю 0,0001 усі дійсні корені рівняння

$$2 \exp(2 - x^2)(x^6 - 3x^4 + 5x^2 - 1) - 2e - 5 = 0.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 16

Просторове тіло обмежене знизу площиною $z = 0$, а зверху — поверхнею, що задається функцією $z = \exp(-x^2 - y^2)$. Це тіло розрізане площинами: $x = -0,5$, $x = 0,0$, $x = 0,5$.

За допомогою методу Монте–Карло оцінити об'єм отриманих просторових фігур. Результати оформити графічно.

Завдання 17

Побудуйте чисельну процедуру знаходження розв'язання звичайного диференціального рівняння

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} - 3\frac{dy(x)}{dx} = \exp(5x), \quad y'_0 = 2, \quad y_0 = q,$$

де $q = 0, -1, -2, -3, -4$.

На інтервалі $[0; 1]$ дослідіть залежність точності розв'язку системи диференціальних рівнянь від величини крока h . Значення величини $y(1)$ порівняти з її аналогом, знайденим аналітично. Результати оформити графічно.

Завдання 18

Використовуючи метод Монте–Карло, знайдіть об'єм області чотиривимірного евклідового простору, обмеженого наступними нерівностями:

$$0 \leq (x_1 + x_2 + x_3 + x_4) \leq 1, \quad 0 \leq x_1 \leq 1, \quad 0 \leq x_2 \leq 1, \quad 0 \leq x_3 \leq 1.$$

Отриманий результат порівняти з його аналітичним аналогом. Результати оформити графічно.

Завдання 19

Використовуючи метод Монте–Карло, знайдіть об'єм області тривимірного евклідового простору, обмеженого наступними поверхнями: $x^2 + y^2 = 16$ та $x^2 + z^2 = 16qz$, де $q = 1, 2, 3, 4$.

Отриманий результат порівняти з його аналітичним аналогом. Результати оформити графічно.

Завдання 20

Для заданої матриці B вимірністю N обчислити

$$g_1 = \exp[\text{Sp}(\ln B)], \quad g_2 = \det B.$$

Значення знайдених величин порівняти для матриць з $N = 2, 3$ й 4 .

Завдання 21

Функція $f(x)$ визначена виразом

$$f(x) = qx^M - x + 1,$$

де $M = 3; 4$ та $q = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$.

В аргументному інтервалі $[-5; 5]$ з кроком табулювання $h = 0,1$ знайдіть набір поточних значень функції. Користуючись чисельною процедурою обчислення значень інтерполяційного полінома Лагранжа, визначити всі дійсні нулі функції $f(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 22

Чисельно знайдіть набір власних чисел й власних векторів наступної матриці ($s = 0, 1, 2, 3, 4$)

$$Q = \begin{pmatrix} s & 1 & s \\ 1 & s & 1 \\ s & 1 & s \end{pmatrix}$$

двома способами: а) визначенням найбільшого за модулем власного значення; б) визначенням нулів характеристичного багаточлена матриці A . Результати порівняти.

Завдання 23

Дана кубічна парабола: $y(x) = \alpha x^3 + \beta x + 1$. Задані коефіцієнти цієї параболи α і β можуть приймати значення, що відрізняються на 10 % від номінальних.

Чисельно визначити області можливих значень нулів цієї параболи. Результати оформити графічно.

Завдання 24

Побудуйте чисельну процедуру знаходження розв'язання системи звичайних диференціальних рівнянь. За її допомогою знайдіть на інтервалі $[0; 8]$ розв'язок такого диференціального рівняння:

$$\frac{d^4 y(x)}{dx^4} = -16y(x),$$

де $y_0 = 0$, $y'_0 = 1$, $y''_0 = 0$, і $y'''_0 = -1, 0$ та 1 ,

Чисельне значення розв'язку порівняти з його аналітичним аналогом. Результати оформити графічно.

Завдання 25

За допомогою чисельних процедур розв'язання звичайних диференціальних рівнянь та знаходження нулів заданої функції знайдіть на інтервалі $[0, 1; 0, 5]$ розв'язок рівняння

$$\frac{dy(x)}{dx} = \frac{y^2(x)}{1 + xq(x)}, \quad y(0, 1) = 0, 1,$$

де $q(x)$ — функція, значення якої дорівнює кількості дійсних нулів рівняння $\operatorname{tg}(50t) = 10t$ на інтервалі $[-x; x]$. Результати оформити графічно.

Завдання 26

Для $k = 1, \dots, 20$ визначити корені рівняння $z^5 - 12z^2 + 14 = 0$, що містяться всередині кола $|z| = 0,1k$.

Результати оформити графічно.

Завдання 27

Задано набір комплексовизначених коефіцієнтів полінома степеня N . Напишіть чисельну процедуру визначення набору його комплексних нулів.

Задавши чисельно набір коефіцієнтів, степінь й точність δ , знайдіть набір нулів полінома для $N = 2, 3, 4, 5, 6$.

Завдання 28

Для матриці

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 5 & 4 & 2 \\ 4 & 5 & 1 \end{pmatrix}$$

чисельно перевірте, що кожне з власних чисел $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ цієї матриці лежить принаймні в одній з областей на z -площині

$$|z - A_{jj}| = \sum_{k=1}^3 |A_{jk}|, \quad j = 1, 2, 3.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 29

За допомогою процедури знаходження значень певних інтегралів знайдіть з точністю 0,001 значення інтеграла

$$J = \int_D \int (x^2 + y^2) \exp(2x^2 - 2y^2 - 2) dx dy,$$

де область інтегрування D визначається умовами

$$-1 \leq xy \leq 1, \quad (x^2 - y^2) \leq 1, \quad x \geq 0.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 30

Функція $f(x, q)$ визначається виразом $f(x, q) = qx - \sin(x)$. Параметр q змінюється в інтервалі $[0, 01; 1, 0]$.

Вкажіть послідовність значень параметра q , за яких відбувається зміна кількості позитивних нулів функції $f(x, q)$. Для $q = 0, 1$ визначити всі значення позитивних нулів функції $f(x, 0, 1)$ з точністю 0,001. Результати оформити графічно.

Завдання 31

Доведіть аналітично і з точністю 0,0001 перевірте чисельно наступну рівність:

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^4}} \times \int_0^1 \frac{y^2 dy}{\sqrt{1-y^4}} = \pi/4.$$

Завдання 32

Поліноми Чебишова–Ерміта визначаються формулами

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) (d/dx)^n \exp(-x^2), \quad n = 1, 2, \dots$$

Для обраних n й m з точністю 0,0001 чисельно перевірте, що якщо $n \neq m$, то

$$\int_0^{\infty} H_n(x) H_m(x) \exp(-x^2) dx = 0.$$

Завдання 33

Функція $f(x)$ відома на інтервалі $[a; b]$. Задана кількість N рівновіддалених вузлів $\{x\}$, за значеннями яких обчислені відповідні значення функцій $\{f\}$.

Побудуйте чисельний алгоритм, що дозволить знайти за цими значеннями інтерполяційний поліном і порівняти його значення зі значеннями заданої функції. Для $a = 1$, $b = 2$ й $N = (5, 10, 15)$ вивчити похибку методу. Визначити чисельно максимум похибки на заданому інтервалі для випадків: а) $f(x) = \exp(x)$; б) $f(x) = \sin(x)$; в) $f(x) = 1/x$. Результати оформити графічно.

Завдання 34

У вибраному аргументному інтервалі чисельно та аналітично знайдіть другу похідну функції $\varphi(x)$, якщо

$$\varphi(x) = h^{-2} \int_0^h \int_0^h f(x + \xi + \eta) d\xi d\eta,$$

для заданого параметра h та випадків $f(t) = \cos(t)$ та $f(t) = \sin(t)$.

Завдання 35

Функція $J(r)$ має інтегральне подання

$$J(r) = \int_0^{\infty} \exp(-x) \cos^4(rx) dx.$$

Побудуйте чисельну процедуру знаходження функції $J(r)$ на інтервалі $0 \leq r \leq 1$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$. Знайдений розв'язок порівняти з його аналогом, отриманим аналітично. Результати оформити графічно.

Завдання 36

Побудуйте чисельний алгоритм, за допомогою якого з точністю 0,00001 покажіть правильність наступної рівності

$$2\pi^{-1/2} \int_0^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(x^2)} dx = \sum_0^{\infty} (-1)^n (n+1)^{-1/2}.$$

Завдання 37

Функція Бесселя $J_0(x)$ визначається виразом

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos[x \cos(t)] dt.$$

Побудуйте процедури чисельного інтегрування і знаходження функції Бесселя від заданої матриці. За їх допомогою знайдіть значення елементів матриці $J_0(A)$, де

$$A = \begin{pmatrix} -0,4 & 0,1 \\ 0,1 & 0,2 \end{pmatrix}.$$

Завдання 38

Використовуючи метод Монте-Карло, знайдіть об'єм області тривимірного евклідового простору, обмеженого наступними поверхнями:

$$x^2 + y^2 = 4qy, \quad x^2 + z^2 = 4qz, \quad q = 1, 2, 3, 4.$$

Отриманий результат порівняти з його аналітичним аналогом. Результати оформити графічно.

Завдання 39

За допомогою трьох реалізацій методу Зейделя побудуйте чисельний алгоритм розв'язання СЛАР вимірності $N = 4$ і $N = 5$.

Задавши набір коефіцієнтів в СЛАР, порівняти чисельні розв'язки за кількістю ітерацій, потрібних для досягнення заданої точності.

Завдання 40

Для матриці A з наступними елементами

$$A = \begin{pmatrix} 1,5 & 6,6 & 1,9 & 0,0 \\ 1,0 & \beta & 0,3 & 0,1 \\ 2,8 & 2,2 & 4,3 & 0,8 \\ 4,6 & 4,8 & 3,7 & \beta \end{pmatrix}$$

за допомогою створеного чисельного алгоритму переконатися у справедливості теореми Гамільтона-Келі для випадків $\beta = 3, \dots, 6, 7$.

Завдання 41

Функція $f(x)$ визначається виразом

$$f(x) = \int_0^{\infty} \frac{1}{1+t^2} \frac{1}{1+t^x} dt.$$

Побудуйте чисельний алгоритм обчислення значень функції $f(x)$. Для аргументного інтервала $[-4, 0; 4, 0]$ з кроком табулювання 0,5 знайдіть значення функції $f(x)$ та її похідної з точністю 0,0001. Результати оформити графічно.

Завдання 42

Чисельно знайдіть набір власних чисел та власних векторів матриці

$$Q = \begin{pmatrix} 3 & 1 & q \\ 3 & q & 2 \\ q & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3,$$

двома способами: а) визначенням нулів характеристичного полінома матриці Q ; б) визначенням найбільшого щодо модуля власного значення. Результати порівняти.

Завдання 43

Функція

$$f(x) = \int_0^{\pi/2} [1 - x^2 \sin^2 \varphi]^{1/2} d\varphi$$

пов'язана з повним еліптичним інтегралом.

Для інтервала $0, 1 \leq x \leq 0, 9$ з кроком $\Delta x = 0, 05$ чисельно перевірте, що

$$f''(x) + x^{-1}f'(x) + (1 - x^2)^{-1}f(x) = 0.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 44

Для матриці A з наступними елементами

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

знайдіть унітарну матрицю T і діагональну матрицю B такі, що має місце співвідношення $B = T^{-1}AT$.

Завдання 45

Дано дві криві: парабола $y = \alpha x^2 + \beta$ та еліпс $x^2 + y^2 = 5$.

Чисельно і аналітично знайдіть такі значення коефіцієнтів параболи, за яких:
а) обидві криві не перетинаються; б) обидві криві перетинаються; в) обидві криві торкаються. Результати оформити графічно.

Завдання 46

Запропонувати два методи, на основі яких дослідити точність процедури знаходження значення інтегралів на наступному зразку

$$J(r) = \int_0^{\infty} \exp(-x^2) \cos(rx) dx,$$

де $0 \leq r \leq 10$ з кроком $0,5$. Результати оформити графічно.

Завдання 47

З точністю 0,0001 знайдіть такі значення аргумента α , що функція

$$f(\alpha) = 2\alpha \exp(-\alpha^2) \int_0^{\alpha} \exp(t^2) dt$$

прийме значення, що дорівнюють $0,1n$, де $n = 1, 2, \dots, 11, 12$. Результати оформити графічно.

Завдання 48

На інтервалі $[0; 10]$ чисельно і аналітично дослідіть розв'язок диференціального рівняння $dz/dx = \sin(z) - qx$ за таких початкових умов: $z(0) = 0,1; 0,3; \dots, 0,9; 1,1$ і значень параметра: $q = 0,0; 0,5; 1,0$. Результати оформити графічно.

Завдання 49

Функції $f(x)$ і $q(x)$ визначаються на інтервалі $[0,1]$ рівняннями

$$\begin{cases} f'(x) = x^{-1/2}q(x), & f(0) = 0, \\ q'(x) = -x^{-1/2}q(x), & q(0) = 1. \end{cases}$$

За допомогою чисельної процедури знаходження розв'язання системи звичайних диференціальних рівнянь знайдіть функції $f(x)$ та $q(x)$ в означеному інтервалі з кроком табулювання 0,05. Результати оформити графічно.

Завдання 50

Для рівняння Шредінгера відносно функції $U(x, t)$

$$\frac{1}{i} \frac{\partial U}{\partial t} = U + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

(i – уявна одиниця) з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-4(x - 0,5)^2]$ побудуйте кінцево-різницевий алгоритм знаходження розв'язку.

За допомогою створеної на основі алгоритму програми знайдіть значення функції $P(x, t) = |U(x, t)|^2$. Результати оформити графічно.

Завдання 51

За допомогою чисельних процедур знаходження нулів заданої функції й визначення значення однократного інтеграла знайдіть з точністю 0,0001 перші чотири нулі функції

$$f(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta \sin(z \sin \theta) d\theta.$$

Завдання 52

Для квадратної матриці A напишіть чисельну процедуру обчислення $\exp(A)$ двома способами.

Задавши елементи матриці A , обчислити двічі $\exp(A)$. Результати порівняти для випадків $N = 2, 3, 4$.

Завдання 53

Нехай в СЛАР $AX = B$ вимірністю N кожний матричний елемент A_{nm} матриці системи A заданий з абсолютною похибкою α_{nm} .

Дослідіть вплив цих похибок на розв'язання СЛАР, знайдене за допомогою методу вилучення Гаусса, для $N = 3$ і $N = 4$, розглянувши при цьому окремо випадки, коли власні числа матриці системи кратні.

Завдання 54

Нехай $\eta = \eta(b)$ — мінімальний корінь рівняння, який знайдений з точністю ε :

$$b \exp(-x) = \sin(x), \quad x > 0.$$

Дослідіть чисельно залежність $\eta(b)$ в інтервалі $0 \leq b \leq 100$ для $\varepsilon = 0,010$, $\varepsilon = 0,005$ й $\varepsilon = 0,001$. Результати оформити графічно.

Завдання 55

За допомогою чисельної процедури знаходження нуля заданої функції двома методами визначити з точністю 0,001 корені рівняння

$$x^4 n^{-2} - 3x^3 + n^2 = 0,$$

де $n = 1, 2, 3, \dots, 20$. Результати оформити графічно.

Завдання 56

Побудуйте чисельний алгоритм, за допомогою якого з точністю 0,0001 покажіть правильність наступної тотожності

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin^2(x)}{x^2} dx = \int_0^{\infty} \frac{\sin(x)}{x} dx.$$

Дайте аналітичну інтерпретацію здобутого результату.

Завдання 57

Для $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ визначити з достатньою точністю значення x_k , за яких буде справедливо $F(x_k) = 1 - 10^{-k}$, де

$$F(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-x}^x \exp(-0,5t^2) dt.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 58

Для функції

$$f(x) = (1 + k^2 x^2)^{-1}, \quad k = 10 \text{ та } k = 20$$

побудуйте на інтервалі $[-1; 1]$ інтерполяційний поліном Лагранжа з кількістю вузлів $10 \leq N \leq 20$. Значення знайденого полінома порівняти зі значеннями заданої функції $f(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 59

На інтервалі $[0; 10]$ чисельно та аналітично дослідіть розв'язок диференціального рівняння

$$d^4 z / dx^4 = \sin(x) - qx$$

при наступних початкових умовах: $z(0) = 0, 0$; $z'(0) = 0, 0$; $z''(0) = 0, 0$; $z'''(0) = 0, 2$ та значеннях параметра: $q = (0, 0; 0, 5; 1, 0; 1, 5)$. Результати оформити графічно.

Завдання 60

Для матриці A з елементами

$$A = \begin{pmatrix} 1,6 & 6,6 & 1,9 & 0,0 \\ 1,0 & 9,1 & 0,3 & 0,1 \\ 2,8 & 2,2 & 4,3 & 0,9 \\ 4,1 & 4,8 & 3,7 & s \end{pmatrix}$$

з допомогою створеного чисельного алгоритму переконатися у справедливості теореми Гамільтона–Келі для випадків $s = 3, 4, 5, 6$.

Завдання 61

За допомогою двох алгоритмів дослідіть точність алгоритму знаходження значень інтегралів на наступному прикладі:

$$J(r) = \int_0^{\infty} \exp(-x) \cos^2(rx) dx,$$

де $r = 1, 2, \dots, 10$. Результати оформити графічно.

Завдання 62

Розглянути систему диференціальних рівнянь ($0 \leq t \leq 100$)

$$\begin{cases} dX / dt = 2X - bXY, \\ dY / dt = -Y + bXY. \end{cases}$$

Дослідіть задану систему при $b = 0, 1; 0, 2; 0, 5; 1, 0$. Для функцій $X(t)$ та $Y(t)$ знайдіть такі початкові умови $X(0)$ і $Y(0)$, що: а) розв'язок системи має періодичний характер; б) розв'язок системи має монотонний характер. Результати оформити графічно.

Завдання 63

Крива Q задана параметрично при $0 \leq t \leq 2\pi$ виразами

$$\begin{cases} x(t) = \alpha \cos^2(t) + \beta \cos(t), \\ y(t) = \alpha \cos(t) \sin(t) + \beta \sin(t). \end{cases}$$

Для випадків: 1) $\alpha = 2, \beta = 3, \gamma = -1, 0$; 2) $\alpha = 3, \beta = 2, \gamma = 0, 5$ за допомогою чисельної процедури знаходження нулів функції знайдіть всі точки перетинання кривої Q з прямою $x = \gamma$. Результати оформити графічно.

Завдання 64

Функція $P(m)$ дискретного аргументу $m = 0, 1, 2, \dots, M$ подається виразом

$$P(m) = C_M^m C_{N-M}^{n-m} / C_N^n,$$

де C_k^j — кількість сполучень з k елементів за j .

Знайдіть при $k = 0, 1, 2, 3$ значення наступних сум

$$S_k = \sum_{m=0}^L m^k P(m),$$

де $L = \min(n, M)$, для випадків: а) $N = 40, M = 10, n = 10$; б) $N = 40, M = 5, n = 10$. Результати оформити графічно.

Завдання 65

Напишіть програму знаходження розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних. Скористуйтесь кінцево-різницеvim методом сіток. За допомогою програми знайдіть в півсмузі $0 \leq t \leq t_{\max}, -x_{\max} \leq x \leq x_{\max}$ розв'язок рівняння

$$T_t = qT^3 + T_{xx}$$

з початковою умовою $T(x, 0) = \exp(-\alpha x^2)$.

Вхідні дані до програми:

x_{\max} — права межа просторового шару;

t_0, t_{\max} — початковий і кінцевий часові моменти;

α, q — параметри завдання;

$T(x_0, t) = \varphi(t)$ і $T(x_{\max}, t) = \psi(t)$ — межові умови.

Результат роботи програми — масив, що містить значення цієї функції.

Результати оформити графічно.

Завдання 66

Інтеграл помилок $\operatorname{erf}(x)$ визначається виразом

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt.$$

Побудуйте чисельний алгоритм визначення значень функції $\operatorname{erf}(x)$. В аргументному інтервалі $[-5, 0; 5, 0]$ із кроком табулювання 0,25 і точністю 0,0001 знайдіть значення функції $\operatorname{erf}(x)$. За допомогою алгоритму чисельного диференціювання таблично заданої функції знайдіть масиви значень першої і другої похідних функції $\operatorname{erf}(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 67

Дана матриця A розміром $(N \times N)$ з елементами $A_{mn} = q^{-|m-n|}$.

На основі методу Гаусса розв'язання СЛАР побудуйте процедуру обернення матриці A при $q = 2, 3, 4$ та $N = 5, 6$. Знайдений розв'язок для оберненої матриці перевірте, перемноживши її з вхідною матрицею.

Завдання 68

За допомогою процедури знаходження значення інтегралів обчислити з точністю 0,001 при $r = -0,9; \dots, 0,9$ й $\Delta r = 0,1$

$$J = \frac{2}{\pi\sqrt{1-r^2}} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2 - 2rxy + y^2}{2(1-r^2)}\right) dx.$$

Завдання 69

За допомогою чисельних процедур знаходження нулів заданої функції і визначення значення однократного інтеграла знайдіть перші три нулі функції

$$f_n(x) = \int_0^\pi \sin[x \sin(t) - nt] dt$$

з точністю 0,0001 для $n = 1, 2, 3$. Результати оформити графічно.

Завдання 70

Для матриці A з елементами

$$A = \begin{pmatrix} n\mu & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & n\mu & 0 & -\mu \\ \mu & 0 & n\mu & 0 \\ 0 & \mu & 0 & n\mu \end{pmatrix}.$$

чисельно і аналітично визначити її спектр для випадків $n = 0, 1, 2, 3$ й $\mu = 1, 2$.

Завдання 71

Для матриці A з елементами

$$A = \begin{pmatrix} 1,0 & 1,0 & 2,8 & p \\ 1,0 & 1,0 & 1,0 & 2,8 \\ 2,8 & 1,0 & 1,0 & 1,0 \\ p & 2,8 & 1,0 & 1,0 \end{pmatrix}$$

за допомогою створеного чисельного алгоритму, що оснований на теоремі Гамільтона-Келі, знайдіть обернену матрицю для випадків $p = 3, 4$.

Завдання 72

Напишіть програму знаходження чисельного розв'язання параболічного диференціального рівняння в частинних похідних. Скористуйтеся різницеvim методом сіток.

За допомогою програми знайдіть у півсмузі $-2 \leq x \leq 2$, $0 \leq t \leq 2$, розв'язок рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} U = \beta \frac{\partial}{\partial x} (xU) + q \frac{\partial^2}{\partial x^2} U - 3x^2 U$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp(-5x^2)$. Результати оформити графічно.

Завдання 73

За допомогою чисельних процедур знаходження нулів заданої функції й визначення значення однократного інтеграла знайдіть з точністю 0,001 перші три нулі функції

$$f_n(x) = \int_0^{\pi} \cos[x \sin(t) - nt] dt, \quad n = 0, 1, 2, 3.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 74

За допомогою чисельних процедур знайдіть двома способами на інтервалі $0 \leq x \leq 5$ розв'язок диференціального рівняння

$$y^3 + (y')^3 - yy' = 0, \quad y_0 = 0 \quad \text{та} \quad y_0 = 0, 1.$$

Завдання 75

Для випадків $q = 10^{-k}$, $k = 6, 7, 8$, знайдіть спектр матриці

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & q \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Завдання 76

Для заданих матриць A, B і C вимірністю N кожна знайдіть чисельно розв'язок X наступного матричного рівняння Ляпунова: $AXB + X = C$. Дослідіть похибку розв'язка для $N = 2, 3, 4$.

Завдання 77

Неперервна функція $y = y(x)$ визначається як розв'язок рівняння

$$y - \varepsilon \sin(y) = x, \quad 0 < \varepsilon < 1.$$

Для обраного значення параметра ε та обраного аргументного інтервала і крока Δx в ньому побудуйте таблицю значень функції $y(x)$ та її похідної $y'(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 78

Дана матриця A з елементами

$$A_{n,n} = 1, \quad A_{n,n+1} = A_{n+1,n} = q, \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

інші елементи матриці дорівнюють нулю.

Для випадків $N = 5$, $N = 6$ і $q = \pm 0,5$ знайдіть спектр матриці A . Знайдені значення власних чисел перевірте, порівнявши зі значенням визначника вхідної матриці.

Завдання 79

За допомогою чисельних процедур розв'язання звичайних диференціальних рівнянь та знаходження нулів заданої функції знайдіть на інтервалі $[0, 1; 1, 5]$ розв'язок рівняння

$$dy(x)/dx = y(x)/[x + q(x)], \quad y(0, 1) = 0, 1,$$

де $q(x)$ — функція, значення якої дорівнює кількості дійсних нулів рівняння $\text{ctg}(5t) = 10t$ на інтервалі $[0; x]$. Результати оформити графічно.

Завдання 80

Функція $y = y(x)$ визначається рівнянням

$$\ln(x^2 + y^2)^{1/2} = \eta \arctg(y/x), \quad 0 < \eta < 1.$$

Для обраного значення параметра η і обраного аргументного інтервала й крока Δx в ньому побудуйте таблицю значень функції $y(x)$ та її похідної $y'(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 81

Побудуйте чисельну процедуру розв'язання системи двох нелінійних рівнянь за допомогою метода Ньютона. Для наступної системи

$$\begin{cases} \sin(x + y) - qx = -0, 2, \\ (x + 3)^2 + (y - 3)^2 = 1, 1, \end{cases}$$

де $q = 0, 0; 0, 1; 0, 2$, розв'язок отримати з п'ятьма вірними знаками. Результати оформити графічно.

Завдання 82

За допомогою процедури знаходження значення інтегралів обчислити з точністю 0,001 при $r = -0, 5; 0, 0; 0, 5$

$$J = \frac{2}{\pi\sqrt{1-r^2}} \int_D \int \exp\left(-\frac{x^2 - 2rxy + y^2}{2(1-r^2)}\right) dx dy,$$

де область інтегрування D визначається умовою $xy < 0$.

Завдання 83

Для матриці A з елементами

$$A = \begin{pmatrix} 1, 0 & 3, 7 & 3, 7 & q \\ 3, 7 & 2, 2 & 2, 5 & 3, 7 \\ 3, 7 & 2, 5 & 2, 2 & 3, 7 \\ q & 3, 7 & 3, 7 & 1, 0 \end{pmatrix}$$

за допомогою чисельного алгоритму, основанийого на теоремі Гамільтона–Келі, знайдіть обернену матрицю для випадків $q = 3, 4$.

Завдання 84

Інтегральний синус $\text{Si}(x)$ і інтегральний косинус $\text{Ci}(x)$ визначаються наступними виразами ($\gamma = 0,57721566$)

$$\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} dt, \quad \text{Ci}(x) = \int_0^x \frac{\cos(t) - 1}{t} dt + \ln(x) + \gamma.$$

Побудуйте алгоритм обчислення функцій $\text{Si}(x)$ і $\text{Ci}(x)$. В аргументному інтервалі $(0, 5 \leq x \leq 20, 0)$ з кроком табулювання $0,5$ і з точністю $0,001$ знайдіть значення цих функцій. За допомогою алгоритму чисельного диференціювання знайдіть значення їх першої і другої похідних. Результати оформити графічно.

Завдання 85

Функція $Y(x)$ задана рівнянням

$$dY/dx = 2x + 2xY - Y/x, \quad Y(0) = 0,$$

а також інтегральним поданням

$$Y(x) = 2x \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt.$$

На інтервалі $0 \leq x \leq 10$ знайдіть значення функції $Y(x)$ двома способами, що означені. Результати порівняти і оформити графічно.

Завдання 86

Гамма-функція Ейлера задана своїм інтегральним поданням

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

За допомогою чисельного алгоритму знаходження значень однократного інтеграла в аргументному інтервалі $[1, 0; 5, 0]$ з кроком табулювання $0,1$ і точністю $\varepsilon = 0,0001$ знайдіть значення гамма-функції Ейлера $\Gamma(x)$. З точністю ε для значень аргумента $x = (1, 2, \dots, 6, 7)$ перевірте правильність тотожності $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 87

Функція $y(x)$ задана інтегральним поданням

$$y(x) = \beta^{-2} \int_0^x t \exp(-t^3/\beta) dt.$$

Знайдіть аргументи $\{x_n\}$, $n = 1, \dots, 10$, в яких функція $y(x)$ приймає з точністю $0,0001$ значення, які за модулем дорівнюють $y(x) = 0,1n$. Результати оформити графічно.

Завдання 88

Ортогональні поліноми Ерміта $H_n(x) = f(x)$ є розв'язком диференціального рівняння

$$f''(x) - 2xf'(x) + 2nf(x) = 0.$$

Для $n = 0, 1, 2$ побудуйте чисельний алгоритм розрахунку багаточленів Ерміта. В аргументному інтервалі $[0, 0; 5, 0]$ з кроком табулювання $0,1$ знайдіть значення означених функцій. Перевірте правильність співвідношення

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

Результати оформити графічно.

Завдання 89

Двома способами знайдіть мінімуми, нулі, максимуми та точки перетину функції $f(x) = \sin(\alpha x^2 + \beta)$ для значень параметрів: $\alpha = 0, 1n$; $n = -5, \dots, 5$; $\beta = (-3, -2, \dots, 2, 3)$. Результати порівняти та оформити графічно.

Завдання 90

Для заданих матриць A, B і C вимірністю N кожна знайдіть чисельно розв'язок X наступного матричного рівняння Ляпунова

$$AX + XB = C.$$

Дослідіть похибку розв'язку для $N = 2, 3, 4$.

Завдання 91

Для обраних векторів X, Y вимірності $N = 3, 4$ визначимо матрицю A і скаляр μ таким чином

$$A_{nm} = X_n Y_m, \quad \mu = \sum_{n=1}^N X_n Y_n.$$

Виконати спектральний аналіз матриці $B = E + \mu A$.

Завдання 92

В обраному аргументному інтервалі чисельно і аналітично знайдіть другу похідну $\varphi''(x)$ функції

$$\varphi(x) = \int_0^x (x+t)f(t) dt,$$

якщо $f(t) = (1 + t^{1/2})$, $f(t) = (1 + t^{3/2})$ та $f(t) = (1 + t^{5/2})$.

Завдання 93

Нехай X є матриця, яка утворена з власних векторів заданої матриці A вимірністю $N = 3$ і $N = 4$.

Доведіть аналітично і перевірте чисельно, що $Y = (X^T)^{-1}$ є матриця, яка одержана з власних векторів матриці A^T .

Завдання 94

Задана таблиця з N пар значень (x, y) .

Побудуйте чисельну процедуру, що дозволить знаходити коефіцієнти відповідного інтерполяційного полінома Лагранжа. Відомо, що абсциса останнього вузла випадкова і рівномірно розподілена в інтервалі $[a, b]$. Знайдіть значення інтерполяційного полінома, що усереднений за випадковими значеннями означеної абсциси.

Завдання 95

Функція $f(x)$ задана інтегральним поданням

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} x} \int_{-\alpha}^{\alpha} \exp(-t^2 x^2 / 2) dt.$$

Для $\alpha = 0, 2n$, $n = 1, 2, \dots, 10$, знайдіть значення аргумента x , що з точністю 0,0001 здобувають максимум функції $f(x)$. Результати оформити графічно.

Завдання 96

Для заданої матриці A розміром N обчислити величини

$$g_1 = \det[\exp(A)], \quad g_2 = \exp[\text{Sp}(A)].$$

Значення знайдених величин порівняти для $N = 2, 3$ й $N=4$.

Завдання 97

В обраному аргументному інтервалі чисельно і аналітично знайдіть другу похідну $\varphi''(x)$ функції

$$\varphi(x) = \int_0^x (x+t) f(t) dt,$$

якщо $f(t) = \exp(-t)$, $f(t) = t \exp(-t)$ та $f(t) = t^2 \exp(-t)$.

Завдання 98

Для рівняння в частинних похідних відносно функції $U(x, t)$

$$U_t = U + xU_x + 3U_{xx}$$

з початковою умовою $U(x, 0) = \exp[-(x-1)^2]$ побудуйте кінцево-різницевий алгоритм розв'язання. На основі цього алгоритму знайдіть значення функції $U(x, t)$ в області, близькій до максимуму функції. Результати оформити графічно.

Завдання 99

За допомогою чисельних алгоритмів знайдіть двома способами розв'язок диференціального рівняння

$$2y'y'' + (y')^2 = 1, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

якщо $y_0 = 0$ та $y'_0 = 1$.

Завдання 100

У точках $\lambda = 0, 1, 2$ знайдіть чисельно перші 8 похідних функції

$$f(\lambda) = \exp(-\sqrt{1+2\lambda}).$$

Знайдені значення порівняти з їх аналітичними аналогами.

Завдання 101

За допомогою побудованих процедур обчислення знайдіть:

а) розв'язок на інтервалі $[2; b]$ диференціального рівняння

$$y'(x) = x^3/(1+x^4), \quad y(2) = 0;$$

б) значення інтеграла

$$J = \int_2^b t^3(1+t^4)^{-1} dt.$$

Здобуті з точністю 0,0001 значення величин $y(b)$ і J порівняти для випадків $b = 10, 20, 30, 40$.

Завдання 102

Двома побудованими числовими процедурами знайдіть значення інтеграла від функції $f(x) = \operatorname{ctg}(x)$ в інтервалі $[0,01; 1,0]$. Дослідіть похибку чисельного алгоритму і його залежність від кількості вузлів в квадратурній формулі. Результати оформити графічно.

Завдання 103

Визначити, за яких значень параметра α інтеграл

$$J(\alpha) = \int_0^{\infty} x^2 [\exp(\alpha x) - 1]^{-1/2} dx$$

прийме значення, які з точністю 0,0001 дорівнюють за модулем 1, 2, 3, ..., 9. Результати оформити графічно.

Завдання 104

Функція

$$f(x) = \int_0^{\pi/2} [1 - x^2 \sin^2 \varphi]^{-1/2} d\varphi$$

виражається через повний еліптичний інтеграл.

Для інтервала $0, 1 \leq x \leq 0,9$ з кроком $\Delta x = 0,05$ чисельно перевірте, що

$$x(1-x^2)f''(x) + (1-3x^2)f'(x) - xf(x) = 0.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 105

З точністю 0,0001 знайдіть такі значення параметра α , що інтеграл

$$J(\alpha) = 4\pi^{-1/2} \int_0^{\alpha} x \exp(-x^2) dx$$

прийме значення, що дорівнюють за модулем $0,1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$. Результати оформити графічно.

Завдання 106

Для випадків $q = 10^{-k}$, $k = 3, 4, 5$, знайдіть власні вектори матриці

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & q \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Завдання 107

Функція Хольцмарка $f(\beta)$ задається інтегральним поданням

$$f(\beta) = \frac{2}{\pi\beta} \int_0^{\infty} \exp\left[-(x/\beta)^{3/2}\right] x \sin x dx.$$

Для $\alpha = 0,05n$, де $n = 1, 2, \dots$, знайдіть значення аргументів β таких, що з точністю 0,0001 має місце $f(\beta) = \alpha$. Результати оформити графічно.

Завдання 108

З точністю 0,0001 визначити, за яких значень параметра α інтеграл

$$J(\alpha) = \frac{15}{\pi^2} \int_0^{\alpha} x^3 [\exp(x) - 1]^{-1} dx$$

прийме значення, що дорівнюють за модулем $0,1, 0,2, \dots, 0,9$. Результати оформити графічно.

Завдання 109

Аналітично й чисельно знайдіть з точністю 0,0001 значення інтеграла

$$J = \int \int \int_E (x^2 + y^2 + z^2) dx dy dz$$

по області E , що задається нерівностями

$$x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad z \geq 0, \quad \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} \right) \leq 1,$$

якщо $a = 1, b = 1, c = 1$ та $a = 2, b = 2, c = 2$.

Завдання 110

Просторове тіло обмежено поверхнями, що задані функціями

$$z = -x^2 - y^2 + 3 \quad \text{та} \quad z = x^2 + y^2 - 3.$$

За допомогою методу Монте-Карло оцініть об'єм просторової фігури, що отримали. Результати оформити графічно.

Завдання 111

На інтервалі $[0, 10]$ знайдіть з точністю 0,0001 максимуми функції

$$f(x) = \sin^6(x) \exp(qx),$$

де $q = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Результати оформити графічно.

Завдання 112

Аналітично й чисельно знайдіть з точністю 0,0001 об'єм V тіла, що задається нерівностями

$$0 \leq z \leq \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{a} + \frac{y^2}{b} \right), \quad \left(\frac{x^2}{c} + \frac{y^2}{c} \right) \leq 1,$$

якщо $a = 1, b = 1, c = 1$ та $a = 2, b = 2, c = 2$.

Завдання 113

З точністю 0,0001 визначити, за яких значень параметра α інтеграл

$$J(\alpha) = \frac{6\alpha^2}{\pi^2} \int_0^{\infty} x^{3/2} [\exp(\alpha x) - 1]^{-1/2} dx$$

приймає значення, що дорівнюють за модулем 0,1, 0,2, 0,3. Результати оформити графічно.

Завдання 114

Побудуйте алгоритм і знайдіть чисельно розв'язання диференціального рівняння

$$y'' + (2/x)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

з початковими умовами $y'(0) = q; y(0) = 0$, де параметр q приймає такі значення: $q = 0,0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$. Результати оформити графічно.

Завдання 115

Для $\nu = 3, 4, 5$ та $p = 0,90; 0,95; 0,99$ визначіть з точністю 0,0001 значення u , за яких має місце співвідношення

$$\left[2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2) \right]^{-1} \int_0^u t^{-1+\nu/2} \exp(-t/2) dt = p.$$

Результати оформити графічно.

Завдання 116

Побудуйте чисельну процедуру знаходження розв'язання звичайного диференціального рівняння

$$d^2y / dx^2 = -16y, \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = q.$$

де $q = 0, -1, -2, -3, -4$.

На інтервалі $[0; 1]$ дослідіть залежність точності розв'язку системи диференціальних рівнянь від величини крока h . Значення величини $y(1)$ порівняти з її аналогом, знайденим аналітично. Результати оформити графічно.

Завдання 117

Доведіть аналітично і перевірте чисельно (з точністю 0,0001) наступну рівність:

$$\int_0^{\infty} \exp(-\alpha t) J_0(\beta t) dt = (\alpha^2 + \beta^2)^{-1/2},$$

де

$$J_0(x) = \pi^{-1} \int_0^{\pi} \cos[x \sin(\varphi)] d\varphi$$

— функція Бесселя нульового індексу.

Завдання 118

З точністю 0,0001 знайдіть такі значення параметра α , що інтеграл

$$J(\alpha) = \frac{6}{\alpha^2} \int_0^{\alpha} x [1 - \exp(-x)]^{-1} dx.$$

приймає значення $3 + 0,1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$.

Завдання 119

Просторове тіло є спільною частиною двох сфер

$$(z - 3)^2 + x^2 + y^2 = 16 \quad \text{та} \quad (z + 3)^2 + x^2 + y^2 = 16.$$

За допомогою методу Монте-Карло оцініть об'єм просторової фігури, яку одержали. Результати оформити графічно.

Завдання 120

Знайдіть такі значення параметра α , за яких інтеграл

$$J(\alpha) = \frac{15}{\pi^4} \int_0^{\alpha} x^3 [\exp(x) - 1]^{-1} dx$$

приймає значення, які з точністю 0,0001 дорівнюють за модулем $0,1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$. Результати оформити графічно.

Завдання 121

Задана таблиця з N пар значень (x, y) .

Побудуйте чисельну процедуру, що дозволить знаходити значення інтерполяційного полінома Лагранжа. Відомо, що абсциса останнього вузла випадкова і рівномірно розподілена в інтервалі $[a; b]$. Знайдіть значення інтерполяційного полінома, що усереднений за випадковими значеннями цієї абсциси.

Завдання 122

За допомогою чисельних алгоритмів знайдіть двома способами значення інтеграла з точністю 0,0001

$$J(\alpha) = \int_0^{\pi} \ln(1 - 2\alpha \cos x + \alpha^2) dx,$$

якщо $\alpha = 0,3$, $\alpha = 0,6$ та $\alpha = 1,2$, $\alpha = 1,5$.

Завдання 123

З точністю $\varepsilon = 0,001$ для набору функцій ($n = 1, 2, \dots, 30$)

$$f_n(t) = A_n \left(1 + \frac{t^2}{n}\right)^{-1}$$

знайдіть набір таких значень констант $\{A_n\}$, що $\int_{-\infty}^{\infty} f_n(t) dt = 1$, після чого для $\alpha = 0,010$, $0,005$, $0,001$ визначте набір величин $\{t_{n,\alpha}\}$, що задовольняють умові

$$\int_{-\infty}^{t_{n,\alpha}} f_n(t) dt = \alpha.$$

Завдання 124

Знайдіть такі значення аргумента x , за яких функція

$$f(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt$$

прийме з точністю 0,0001 значення, що дорівнюють $0,1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$.

Результати оформити графічно.

Завдання 125

В обраному аргументному інтервалі чисельно і аналітично знайдіть другу похідну функції $\varphi(x)$, якщо

$$\varphi(x) = h^{-2} \int_0^h \int_0^h f(x + \xi + \eta) d\xi d\eta$$

для заданого параметра h та випадків $f(t) = \sin^2(t)$, $f(t) = \cos^2(t)$.

Результати оформити графічно.

Завдання 126

За допомогою процедур знаходження розв'язку звичайного диференціального рівняння і обчислення значення інтеграла знайдіть:

а) на інтервалі $[0; b]$ розв'язок диференціального рівняння

$$y'(x) = (x - 1)/(x + 1), \quad y(0) = 1;$$

б) значення інтеграла

$$J = \int_0^b (t - 1)(t + 1)^{-1} dt.$$

Знайдені з точністю 0,0001 значення величин $y(b)$ і J порівняти для випадків $b = 10, 20, 30, 40$.

Завдання 127

За допомогою чисельних алгоритмів знайдіть двома способами розв'язок диференціального рівняння

$$y'' - 2y' + y = 2\operatorname{sh} x + 2x, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

якщо $y_0 = 0$ та $y'_0 = 0$.

Результати оформити графічно.

Завдання 128

З точністю 0,0001 знайдіть такі значення параметра α , за яких інтеграл

$$J(\alpha) = \frac{2}{\ln(4)} \int_0^\alpha x^{-1} [\exp(-x^2) - \exp(-4x^2)] dx$$

прийме значення, які дорівнюють $0, 1n$, де $n = 1, 2, 3, 4$.

Результати оформити графічно.

Завдання 129

Функція $y = y(x)$ визначається рівнянням

$$y = 2\varepsilon \operatorname{arctg}(y/x).$$

Для обраного значення $0 < \varepsilon < 1$ та обраного аргументного інтервала й крока Δx в ньому побудуйте таблицю значень функції $y(x)$ та її похідної $y'(x)$.

Результати оформити графічно.

Список літератури

П і д р у ч н и к и

1. Демидович Б.П., Марон И.А., Шувалова Э.З. *Численные методы анализа*. — М.: Наука, 1967.
2. Воробьева Г.Н., Данилова А.Н. *Практикум по вычислительной математике*. — М.: Высш. шк., 1990.
3. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. *Машинные методы математических вычислений*. — М.: Наука, 1980.
4. Маликов В.Т., Кветный Р.Н. *Вычислительные методы и применение ЭВМ*. — К.: Выща шк., 1989.
5. Фурунжиев Р.И., Бабушкин Ф.М., Варавко В.В. *Применение математических методов и ЭВМ*. — Минск: Высш. шк., 1989.
6. Ланцош К. *Практические методы прикладного анализа*. — М.: Госиздат физ.-мат. лит-ры, 1961.
7. Мудров А.Е. *Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль*. — Томск: МП "Раско", 1991.
8. Заварыкин В.М., Житомирский В.Г., Лапчик М.П. *Численные методы*. — М.: Просвещение, 1990.
9. Хемминг Р.В. *Численные методы*. — М.: Наука, 1972.
10. *Численные методы* / Н.Н.Данилина, Н.С.Дубровская, О.П.Кваша и др. — М.: Высш. шк., 1976.
11. Вентцель Е.С. *Теория вероятностей*. — М.: Наука, 1964.
12. Бусленко Н.П., Шрейдер Ю.А. *Метод статистических испытаний и его реализация на цифровых вычислительных машинах*. — М.: Госиздат физ.-мат. лит-ры, 1961.
13. Мэтьюз Дж.Г., Финк К.Д. *Численные методы. Использование MATLAB*. — Москва-Санкт Петербург-Киев: "Вильямс", 2001.
14. Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. *Numerical Recipes in C*. — Cambridge: University Press, 1994.
15. Говорухин В., Цибулин В. *Компьютер в математическом исследовании. Учебный курс*. — СПб.: Питер, 2001.
16. Гурский Д.А. *Вычисления в MathCAD*. — Минск: ООО "Новое знание", 2003.

Д о в і д н и к и

17. Корн Г., Корн Т. *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. — М.: Наука, 1987.
18. Ямке Е., Эмде Ф., Леш Ф. *Специальные функции*. — М.: Наука, 1968.

19. Абрамович М., Стиган И. *Справочник по специальным функциям*. — М.: Наука, 1979.
20. Маделунг Э. *Математический аппарат физики*. — М.: Физматгиз, 1960.
21. Дьяконов В.П. *Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для персональных ЭВМ*. — М.: Наука, 1989.
22. Дьяконов В.П. *Компьютерная математика. Теория и практика*. — М.: "Нолидж", 2001.
23. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. — М.: Физматгиз, 1962.
24. Камке Э. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*. — М.: Наука, 1965.
25. Фильчаков В.В. *Численные и графические методы прикладной математики: Справочник*. — К.: Наукова думка, 1986.
26. Попов Б.А., Теслер Г.С. *Вычисление функций на ЭВМ*. — К.: Наукова думка, 1984.

Д о д а т к о в а л і т е р а т у р а

27. Беллман Р. *Введение в теорию матриц*. — М.: Наука, 1969.
28. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. *Матрицы и вычисления*. — М.: Наука, 1984.
29. Анго А. *Математика для электро- и радиоинженеров*. — М.: Наука, 1965.
30. Крылов В.И. *Приближенное вычисление интегралов*. — М.: Физматгиз, 1959.
31. Мишина А.П., Проскураков И.Г. *Высшая алгебра*. — М.: Наука, 1965.
32. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. *Вычислительные методы линейной алгебры*. — М.: Физматгиз, 1963.
33. Никольский С.М. *Квадратурные формулы*. — М.: Физматгиз, 1958.
34. Банди Б. *Методы оптимизации*. — М.: Радио и связь, 1984.
35. Волков Е.А. *Численные методы*. — М.: Наука, 1982.
36. Самарский А.А. *Введение в численные методы*. — М.: Наука, 1982.
37. Копченова Н.В., Марон И.А. *Вычислительная математика в примерах и задачах*. — М.: Наука, 1972.
38. Борович Э.И. *Определители и матрицы*. — М.: Наука, 1984.
39. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. *Курс статистического моделирования*. — М.: Наука, 1976.
40. Харин Ю.С. *Практикум на ЭВМ по математической статистике*. — Минск: Изд-во Белорусского университета, 1987.
41. Поттер Д. *Вычислительные методы в физике*. — М.: Мир, 1975.
42. Амелькин В.В. *Дифференциальные уравнения в приложениях*. — М.: Наука, 1987.
43. Оппенгейм А.М., Шефер Р.В. *Цифровая обработка сигналов*. — М.: Связь, 1979.
44. Прэтт У. *Цифровая обработка изображений*. — М.: Мир, 1982.

Навчальне видання

МАЗМАНІШВІЛІ Олександр Сергійович

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

Навчальний посібник до лабораторних занять

Українською мовою

Роботу до видання рекомендував О.В. Горілий

Редактор В.М. Баранов

План 2007, поз. 63

Підп. до друку 20.10.2007	Формат 60×94 1/16	Папір офсетн.
Друк – ризографія.	Гарнітура Times New Roman.	Ум. друк. арк. 12,5.
Обл.–вид. арк. 15,5.	Наклад 200 прим. Зам. №	Ціна договірна

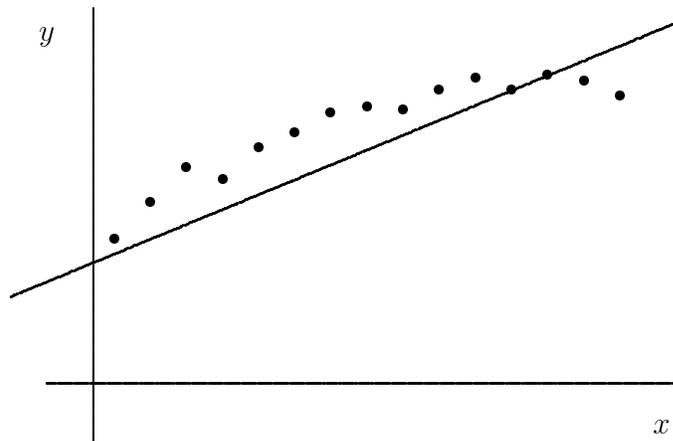
Видавничий центр НТУ "ХПІ", 61002, Харків, вул. Фрунзе, 21
Свідоцтво про реєстрацію ДК № 116 від 10.07.2000

Друкарня НТУ "ХПІ", 61002, Харків, вул. Фрунзе, 21

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
"ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ"

О. С. МАЗМАНІШВІЛІ

Ч И С Е Л Ь Н І М Е Т О Д И
НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК ДО ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ



Харків 2010