

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
"ХАРЬКОВСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ"

А. С. МАЗМАНИШВИЛИ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ
ПОСОБИЕ К ЛАБОРАТОРНЫМ ЗАНЯТИЯМ

Харьков 2008

Численные методы. Пособие к лабораторным занятиям.

А.С. Мазманишвили, ХГПУ, 2008.

Настоящее Пособие к лабораторным занятиям предназначено для выполнения практикума по курсу "Численные методы".

В Пособии систематизирована подборка материалов по восьми основным темам дисциплины "Численные методы": теоретические сведения, необходимые для решения задач, примеры таких решений и задачи для самостоятельной работы. Представлен Фонд заданий для внеаудиторной работы студентов.

Предназначено для студентов, обучающихся по специальности "Прикладная математика". Адаптировано к учебным программам различной длительности. Содержит большое количество иллюстраций. Будет полезно студентам физико-математических, инженерно-технических и экономических специальностей университетов, а также специалистам.

Иллюстраций — 20.

Библиография — 25 наименований.

Оглавление

Введение	6
1. Приближенное вычисление функций	7
1.1. Основные теоретические положения	7
1.2. Интерполяционный многочлен Лагранжа	9
1.3. Интерполяционный многочлен Ньютона	11
1.4. Обратное интерполирование	12
1.5. Сплайн-интерполирование	13
1.6. Интерполирование в таблицах	13
1.7. Математическая обработка данных	14
1.8. Метод наименьших квадратов	16
1.9. Линейная и квадратичная аппроксимация	18
1.10. Полиномиальная аппроксимация	20
1.11. Приближение тригонометрическими многочленами	22
1.12. Выбор вида эмпирической формулы	23
1.13. Двухпараметрическая аппроксимация	24
1.14. Выявление и исключение промахов из серии наблюдений	26
1.15. Линейное сглаживание данных	27
1.16. Задание на лабораторную работу	30
1.17. Задания для проверки	33
2. Нахождение нулей функций	35
2.1. Основные теоретические положения	35
2.2. Метод половинного деления	36
2.3. Метод хорд	37
2.4. Метод Ньютона	37
2.5. Комбинированный метод хорд и касательных	39
2.6. Метод итераций (метод последовательных приближений)	40
2.7. Примеры нахождения нулей нелинейного уравнения	41
2.8. Решение систем нелинейных уравнений	43
2.9. Метод Ньютона для системы двух уравнений	45
2.10. Нули полиномов	48
2.11. Общие свойства алгебраических уравнений	50
2.12. Численное нахождение нулей полиномов	51
2.13. Задание на лабораторную работу	53
2.14. Задания для проверки	57
3. Численные методы линейной алгебры	58
3.1. Основные теоретические положения	58
3.2. Методы решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)	58
3.3. Метод Крамера решения СЛАУ	59
3.4. Метод Гаусса с выбором главного элемента	60

3.5.	Вычисление определителя и обратной матрицы с помощью прямых методов решения СЛАУ	63
3.6.	Метод последовательных приближений	64
3.7.	Метод Зейделя решения СЛАУ	66
3.8.	Итерационное уточнение решения СЛАУ	68
3.9.	Сравнение методов нахождения решения СЛАУ	68
3.10.	Нахождение собственных чисел и векторов матрицы	69
3.11.	Численное определение функции от матрицы	71
3.12.	Операции с блочными матрицами	76
3.13.	Операции с треугольными матрицами	81
3.14.	Однородные системы линейных алгебраических уравнений	84
3.15.	Задание на лабораторную работу	86
3.16.	Задания для проверки	89
4.	Численное дифференцирование таблично заданной функции	90
4.1.	Основные теоретические положения	90
4.2.	Алгоритмы дифференцирования таблично заданной функции	90
4.3.	Дифференцирование заданной функции с помощью интерполяции	91
4.4.	Алгоритмы дифференцирования с помощью интерполяции	91
4.5.	Алгоритмы дифференцирования с помощью аппроксимации	94
4.6.	Нахождение высших производных аналитической функции	97
4.7.	Задание на лабораторную работу	99
4.8.	Задания для проверки	100
5.	Численное интегрирование	101
5.1.	Основные теоретические положения	101
5.2.	Квадратурные формулы прямоугольников	102
5.3.	Метод трапеций	103
5.4.	Метод парабол	103
5.5.	Квадратурные формулы Ньютона-Котеса	105
5.6.	Квадратурная формула Чебышева	106
5.7.	Квадратурная формула Гаусса	108
5.8.	Развернутый пример применения квадратурных алгоритмов	110
5.9.	Вычисление интегралов с особенностями	113
5.10.	Вычисление интегралов, подынтегральные функции которых содержат весовой множитель	114
5.11.	Комплекснозначные интегралы	115
5.12.	Двухкратные и трехкратные интегралы	116
5.13.	Множественные интегралы	116
5.14.	Задание на лабораторную работу	118
5.15.	Задания для проверки	119
6.	Решение обыкновенных дифференциальных уравнений	121
6.1.	Основные теоретические положения	121
6.2.	Метод Эйлера	122
6.3.	Модифицированный метод Эйлера	124

6.4.	Метод Рунге–Кутты	124
6.5.	Решение обыкновенных дифференциальных уравнений с автоматическим изменением шага	127
6.6.	Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений	129
6.7.	Решение обыкновенных дифференциальных уравнений второго и высших порядков	131
6.8.	Задание на лабораторную работу	136
6.9.	Задания для проверки	138
7.	Метод Монте-Карло	139
7.1.	Основные теоретические положения	139
7.2.	Построение метода Монте-Карло	139
7.3.	Построение квадратурного алгоритма на примере задачи оценки числа π	141
7.4.	Применение случайных величин при построении квадратурных алгоритмов	142
7.5.	Распределения случайных величин	143
7.6.	Равномерно распределенные случайные числа	144
7.7.	Нормально распределенные случайные числа	145
7.8.	Основные законы распределения и моделирование случайных величин	147
7.9.	Статистический анализ датчиков случайных чисел	151
7.10.	Применение метода Монте-Карло для вычисления определенных интегралов	153
7.11.	Применение метода Монте-Карло для вычисления многократных интегралов	154
7.12.	Применение метода Монте-Карло для оценки объёма цилиндра	157
7.13.	Задание на лабораторную работу	161
7.14.	Задания для проверки	162
8.	Решение дифференциальных уравнений в частных производных	164
8.1.	Основные теоретические положения	164
8.2.	Параболические дифференциальные уравнения в частных производных	164
8.3.	Метод сеток решения параболического дифференциального уравнения	165
8.4.	Аппроксимационные шаблоны для первых и вторых производных	167
8.5.	Устойчивость разностной схемы для решения параболического дифференциального уравнения	170
8.6.	Погрешность метода сеток	171
8.7.	Разностная схема для решения уравнения Шредингера	173
8.8.	Задание на лабораторную работу	175
8.9.	Задания для проверки	176
	Приложения	178
	П.10. Фонд зачетных заданий для самостоятельной работы	178
	П.11. Фонд заданий для курсовой работы	200
	Список литературы	230

Введение

Настоящее учебное пособие — ”Лабораторный практикум по численным методам” по замыслу составителя преследует две основные цели. Во-первых, дать студентам достаточный, удобный для работы и практически апробированный материал, который обучает прикладным методам и технике решения различных вычислительных задач прикладной математики. Во-вторых, учесть, что сегодня такие методы должны быть обязательно ориентированы на современный рабочий инструмент математика — персональный компьютер. В результате, с одной стороны, несколько видоизменяется обучение самой ”технике” вычислений, а с другой стороны, расширяется сфера изучаемых приложений численных методов, ранее ограничивавшаяся возможностями и доступностью вычислительных средств. В настоящий Практикум поэтому включены методы численного решения дифференциальных уравнений в частных производных, методы Монте-Карло.

Пособие, таким образом, систематизирует и организует учебный материал по практическим аспектам освоения методов и приемов как вычислительной математики, так и численного анализа. Для удобства работы, а также возможности самостоятельного углубленного изучения и контроля усвоения материала, пособие скомпоновано из отдельных самостоятельных тем, адаптированных к соответствующим разделам дисциплины ”Численные методы”. Эти темы включают:

- методы приближенного вычисления функций;
- методы нахождения нулей функций и решения трансцендентных уравнений;
- методы линейной алгебры (нахождение решений систем линейных алгебраических уравнений, определение собственных чисел и собственных векторов заданной матрицы, вычисление аналитической функции от матрицы);
- методы численного дифференцирования таблично заданной функции;
- численные методы нахождения значений определенных интегралов;
- численные методы нахождения решений обыкновенных дифференциальных уравнений;
- метод Монте-Карло;
- численные методы решения параболических дифференциальных уравнений в частных производных.

В каждом из разделов приведены необходимые исходные и справочные данные, принципы построения численных методов решения соответствующих задач, типичные алгоритмы, сформулированы задания для самостоятельной работы, а также контрольные вопросы. Излагаемый лабораторный практикум основан на знаниях, получаемых в дисциплинах ”Высшая математика”, ”Основы программирования” и самой дисциплине ”Численные методы” в стандартном объеме специальности ”Прикладная математика”.

Весь материал Пособия сформирован таким образом, чтобы быть адаптированным к произвольным персональным ЭВМ. Соответственно и программные средства могут быть созданы на любом современном алгоритмическом языке.

Основной материал Пособия дополнен двумя фондами – для самостоятельной работы и для контрольных проверок знаний обучающихся.

1. Приближенное вычисление функций

1.1. Основные теоретические положения

В ходе проведения экспериментов, обработки экономических сведений и многочисленных других видов работ исполнитель получает числовые данные. Для того, чтобы с этими данными было удобно работать, они сводятся в *таблицы*. Тем самым завершается первый этап работы – *этап получения и оформления результатов*. Целью второго этапа – *этапа обработки и принятия решения* – является осмысление имеющихся числовых данных и разработка дальнейшей стратегии поведения.

Функциональные зависимости можно оформлять тремя способами: *аналитическим, табличным и графическим*.

Аналитический способ задания функции (в виде формулы) отличается точностью, лаконичностью, возможностью проведения вычислений для любых значений аргумента и применения разнообразных приемов исследования. Однако он недостаточно нагляден.

Графический способ задания дает наглядную информацию о свойствах и характере поведения функции и позволяет в случае необходимости находить (приближенно) нужные числовые данные. Однако точность получаемой числовой информации невелика.

Табличное задание функции предоставляет готовую числовую информацию о функции, которую можно извлечь из таблицы, не прибегая к дополнительным измерениям и вычислениям. Таблицы функций отличаются простотой и удобством хранения (табл. 1.1). Однако этот способ задания не отличается наглядностью и достаточной точностью.

Таблица 1.1 — Таблица числовых данных

n	x_n	f_n
0	2,0	-0,71
1	2,1	-0,64
2	2,2	-0,57
3	2,3	-0,55
...
k	x_k	y_k
...
$N - 1$	2,8	0,56
N	2,9	0,59

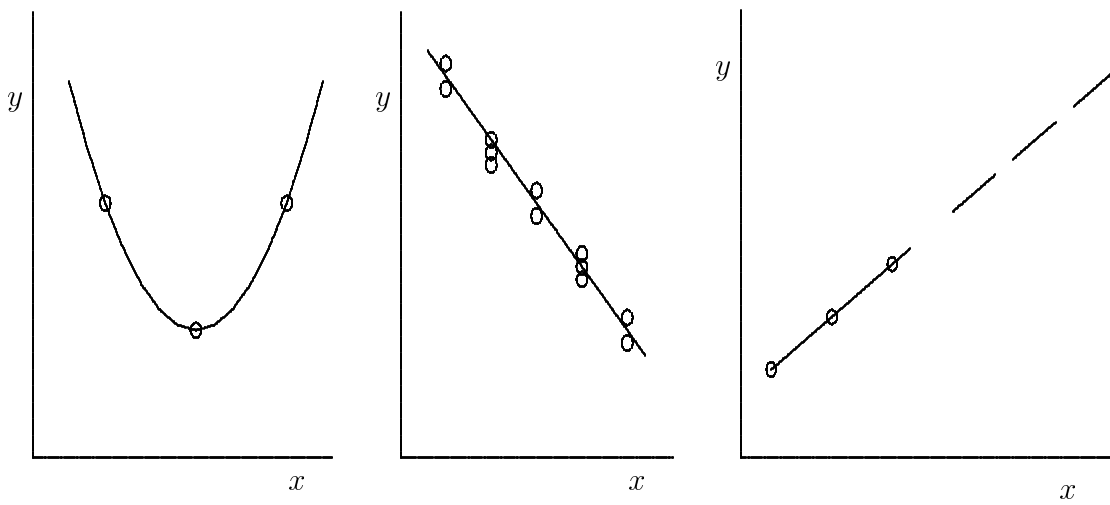


Рисунок 1.1 — Методы обработки числовых данных; слева – интерполяция; посередине – аппроксимация; справа – экстраполяция

На практике широкое распространение получил способ оформления числовых данных в виде *таблицы*. В таблице построчно и упорядоченно для набора текущих значений аргументов x_0, x_1, \dots, x_N задан соответствующий набор значений функций $f_0 = f(x_0), f_1 = f(x_1), \dots, f_N = f(x_N)$. Каждая пара значений (x_n, f_n) называется *узлом*. Для удобства каждую строку нумеруют текущим индексом, как правило целым. При таком способе представления данных говорят, что функция является *таблично заданной*. Отметим, что данные *в междоузлиях* при этом отсутствуют. Таким образом, таблица, какой бы ёмкой она ни была, лишь частично содержит сведения о функции.

На втором этапе работы с числовыми данными возможны три варианта их обработки: интерполяция, аппроксимация и экстраполяция (рис. 1.1).

Интерполяция – численная процедура, при которой определенная функция проводится непосредственно через совокупность заданных узлов. При этом в каждом из узлов с номером n значения аргумента и функции точно равны заданным x_n и f_n . Интерполяция применяется для отыскания значения функции в точках, отличных от узлов. Построение такой функции называется *интерполированием*. Наиболее распространена алгебраическая интерполяция, когда в качестве интерполирующей функции используется многочлен соответствующей степени.

Аппроксимация – приближение табличных данных функциональной зависимостью в смысле выбранного критерия близости. Аппроксимация применяется для обработки зашумленных табличных данных или данных одного происхождения большого объема. В качестве аппроксимирующих функций стараются подобрать такие зависимости, которые адекватно соответствуют природе имеющихся данных.

Экстраполяция – продолжение значений выбранной интерполяционной или аппроксимационной функции вне таблично заданного аргументного интервала. Экстраполяция применяется в тех случаях, когда ставится задача получения прогноза наперед или восстановления более ранних зависимостей.

В результате указанных процедур обработки по числовым данным восстанавливаются *функциональные зависимости*, позволяющие предложить определенные

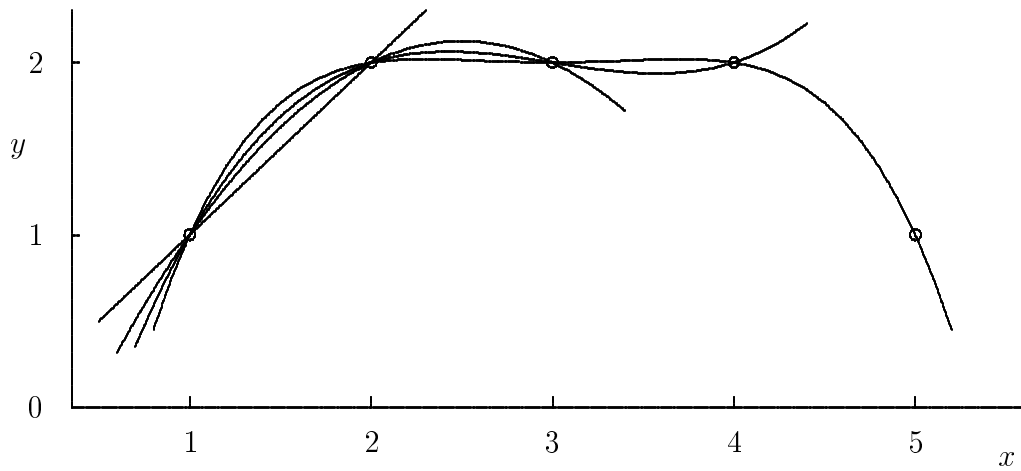


Рисунок 1.2 — Интерполяционные полиномы $y = P_1(x), P_2(x), P_3(x), P_4(x)$; узлы — (1,1); (2,2); (3,2); (4,2); (5,1)

практические выводы.

В процессе работы таблица данных дополняется и тем самым расширяется. Зависимости, полученные на основании предыдущих данных, называются *априорными*. Функциональные зависимости, полученные вследствие учета дополнительных сведений, называются *апостериорными*.

1.2. Интерполяционный многочлен Лагранжа

Пусть имеется таблица из $(N + 1)$ узлов $\{(x_n, f_n)\}$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$. Обычно их удобно нумеровать, начиная с $n = 0$, при этом $x_0 = a$ и $x_N = b$, где a, b — границы аргументного интервала.

Алгебраическое интерполирование функции $f(x)$, заданной своими значениями $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N)$ в точках x_0, x_1, \dots, x_N на отрезке $[a, b]$, состоит в приближенной замене этой функции на данном отрезке многочленом $P_N(x)$ степени N (рис. 1.2). Этот многочлен в узлах интерполяции принимает те же значения, что и функция $f(x)$

$$P_N(x_n) = f(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, N.$$

Существует единственный интерполяционный многочлен N -й степени, удовлетворяющий данным условиям.

Решение задачи алгебраической интерполяции обеспечивает *интерполяционный многочлен Лагранжа*:

$$\begin{aligned}
 P_N(x) = & f(x_0) \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_N)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \dots (x_0 - x_N)} + \\
 & + f(x_1) \frac{(x - x_0)(x - x_2) \dots (x - x_N)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_N)} + \\
 & \dots \dots \dots \\
 & + f(x_N) \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{N-1})}{(x_N - x_0)(x_N - x_1) \dots (x_N - x_{N-1})}.
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

В точках отрезка $[a, b]$, которые отличны от узлов интерполяции, разность $R(x) = f(x) - P_N(x)$ в общем случае не равна нулю. Эту разность представляет погрешность метода, которую называют *остаточным членом интерполяции*.

Оценка погрешности интерполяции в текущей точке x определяется выражением

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

Примеры построения последовательности интерполяционных полиномов приведены на рис. 1.2.

Пример

Пусть заданы координаты 5 узлов (табл. 1.2). Требуется построить интерполяционный полином (рис. 1.3).

Таблица 1.2 — Таблица числовых данных

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

Решение

Согласно формуле (1.1) интерполяционный полином будет иметь степень $N = 4$. Запишем этот полином явно

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

Результат графического построения интерполяционного полинома приведен на рис. 1.3.

Здесь $\Delta^k f_0$ – конечная разность k -го порядка, определяемая рекуррентно:

$$\begin{aligned}\Delta f_0 &= f_1 - f_0, \\ \Delta^2 f_0 &= \Delta f_1 - \Delta f_0, \\ &\dots \\ \Delta^k f_0 &= \Delta^{k-1} f_1 - \Delta^{k-1} f_0.\end{aligned}\tag{1.6}$$

Тогда

$$\begin{aligned}P_N(x) &= f_0 + \frac{\Delta f_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 f_0}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \\ &+ \dots + \frac{\Delta^N f_0}{N! h^N}(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{N-1}).\end{aligned}\tag{1.7}$$

Эта формула называется *первой интерполяционной формулой Ньютона*.

При определении значений функции f в точке с абсциссой x по первой интерполяционной формуле Ньютона удобно принимать в качестве x_0 ближайший к этой абсциссе узел интерполирования.

Для интерполирования *в конце таблицы* интерполяционный многочлен удобно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned}P_N(x) &= f_N + \frac{\Delta f_{N-1}}{h}(x - x_N) + \frac{\Delta^2 f_{N-2}}{2h^2}(x - x_N)(x - x_{N-1}) + \\ &+ \dots + \frac{\Delta^N f_0}{N! h^N}(x - x_N)(x - x_{N-1}) \dots (x - x_1).\end{aligned}\tag{1.8}$$

Эта формула называется *второй интерполяционной формулой Ньютона*.

1.4. Обратное интерполирование

В *прямой интерполяции* находят значение функции для того значения аргумента, который расположен между двумя заданными аргументными узлами.

Обратная интерполяция – алгоритм, с помощью которого находят значение функции y , которое лежит между двумя заданными функциональными узлами.

Если в интерполяционной формуле Лагранжа подставить значение абсциссы $x = 0$, то получим значение

$$y(x = 0) = \sum_{n=0}^N y_n \prod_{j=0, j \neq n}^N \frac{(-x_j)}{(x_n - x_j)}.\tag{1.9}$$

Аналогично рассуждая, можно получить то значение аргумента x_* , для которого интерполяционный полином обращается в ноль, т.е. $y(x_*) = y_* = 0$. С этой целью в выражении (1.9) поменяем везде местами x и y :

$$x_* = x(y = 0) = \sum_{n=0}^N x_n \prod_{j=0, j \neq n}^N \frac{(-y_j)}{(y_n - y_j)}.\tag{1.10}$$

Рассмотрим задачу нахождения нуля заданной функции. Если ордината y_* расположена *между* какими-либо функциональными узлами, то алгоритм (1.10) можно использовать для нахождения нуля функции.

1.5. Сплайн-интерполирование

Сплайны широко используются в прикладной вычислительной математике. *Сплайн* – это группа кубических многочленов, в местах сопряжения которых первая и вторая производные непрерывны. Такие функции называются *кубическими сплайнами*. Для их построения необходимо задать коэффициенты, которые однозначно определяют многочлен в промежутке данных точек.

Пусть необходимо задать набор из m кубических функций $q_1(x)$, $q_2(x)$, ..., $q_m(x)$. В наиболее общем виде эти многочлены имеют вид

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

где $\{k_{1i}, k_{2i}, k_{3i}, k_{4i}\}$ – набор из $4m$ постоянных, определяющих единственность сплайн-интерполирования через совокупность из $m + 1$ данных узлов $\{(x_i, y_i)\}$.

Первые $2m$ условия требуют, чтобы сплайны соприкасались в заданных точках:

$$\begin{aligned} q_i(x_i) &= y_i, & i &= 1, 2, \dots, m; \\ q_{i+1}(x_i) &= y_i, & i &= 0, 1, 2, \dots, m-1. \end{aligned} \quad (1.12, a)$$

Вторые $(2m - 2)$ условия требуют, чтобы в местах соприкосновения сплайнов были равны первые и вторые производные:

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

Необходимым условием существования решения системы алгебраических уравнений является условие, что число уравнений соответствует числу неизвестных. Поэтому необходимы еще два условия. Как правило, используются следующие два условия:

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

Полученный таким образом сплайн называется *естественным кубическим сплайном*. Найдя коэффициенты сплайна, используют кусочно-гладкую полиномиальную функцию для представления данных при интерполяции.

Во многих случаях метод сплайнов является достаточно удобным, так как позволяет получать аналитическую кусочно-полиномиальную функцию.

Существуют сплайны более высоких порядков. Применение этого метода возможно и в других областях вычислительной математики, например, в численном интегрировании и нахождении решений дифференциальных уравнений.

1.6. Интерполирование в таблицах

При интерполировании в таблицах обычно пользуются линейной и квадратичной интерполяцией. В случае линейной интерполяции значение функции в точке, отличающейся от узлов интерполяции, определяется по двум известным значениям табулируемой функции $y_i = f(x_i)$ и $y_{i+1} = f(x_{i+1})$ в узлах интерполяции x_i и x_{i+1} , между которыми расположено нужное значение аргумента $x_i < x < x_{i+1}$.

Интерполяционная формула Лагранжа для линейной интерполяции ($N = 1$) примет вид

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

а первая интерполяционная формула Ньютона

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

где $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ – первая конечная разность в точке x_i , а $h = x_{i+1} - x_i$ – шаг интерполяции. Итак, для получения приближенного значения функции y по формуле Ньютона достаточно к табличному значению y_i добавить поправку, равную $\Delta y_i (x - x_i)/h$.

При квадратичной интерполяции ($N = 2$) необходимо знать три значения табулируемой функции: $y_{i-1} = f(x_{i-1})$, $y_i = f(x_i)$ и $y_{i+1} = f(x_{i+1})$. Тогда формула Лагранжа примет вид

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

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

а первая интерполяционная 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. Математическая обработка данных

Анализ данных является одним из наиболее распространенных методов обработки результатов наблюдений при изучении зависимостей в экономике, технике и других областях. Он имеет очень большое значение. Известно много примеров, когда расхождение между экспериментальными и теоретическими результатами давало толчок для новых открытий. После проведения измерительной процедуры возникает одна и та же основная задача – выявление формы связи и определение формульной зависимости, задающей зависимую переменную y как функцию независимой переменной x

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

Можно, разумеется, применить метод интерполяции: построить интерполяционный многочлен (например, Лагранжа или Ньютона), значения которого в точках x_1, x_2, \dots, x_n будут совпадать с соответствующими значениями y_1, y_2, \dots, y_n . Однако совпадение значений в узлах может не отражать характер поведения исходной функции $f(x)$ и интерполирующей функции $F(x)$. В любых практических экспериментах значения x и $y = f(x)$ получены в результате измерений, являются приближенными и содержат погрешности. Поэтому интерполяционная формула, повторяющая эти ошибки, не является идеальным решением поставленной задачи, а требование точного совпадения значения $f(x_n)$ в узлах (x_n, y_n) не оправдано.

Проблема анализа данных, например в экономике, характерна тем, что о распределениях изучаемых величин нет достаточной информации. Целью анализа данных, в частности регрессионного анализа, является определение общего вида уравнений связи между рассматриваемыми величинами, построение статистических оценок неизвестных параметров, входящих в модельные уравнения связи, и проверка статистических гипотез. При изучении связи между двумя величинами по результатам наблюдений $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ предполагается, что одна из них имеет некоторое распределение вероятностей при фиксированном значении другой.

В общем случае результаты наблюдений $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ представляют собой выборку из совокупности с некоторым двумерным распределением вероятностей. Использование, например, регрессии обычно производится методами, основанными на принципах средней квадратичной регрессии. Оценка коэффициентов регрессии осуществляется методом наименьших квадратов. Этот метод в предположении нормальной распределенности результатов наблюдений приводит к оценкам, совпадающим с оценками наибольшего правдоподобия. Оценки, получаемые этим методом, оказываются в некотором смысле наилучшими и в случае отклонения от нормальности, если только объем выборки достаточно велик.

На практике строгая функциональная зависимость для экспериментальных данных, вообще говоря, может быть получена чрезвычайно редко, поскольку каждая из величин обычно зависит от многих случайных и неконтролируемых факторов.

Формула (1.17) является эмпирическим *уравнением регрессии y на x* . Она позволяет находить значения функции $y = f(x)$ для промежуточных (нетабличных) значений x , "сглаживая" результаты измерения величин y . Такой подход и определяет практическую полезность формулы (1.17) при математической обработке данных.

В общем случае задача формулируется следующим образом.

Пусть в результате некоторого исследования значениям x_1, x_2, \dots, x_n величины x поставлены в соответствие значения y_1, y_2, \dots, y_n величины y . Требуется подобрать вид аналитической зависимости $y = f(x)$, связывающей переменные x и y .

Аналитические зависимости, полученные в результате наблюдений, называются *эмпирическими*.

Выявление эмпирических зависимостей делится на два основных этапа:

- 1) выяснение и выбор общего вида эмпирической формулы;
- 2) уточнение коэффициентов выбранной рабочей формулы, определение наилучших её параметров.

На *первом этапе* этой работы пользуются априорными сведениями об объекте исследования, опытом предыдущих исследований и др.

Если неизвестен характер зависимости между величинами x и y , то вид эмпирической формулы является в известной степени произвольным. Здесь предпочтение отдается простым формулам, обладающим хорошей точностью. Если отсутствуют сведения о промежуточных данных, то обычно предполагается, что эмпирическая функция – аналитическая без точек разрыва и график её – плавная кривая. Практически невозможно указать общего метода для нахождения наилучшего вида формулы, соответствующей опытным данным. Эмпирические формулы являются лишь гипотезами, более или менее удовлетворительно согласующимися с наблюдаемыми

опытными данными.

На *втором этапе*, пользуясь выбранным критерием качества, находят (оценивают) искомые коэффициенты в рабочей эмпирической формуле.

Проблема определения наилучших значений параметров является задачей более легкой и решается регулярными методами.

Из множества возможных критериев качества для числовых алгоритмов обработки данных наибольшее распространение получили:

- 1) *метод наименьших квадратов*;
- 2) *метод выбранных точек*;
- 3) *метод средних*.

Наиболее часто используемым методом является *метод наименьших квадратов (МНК)*. В основе этого метода лежит *критерий наименьших квадратов Гаусса*, заключающийся в минимизации суммы квадратов отклонений табличных значений y_1, y_2, \dots, y_n от эмпирических. Метод обработки, основанный на этом критерии, называется *методом наименьших квадратов*.

1.8. Метод наименьших квадратов

Определение вида функциональной зависимости имеет свои особенности. Если соединить экспериментальные точки отрезками прямых на графике, будет получена ломаная линия, имеющая мало общего с отыскиваемой функциональной зависимостью. Поскольку каждый результат сопровождается ошибками измерения, форма ломаной линии не будет воспроизводиться при повторении опыта. Расстояние этой линии от точки в каждую сторону по горизонтали и вертикали указывает значения погрешности соответственно по оси абсцисс и ординат. Если потребовать, чтобы среднеквадратическое отклонение полученной функции от экспериментальных точек было *минимальным*, можно получить уравнения для параметров функции. В этом и заключается метод наименьших квадратов.

Пусть имеется совокупность из N значений функции y_i в заданных точках x_i , полученных в результате опыта. Будем аппроксимировать её аналитической функцией $\varphi(x)$, в которую входит некоторое число K констант (параметров) $\{a_k\}$. Необходимым условием наилучшего среднеквадратичного приближения есть минимум *критерия невязки* – суммы квадратических отклонений

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

Выберем *линейную аппроксимацию*

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

Для нахождения минимума критерия приравняем к нулю частные производные

Из (1.26) получаем уравнения (здесь для общности число узлов N обозначено через $N = \sum_{n=1}^N 1$)

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

Выражения (1.27) называются *нормальными уравнениями*.

Решая систему (1.27), находим выражения для параметров a и b :

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

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

Найденные значения параметров a и b дают наилучшую линейную зависимость в смысле критерия наименьших квадратов.

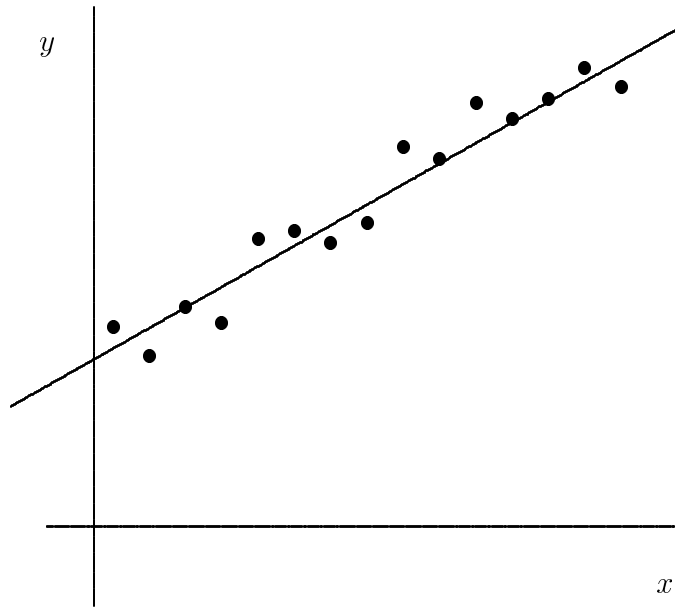


Рисунок 1.4 — Пример линейной регрессии

Пример построения линейной регрессии показан на рис. 1.4.

Б. Нахождение параметров квадратичной зависимости $y = a + bx + cx^2$.
 Квадратичная (параболическая) регрессионная зависимость будет построена, если будут получены значения параметров a , b и c .

Критерий невязки имеет вид

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

а условия минимума следующие

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

Из (1.30) получим систему нормальных уравнений относительно искомым параметров a , b и c (в этой системе для общности величина N обозначена через $\sum_{n=1}^N 1$)

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

Если все аргументы $\{x\}$ разные, то система (1.31) имеет отличный от нуля определитель. Решая систему (1.31), находим выражения для параметров a , b и c квадратичной зависимости. Найденные значения параметров a , b и c дают наилучшую квадратичную зависимость в смысле критерия наименьших квадратов.

Пример построения параболической регрессии показан на рис. 1.5.

1.10. Полиномиальная аппроксимация

В общем случае экспериментальные данные можно приближать не только с помощью линейной или квадратичной аппроксимации. *Полиномиальная аппроксимация* (регрессия) обеспечивает нахождение коэффициентов полинома

$$y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Mx^M, \quad (1.32)$$

где M – степень выбранного полинома.

1.11. Приближение тригонометрическими многочленами

Операция представления функции $f(x)$ рядом Фурье называется *гармоническим анализом*. Его применяют в тех случаях, когда есть основания полагать, что данные содержат периодическую компоненту.

В практических расчетах ограничиваются только несколькими первыми членами ряда Фурье. В результате получают лишь приближенное представление для функции $f(x)$ в виде тригонометрического многочлена M -го порядка

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

Поскольку на практике, как правило, функция $f(x)$ задается лишь в виде таблицы, возникает задача приближенного отыскания коэффициентов Фурье $\{a\}$ и $\{b\}$ по конечному числу имеющихся значений функции. Поэтому задача практического гармонического анализа может быть сформулирована так: методом наименьших квадратов аппроксимировать на интервале $(0, T)$ тригонометрическим многочленом M -го порядка функцию $y = f(x)$, для которой известны N её значений $y_n = f(x_n)$ при $x_n = nT/N$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$).

Тригонометрический многочлен для функции, определенной на интервале $(0, T)$, имеет вид

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

где $N < M/2$.

Коэффициенты a_j и b_j ($j = 0, 1, \dots, N$) определяются следующими соотношениями:

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

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

где $0 \leq n \leq N/2$.

Многочлен (1.36) при $N > 2M$ дает наилучшее приближение к функции $f(x)$ в смысле метода наименьших квадратов. Другими словами, коэффициенты $\{a\}$ и $\{b\}$ минимизируют сумму квадратов отклонений

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

В частном случае $M = N/2$ аппроксимация тригонометрическим многочленом сводится к тригонометрической интерполяции, так как выполняется соотношение $P_M(x_n) = y_n$ для всех x_n ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$).

1.12. Выбор вида эмпирической формулы

Эмпирические линейная или квадратичная зависимости могут не дать удовлетворительного описания имеющимся экспериментальным данным. Прямое графическое изображение данных не дает ответа на вопрос о том, какой аналитический вид имеет эмпирическая функция, т.е. будет ли она степенной, логарифмической и т.д.

Если отсутствуют априорные сведения, то из всего многообразия возможных функций $y = f(x; a, b)$ ограничиваются следующими:

- 1) линейная функция $y = ax + b$;
- 2) показательная функция $y = ab^x$;
- 3) дробно-рациональная функция вида $y = 1/(a + bx)$;
- 4) логарифмическая функция $y = a + b \ln(x)$;
- 5) степенная функция $y = ax^b$;
- 6) гиперболическая функция $y = a + b/x$;
- 7) дробно-рациональная функция вида $y = x/(ax + b)$.

Для выбора наилучшего вида двухпараметрической аналитической зависимости $y = f(x; a, b)$, соответствующей построенному графику, выполним следующие промежуточные действия.

На заданном отрезке независимой переменной x выберем точки, достаточно надежные и отстоящие друг от друга. Обозначим их через x_1 и x_N .

Далее вычислим среднее арифметическое $x_{\text{ариф}}$, среднее геометрическое $x_{\text{геом}}$ и среднее гармоническое $x_{\text{гарм}}$:

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

По вычисленным значениям независимой переменной x найдем из построенного графика соответствующее значение зависимой переменной y для пока еще неизвестной зависимости $y = f(x; a, b)$

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

Далее выполняют вспомогательные вычисления для зависимой переменной.

Вычисляют:

среднее арифметическое крайних значений

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

среднее геометрическое крайних значений

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

среднее гармоническое крайних значений

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

после чего сравнивают найденные из графика величины y_1^* , y_2^* и y_3^* с вычисленными значениями $y_{\text{арифм}}$, $y_{\text{геом}}$ и $y_{\text{гарм}}$. Затем составляют набор отличительных критериев (погрешностей) между расчетными значениями (1.40) и табличными значениями (1.41) для зависимой переменной

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

и находят из этих ошибок минимальную

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

Эмпирический критерий выбора типа приближающей двухпараметрической зависимости основан на сравнении вычисленных погрешностей (1.42) и минимальной из них ε_{\min} . При этом возможны следующие семь вариантов принятия решения о виде эмпирической функции:

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

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

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

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

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

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

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

Если выбранная зависимость окажется нелинейной, то используют преобразование координат.

Пусть, например, зависимость является показательной, т.е. $y = ab^x$. В этом случае при рассмотрении этой зависимости удобно перейти к новым переменным, поскольку $\lg(y) = \lg(a) + x \lg(b)$. Обозначим $A = \lg(a)$, $B = \lg(b)$ и введем переменные $u = \lg(y)$ и $v = x$. Тогда в плоскости uOv получим уравнение прямой $u = A + Bv$, анализировать которую наиболее удобно.

1.13. Двухпараметрическая аппроксимация

В процессе обработки экспериментальных данных можно попытаться описывать их какой-нибудь простой двухпараметрической зависимостью вида $y = f(x; a, b)$, где a и b – постоянные. Для этого используют линеаризующие преобразования и рассматривают среднеквадратическое отклонение новой величины, минимум которой соответствует удачному подбору параметров.

Приведем системы нормальных уравнений для набора таких зависимостей вида $y = f(x; a, b)$:

vskip 0,2 cm для зависимости $y = a + b/x$

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

для зависимости $y = 1/(a + bx)$

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

для зависимости $y = a/(b + x)$

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

для зависимости $y = a + \exp(bx)$

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

для зависимости $y = ax^b$

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

для зависимости $y = a + b \ln(x)$

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

1.14. Выявление и исключение промахов из серии наблюдений

Если серия из небольшого числа измерений содержит грубую погрешность (промах), то наличие этого промаха может изменить как среднее значение измеряемой величины, так и границы доверительного интервала. Вследствие этого искажаются (становятся неверными) выводы по работе в целом). Поэтому промах необходимо локализовать, а из окончательного результата его необходимо исключить. Обычно промах имеет значение, резко отличающееся от других измерений. Однако это отклонение еще не дает права полностью исключить такое измерение как промах, пока не проверено, не является ли это отклонение следствием статистического разброса или, например, влиянием резко изменившихся условий наблюдения.

В табл. 1.3 приведены значения величины x_n ($n = 1, 2, \dots, 8, 9$), полученные в результате измерения однородных $N = 9$ объектов. Очевидно, что величина x_9 ”выпадает” из ряда наблюдений (ошибка, возможно, произошла при записи 7 вместо 1). Проверим, не является ли значение $x_9 = 729,47$ промахом в этой выборке данных.

Таблица 1.3 — Числовые данные ($N = 9$)

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

С этой целью выполним следующие действия:

1. Найдем среднеарифметическое относительно имеющейся выборки данных ($N = 9$)

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

2. Найдем средневыворочное уклонение

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

3. Используем известное из теории вероятностей правило ”трёх сигм”.

В этом правиле рассматривается коридор значений $\bar{x}^{(1)} \pm 3\sigma^{(1)}$. События, реализации которых оказались вне этого коридора, считаются практически невероятными. В нашем случае этот коридор составляет

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

Видно, что коридор ”трёх сигм” включает даже отрицательные значения.

Исключим теперь ”выпадающее” значение x_9 (табл. 1.4).

С новыми данными выполним те же действия.

1. Найдем среднеарифметическое относительно новой выборки данных ($N = 8$)

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

Таблица 1.4 — Числовые данные ($N = 8$)

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

2. Найдем средневыборочную дисперсию

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

3. Найдем размер нового коридора

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

Если сопоставить значение $x_9 = 729,47$ с коридором $\bar{x}^{(2)} \pm 3\sigma^{(2)} = 129,43 \pm 0,0239$, отвечающим данным из $N = 8$ измерений, то необходимо прийти к заключению, что измерение $x_9 = 729,47$ достоверно противоречит предыдущим 8 измерениям. Возможно, оно есть результат грубого промаха или ошибки при записи. Учет такого измерения самым грубым образом ($\bar{x}^{(1)} = 196,10$) может повлиять на общую величину результата ($\bar{x}^{(2)} = 129,43$).

Ошибки (промахи) подобного вида довольно-таки распространены в практике выполнения измерений, передачи данных, при их форматировании и самих численных расчетах. На программном уровне их заметить и локализовать практически невозможно.

Поэтому:

1) при чтении входных данных должна быть предусмотрена процедура проверки их на смысловую непротиворечивость;

2) каждая программа должна быть разделена на блоки таким образом, чтобы была возможность проверки и дальнейшего воспроизведения любого промежуточного результата;

3) для каждой вычислительной процедуры необходимо найти инварианты рассматриваемой задачи; значения этих инвариантов необходимо использовать для текущего контроля решения.

1.15. Линейное сглаживание данных

В результате погрешностей различного происхождения вид полученных данных несколько отличается от теоретических (идеальных). При аккуратной постановке измерений погрешности носят случайный характер, при этом на кривую зависимости двух величин накладываются осцилляции, усложняющие анализ функции. Чтобы свести к минимуму отклонения, вызванные случайной погрешностью, применяют сглаживание исследовательских данных, заменяя таблицу, полученную на основе эксперимента, новой таблицей приближенных данных, график которых более близок к реальной кривой.

Сглаживание данных осуществляют при помощи многочленов, которые приближают группы данных по методу наименьших квадратов. Наилучшее сглаживание

достигается для значений функции, лежащих в середине таблицы. Поэтому берут нечетное количество данных. Числовые значения в начале и в конце таблицы сглаживаются с меньшим качеством.

Приведем выражения, описывающие алгоритмы сглаживания, основанные на использовании трех, пяти и семи текущих точек.

Формулы для результата Y_i линейного сглаживания в текущей точке с номером i для групп из *трех* значений y_{i-1} , y_i , y_{i+1} имеют вид :

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

Для первых трёх значений y_1 , y_2 , y_3 сглаживаем значения y_1 , y_2 . Затем берем следующую группу y_2 , y_3 , y_4 и сглаживаем значение функции y_3 и т.д.

Формулы для результата Y_i линейного сглаживания в текущей точке с номером i для групп из *пяти* значений y_{i-2} , y_{i-1} , y_i , y_{i+1} , y_{i+2} следующие :

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

Для первых пяти значений y_1 , y_2 , y_3 , y_4 , y_5 сглаживаем значения y_1 , y_2 и y_3 . Затем берем следующую группу y_2 , y_3 , y_4 , y_5 , y_6 и сглаживаем значение функции y_4 и т.д.

Формулы для результата Y_i сглаживания в текущей точке с номером i для групп из *семи* значений y_{i-3} , y_{i-2} , y_{i-1} , y_i , y_{i+1} , y_{i+2} , y_{i+3} следующие :

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

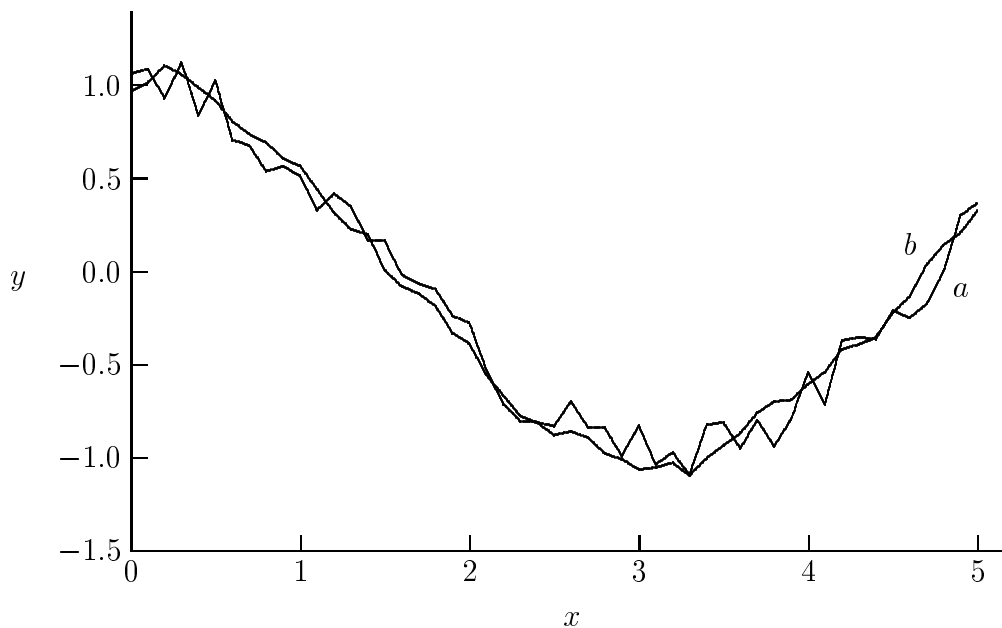


Рисунок 1.6 — К сглаживанию функций; кривая a — функция $y = \cos(x)$, возмущенная шумом, равномерно распределенным на интервале $(-0.18, 0.18)$; кривая b — результат сглаживания семиточечным фильтром

Для первых семи значений $y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7$ сглаживаем значения y_1, y_2, y_3 и y_4 . Затем берем следующую группу $y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7, y_8$ и сглаживаем значение функции y_5 и т.д.

Пример

Пусть имеется массив значений аргументов $x_n = 0,1n$ и значений функции $y_n = \cos(x_n)$, где $n = -3, -2, -1, 0, \dots, 50, 51, 52, 53$. Эти значения возмущены шумом, т.е.

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

где $\{u_n\}$ — массив значений случайной величины (рис. 1.6), которая равномерно распределена на интервале $(-0,18; 0,18)$.

Требуется получить массив $\{y_n\}$, где $n = 0, 1, \dots, 49, 50$, содержащий сглаженные значения функции.

Решение

Для построения сглаживающего фильтра используем формулу (1.59), отвечающую алгоритму сглаживания по семи текущим точкам.

Возмущенная кривая и её сглаженный аналог (результат использования фильтра) приведены на рис. 1.6. Отметим, что для получения массива из 51 значения оказалось необходимым использовать массив из 57 исходных значений.

Определение вида функциональной зависимости имеет свои особенности. Соединив экспериментальные точки отрезками прямых, мы получим ломаную линию, не имеющую, возможно, ничего общего с отыскиваемой экспериментальной зависимостью. Форма её не восстановится при повторном измерении, так как каждый результат измерений сопровождается случайными ошибками. Линейное сглаживание

делает кривую более гладкой, а осцилляции при этом нивелируются. Обычно хорошие результаты дает повторное сглаживание по пяти точкам.

Совокупность точек, участвующих в формировании результата сглаживания, образует *текущее окно*. Так, в формулах (1.57), (1.58), (1.59) текущее окно соответственно образовано из 3, 5 и 7 точек, которые симметрично прилегают к заданной с номером i . При обработке данных, удаленных от конечных точек, можно пользоваться выражениями, расположенными в середине указанных формул.

Линейный оператор сглаживания типа (1.57)–(1.59) называется *линейным сглаживающим фильтром*. Коэффициенты фильтра на практике выбирают различными способами. В цифровой технике реализуют разнообразные фильтры (сглаживания, фильтрации, квантования, оценивания и др.), структура которых соответствует поставленным задачам. Так, например, $(2K + 1)$ -точечный *гауссов сглаживающий фильтр* шириной σ построен так:

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

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

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

1.16. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на десять часов и содержит пять заданий.

З а д а н и е 1

Напишите программу численного интерполирования. С помощью программы найдите приближенное значение функции при заданных значениях аргументов. При построении программы используйте интерполяционную формулу Лагранжа.

Исходные данные для программы:

N – число узлов интерполирования;

$\{x\}$ – массив аргументов в узлах интерполирования;

$\{f\}$ – массив функций в узлах интерполирования;

x – заданные значения аргумента.

Результат работы программы – массив, содержащий значения интерполируемых многочленов, полученных с помощью формулы Лагранжа.

З а д а н и е 2

Напишите программу численного интерполирования. Используйте интерполяционную формулу Лагранжа.

Исходные данные для программы:

x_0 – начальное значение равноотстоящих аргументных узлов;

h – постоянный шаг аргументных узлов;

Таблица 1.5 — Данные к заданию 1

n	Вариант 1		Вариант 2		Вариант 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

N – число узлов интерполирования;

$f(x)$ – интерполируемая функция.

Результат работы программы – массив, содержащий значения интерполирующих многочленов, полученных с помощью формулы Лагранжа.

Вариант 1

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

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

Вариант 2

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

$$x = 1,011; 1,174; 1,284; 1,331; 1,480; 1,521; 1,669; 1,747; 1,848.$$

Вариант 3

$$x_0 = 4,0; \quad h = 0,3; \quad N = 10; \quad f(x) = 1/(1+x);$$

$$x = 4,001; 4,373; 4,589; 4,673; 5,972; 6,326; 6,390.$$

З а д а н и е 3

На основе программы численного интерполирования найдите численно значения функции в заданном интервале.

Исходные данные для программы:

N – число узлов;

$\{x\}$ – массив аргументных интерполяционных узлов;

$\{f\}$ – массив функциональных интерполяционных узлов.

Результат работы программы – значение функции при заданном значении аргумента, полученное с помощью интерполяционных формул Ньютона.

Вариант 1

$$N = 10;$$

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

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

Найдите значение функции при $x = 2,02; 2,44; 2,78$.

Вариант 2

$N = 10$;

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

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

Найдите значение функции при $x = 5,025; 5,337; 5,662$.

Вариант 3

$N = 10$;

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

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

Найдите значение функции при $x = 0,501; 1,085; 1,348$.

Вариант 4

$N = 7$;

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

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

Найдите значение функции при $x = 1,051; 1,088; 1,356$.

З а д а н и е 4

Составьте программу решения задачи линейного регрессионного анализа. Постройте модель уравнения линейной регрессии для приближения функции, заданной табличными значениями (табл. 1.6).

Таблица 1.6 — Данные к заданию 4

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

На основе составленной модели аппроксимирующей зависимости найдите параметры уравнения регрессии.

З а д а н и е 5

Составьте программу решения задачи нелинейного регрессионного анализа для вида регрессии, определенного заданием соответствующего варианта. Постройте мо-

дель уравнения нелинейной регрессии для приближения таблично заданной функции (табл. 1.7).

Таблица 1.7 — Данные к Заданию 5

Вариант	Функция						
	x	1	2	3	4	5	6
1	x	1	2	3	4	5	6
Гиперболическая	y	12,3	6,9	5,3	4,5	3,9	3,6
2	x	1	2	3	4	5	6
Степенная	y	2,1	8,2	18,2	32,3	50,4	73,1
3	x	1	2	3	4	5	6
Степенная	y	1,9	15,8	53,8	510,1	1248,2	2590,4
4	x	1	2	3	4	5	6
Показательная	y	4,1	8,3	16,2	32,4	65,1	128,8
5	x	1	2	3	4	5	6
Показательная	y	3,1	6,1	11,9	24,1	48,6	96,9
6	x	1	2	3	4	5	6
Логарифмическая	y	1,12	2,28	3,29	3,65	4,33	4,46

На основе составленной модели аппроксимирующей зависимости найдите параметры уравнения регрессии.

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание задания;
- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу исходных данных в узлах и таблицу значений функции при заданных значениях аргумента;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

1.17. Задания для проверки

1. В чем суть методов численного интерполирования функций?
2. Постройте явное аналитическое выражение для интерполяционного многочлена Лагранжа для случаев $N = 2, 3, 4$.
3. Постройте явное аналитическое выражение для интерполяционного многочлена Ньютона для $N = 2, 3, 4$.
4. Пусть функция $f(x)$ является постоянной на отрезке $[a, b]$. Покажите прямым вычислением, что значение интерполяционного полинома Лагранжа также равно этой постоянной.
5. Какие значения примет интерполяционный многочлен в узлах вне участка, заданного исходной таблицей?

6. Пусть для двух таблично заданных функций вторая отличается от первой на один узел, расположенный внутри таблицы. Проанализируйте, как будут отличаться соответствующие интерполяционные многочлены.

7. Для функции $f(x) = \exp(-2x)$ постройте интерполяционный многочлен Лагранжа в точках $x = 1, 2, 3, 4$.

8. Для функции $f(x) = \sin(x)$ постройте интерполяционный многочлен Лагранжа в точках $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$.

9. Для функции $f(x) = \cos(x)$ постройте интерполяционный многочлен Лагранжа в точках $x = 1,3; 1,4; 1,5; 1,6$, после чего с помощью обратного интерполирования определите ноль этой функции.

10. Для функции $f(x) = 0,5 - \exp(-x)$ постройте интерполяционный многочлен Лагранжа в точках $x = 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9$, после чего с помощью обратного интерполирования определите ноль этой функции.

11. Для функции $f(x) = \exp(x) - x^2$ постройте интерполяционный многочлен Лагранжа в точках $x = -1,5; -1,0; -0,5; 0,0; 0,5; 1,0; 1,5$, после чего с помощью обратного интерполирования определите ноль этой функции.

12. Составьте программу решения задачи линейной аппроксимации таблично заданной функции:

x	0	1	1,5	2,5	4,5	5	6
y	0	67	101	168	301	334	404

Найдите параметры уравнения регрессии методом наименьших квадратов и составьте модель аппроксимирующей зависимости $y = ax + b$.

13. Воспользовавшись критериями (1.42) отбора вида приближающих функций, найдите модель эмпирической зависимости для следующих таблично заданных функций:

Вариант	Функция								
1	x	1	2	3	4	5	6	7	8
	y	521	308	240	204	183	171	159	152
Вариант	Функция								
2	x	1	2	3	4	5	6	7	8
	y	57	67	82	201	240	474	491	518

14. В чем суть приближения таблично заданной функции по методу наименьших квадратов?

15. Каким образом задачи приближения функции различными нелинейными приближающими функциями можно свести к задаче приближения линейными функциями?

16. Составьте функциональную блок-схему построения интерполяционного многочлена Лагранжа.

17. Составьте функциональную блок-схему построения первой и второй интерполяционной формулы Ньютона.

2. Нахождение нулей функций

2.1. Основные теоретические положения

При решении практических задач часто приходится сталкиваться с уравнениями, в частности, с нелинейными. Решение таких уравнений – не только важная самостоятельная задача, но и часть других задач вычислительной математики, например, решения дифференциальных уравнений или нахождения собственных значений матрицы.

Уравнения, содержащие только целые степени аргумента, называются *алгебраическими*.

Трансцендентными уравнениями называются нелинейные уравнения, содержащие показательную, тригонометрические или другие специальные функции.

Применение прямых методов решения подобных уравнений в общем случае возможно лишь для алгебраических уравнений (кроме, может быть, некоторых специально подобранных случаев), причем при порядке не более четвертого. Поэтому на первый план выходят итерационные методы, особенно при наличии эффективных компьютерных алгоритмов.

Уравнения с одним неизвестным можно записать в виде

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

Совокупность значений переменных x , при которых это уравнение обращается в тождество, называется *решением* этого уравнения. Каждое значение x из этой совокупности называется *корнем* уравнения, или *нулем функции* $f(x)$.

В уравнении (2.1) функции $f(x)$, как правило, являются нелинейными.

Решение задачи нахождения нулей функции, как правило, проводят в два этапа.

На первом (исходном) этапе исследуют ход функции, в результате чего отделяют (локализуют) участки, на каждом из которых находится один корень (с учетом его кратности). При этом необходимо использовать любые дополнительные сведения о ходе функции и её производных. Ход решения на этом этапе в большой степени зависит от особенностей рассматриваемой функции $f(x)$ и будет тем успешней, чем лучше локализован искомый нуль. Часто, например, применяется *графический анализ* уравнения (2.1). При этом можно записать исходное уравнение $f(x) = 0$ в эквивалентном виде $\varphi(x) = \psi(x)$, тогда решения будут даны абсциссами точек пересечения двух кривых $y = \varphi(x)$ и $y = \psi(x)$. При удачном выборе анализ этих кривых может оказаться эффективней, чем анализ исходной кривой $f(x) = 0$. Разумеется, даже при тщательном выполнении эскизов функций значения корней можно получить лишь с небольшой точностью. Поэтому чтобы эти значения

получить с заданной точностью, необходимо применять методы, которые позволяют находить оценки искомых корней функций.

На втором (заключительном) этапе решения рассматривают конкретный локальный участок (интервал), содержащий один нуль функции, после чего находят этот нуль, применяя тот или иной подходящий метод.

При нахождении действительных корней часто используют следующие три теоремы. Первые две из них позволяют отделить корни, т.е. установить возможно близкие промежутки $[a, b]$, в которых содержится один и только один корень уравнения, а третья – оценить степень приближения.

Теорема 1. Если непрерывная на отрезке $[a, b]$ функция $f(x)$ принимает значения разных знаков на концах отрезка $[a, b]$, т.е. $f(a) \cdot f(b) < 0$, то внутри этого отрезка содержится по крайней мере один корень уравнения $f(x) = 0$, т.е. найдется хотя бы одно число x_* , такое, что $f(x_*) = 0$.

Теорема 2. Если функция $f(x)$ непрерывна и монотонна на отрезке $[a, b]$ и принимает на концах отрезка значения разных знаков, то внутри этого отрезка содержится корень уравнения $f(x) = 0$ и этот корень единственный.

Теорема 3. Пусть x_* – точный, а ξ – приближенный корень уравнения $f(x) = 0$, находящиеся на одном и том же отрезке $[a, b]$; причем $|f'(x)| \leq m$, где m – некоторая константа. Тогда

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

Перейдем к рассмотрению конкретных методов нахождения нулей функции, применение которых распространено на практике. При этом ограничимся случаем уравнений с вещественными коэффициентами. Решения уравнений, т.е. соответствующие нули функций, могут оказаться как вещественными, так и комплексными.

2.2. Метод половинного деления

Этот метод еще называют *методом дихотомии*, или *методом Больцано*.

Пусть корень x_* уравнения $f(x) = 0$ отделен и находится на отрезке $[a, b]$, т.е. $f(a) \cdot f(b) < 0$. Возьмем середину отрезка $c = (a + b)/2$. Если $f(c) = 0$, то c – точный корень уравнения. Если $f(c) \neq 0$, то из двух образовавшихся отрезков $[a, c]$ и $[c, b]$ выберем тот, на концах которого функция $f(x)$ принимает противоположные по знаку значения (рис. 2.1). Получим отрезок в два раза короче, который обозначим $[a_1, b_1]$. Продолжая этот процесс, получим отрезок $[a_n, b_n]$ длиной $L = (b - a)/2^n$, где n – число этапов деления. Процесс деления прекращаем, если $L < \varepsilon$, где ε – заданная точность нахождения нуля.

Метод дихотомии используется при поиске вещественных нулей функции.

Этот метод наиболее универсален. Он гарантирует получение решения для непрерывной функции $f(x)$, если найден интервал, на котором она меняет знак. Чаще всего им пользуются на этапе локализации нулей.

2.3. Метод хорд

В основе этого метода лежит линейная интерполяция по двум значениям функции, имеющим противоположные знаки, т.е. на достаточно малом промежутке $[a, b]$ дуга кривой $f(x)$ заменяется стягивающей её хордой. Сходимость метода гарантируется лишь в малой окрестности нуля функции при условии, что знаки первой и второй производных неизменны на промежутке $[a, b]$.

Метод хорд используется при поиске вещественных нулей функции.

Пусть, например, $f(a) > 0$ и $f(b) < 0$ (рис. 2.2).

Если $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, то итерационный процесс

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

сходится к нулю x_* функции $f(x)$.

Если же $f'(x) \cdot f''(x) < 0$, то нуль функции ищут так:

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

Процесс продолжается до выполнения условия $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$.

При выборе формулы итерационного процесса пользуются следующим правилом: *неподвижным концом отрезка является тот, для которого знак функции совпадает со знаком ее второй производной*. Этот метод применяется для отыскания действительных корней действительных функций на достаточно малых отрезках, на которых сохраняются знаки производных.

Для оценки погрешности можно пользоваться общей формулой

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

2.4. Метод Ньютона

Геометрический смысл метода Ньютона состоит в том, что дуга кривой $y = f(x)$ заменяется касательной к этой кривой (поэтому метод имеет второе название – *метод касательных*).

Последовательность приближенных значений $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ определяется из соотношения (рис. 2.3)

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

При выборе начального приближения корня необходимо руководствоваться следующим правилом: за исходную точку x_0 выбирают тот конец отрезка $[a, b]$, в котором знак функции совпадает со знаком второй производной.

Для оценки погрешности можно пользоваться общей формулой

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

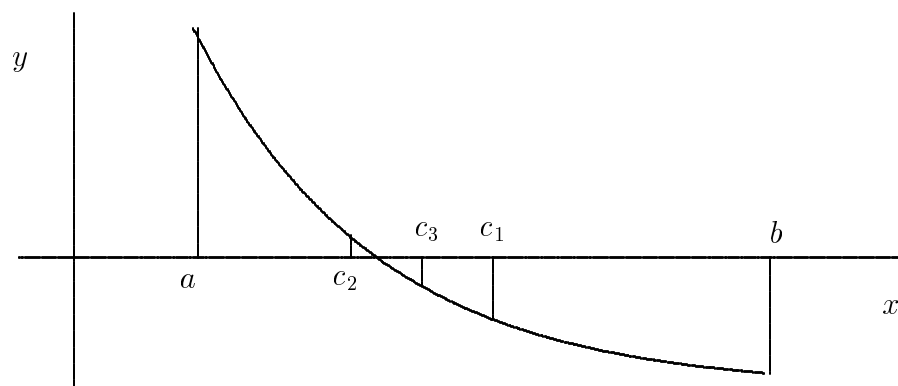


Рисунок 2.1 — Метод дихотомии

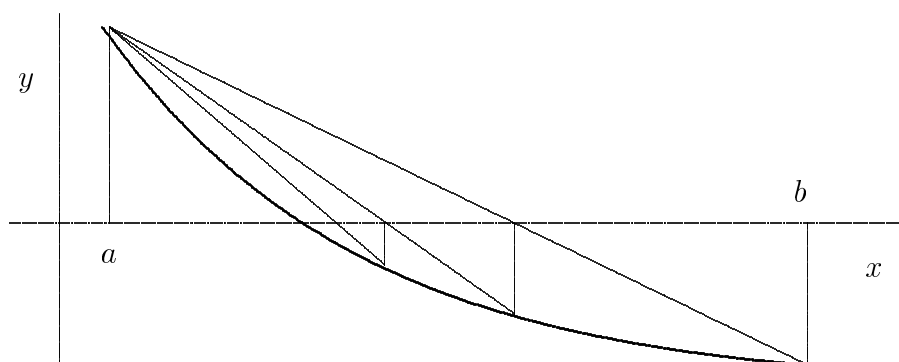


Рисунок 2.2 — Метод хорд

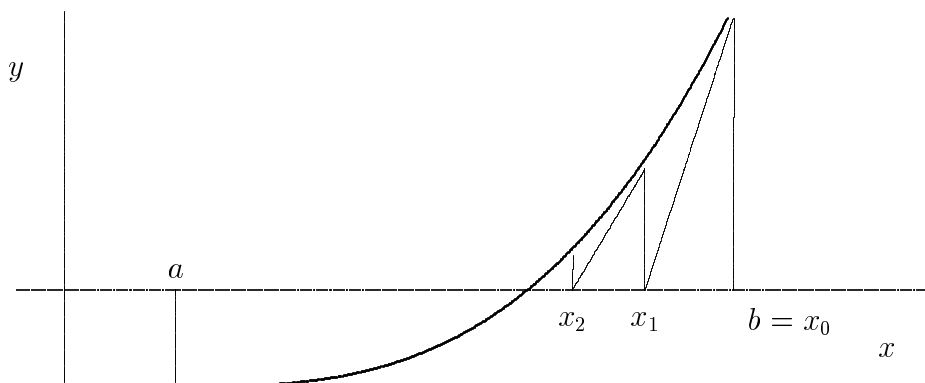


Рисунок 2.3 — Метод Ньютона (касательных)

Как и в методе хорд, сходимость метода гарантируется лишь в малой окрестности нуля функции при условии, что знаки первой и второй производных неизменны на промежутке $[a, b]$.

Если $f''(x)$ меняет знак в промежутке $[a, b]$, то может оказаться, что вторые приближения x_2 последовательности (2.6) окажутся хуже, чем первые. Поэтому так полезно перед вычислением детально ознакомиться с графиком функции $f(x)$ на интервале $[a, b]$.

Если метод Ньютона применяется тогда, когда $f''(x)$ меняет знак, или если его применение осуществлено без исследования функции $f(x)$, получаемая последовательность $\{x_n\}$ может сходиться к требуемому корню или к другому возможному корню, или расходиться, или испытывать циклическое движение.

Если иметь возможность каждый раз вычислять значение функции $f(x)$ с достаточной точностью, то метод хорд и метод касательных позволяют находить корень функции с той же точностью.

Однако, если значение $f(x)$ находится из таблиц, которые заведомо содержат погрешность задания функции, а также погрешность значения этой функции, то и корень можно получить только с ограниченной точностью.

Если $\delta f(x)$ – полученная при вычислении $f(x)$ ошибка, то она ухудшает точность вычисления нуля x_* функции на такую величину δx , что

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

Отметим, что методом Ньютона удобно пользоваться при отыскании комплекснозначных нулей вещественной функции или (в общем случае) при отыскании комплекснозначных нулей комплекснозначной же функции. Такого рода задачи удобно выполнять в программных средах, включающих действия с комплекснозначными переменными.

2.5. Комбинированный метод хорд и касательных

Методы хорд и касательных дают приближенное значение корня с различных сторон, поэтому их часто применяют в сочетании друг с другом. В результате уточнение корня происходит быстрее.

Пусть дано уравнение $f(x) = 0$ и корень x_* отделен и находится на отрезке $[a, b]$.

Далее возможны два случая.

Случай 1. Если $f'(x)f''(x) > 0$, то со стороны конца a ищут корень по методу хорд, а со стороны конца b – по методу касательных:

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n - f(a_n)(b_n - a_n)/[f(b_n) - f(a_n)], \\ b_{n+1} &= b_n - f(b_n)/f'(b_n). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Случай 2. Если $f'(x)f''(x) < 0$, то со стороны конца a ищут корень по методу касательных, а со стороны b – по методу хорд:

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n - f(a_n)/f'(a_n), \\ b_{n+1} &= b_n - f(b_n)(b_n - a_n)/[f(b_n) - f(a_n)]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

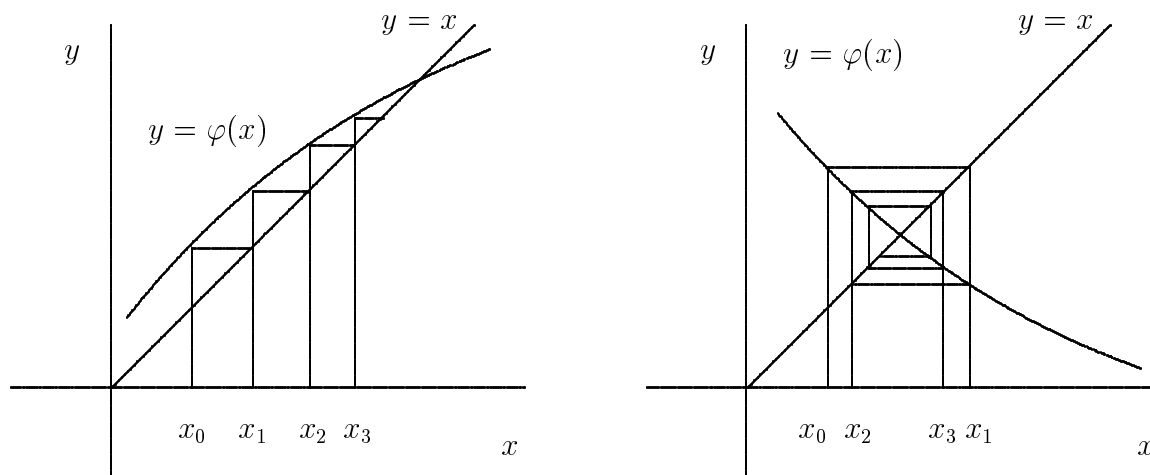


Рисунок 2.4 — Итерационный метод нахождения нуля функции $f(x)$, $|\varphi'(x)| < 1$; слева: $0 < \varphi'(x) < 1$; справа: $-1 < \varphi'(x) < 0$

Комбинированный метод удобен при оценке погрешности вычислений. Процесс вычисления прекращают, как только станет выполняться неравенство $(b_n - a_n) < \varepsilon$. За приближенное значение корня следует принять

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

2.6. Метод итераций (метод последовательных приближений)

Пусть для заданного уравнения $f(x) = 0$ требуется определить корень x_* , заключенный на отрезке $[a, b]$.

Заменим уравнение $f(x) = 0$ равносильным ему уравнением

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

Соответствующая итерационная формула имеет вид

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

Итерационный процесс будет сходиться, если выполнены следующие условия:

- 1) функция $g(x)$ имеет значения только на интервале $[a, b]$;
- 2) во всех точках интервала $[a, b]$ функция $g(x)$ удовлетворяет неравенству

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

т.е. модуль её производной строго меньше единицы.

Уравнение $f(x) = 0$ к виду $x = g(x)$ можно привести различными способами, однако для метода итерации следует выбрать то уравнение вида $x = g(x)$, для

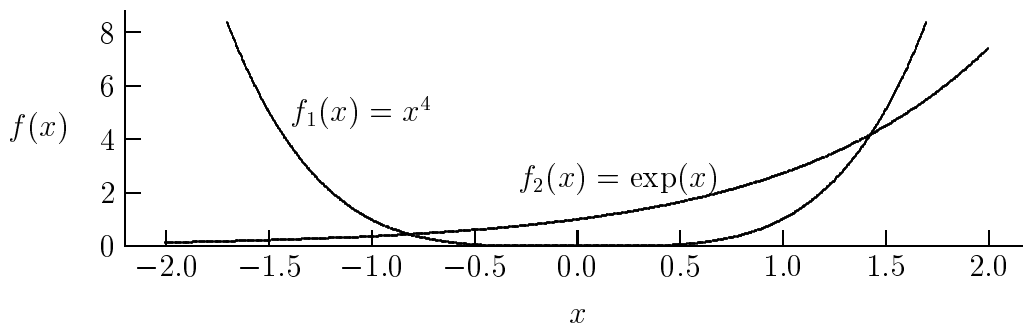


Рисунок 2.5 — Функции $f_1(x) = x^4$ и $f_2(x) = \exp(x)$

которого выполняются приведенные условия (рис. 2.4). Чем меньше $|g'(x)|$, тем будет лучше сходиться итерационный процесс.

О преобразовании (2.12) говорят, что функция $g(x)$ является *сжимающим оператором* со свойством (2.14).

Погрешность метода

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

2.7. Примеры нахождения нулей нелинейного уравнения

Приведем два примера нахождения нулей нелинейного уравнения.

Пример 1

Рассмотрим задачу нахождения на интервале $(-2, 2)$ вещественных нулей функции

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

В качестве алгоритма нахождения нуля выберем метод итерации.

В задачах такого рода особенно важно предварительно визуально изучить области возможных нулей x_* .

Из рис. 2.5 видно, что на указанном интервале имеется два нуля. Их области локализации – первый нуль: $-1, 0 \leq x_*^{(1)} \leq -0, 5$; второй нуль: $1, 0 \leq x_*^{(2)} \leq 1, 5$.

Для поиска первого корня $x_*^{(1)}$ заменим уравнение $f(x) = 0$ в соответствии с (2.13) рекуррентным соотношением

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

Знак ”-” здесь указан, так как $x < 0$.

Для функции $g_1(x) = -\exp(x/4)$, как можно убедиться, на интервале $(-1, 0; -0, 5)$ выполняется условие $|g_1'(x)| < 1$. После 10 итераций получаем $x_*^{(1)} = -0, 815553$.

Для поиска второго корня $x_*^{(2)}$ используем соотношение

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

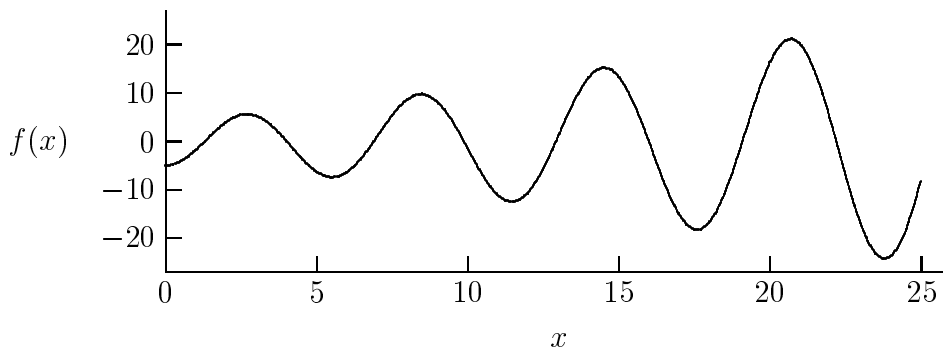


Рисунок 2.6 — Дисперсионная функция $f(x) = x \sin x - 5 \cos x$

Для функции $g_2(x) = \exp(x/4)$ на интервале $(1, 0; 1, 5)$ также выполняется условие $|g_2'(x)| < 1$. После 12 итераций получаем $x_*^{(2)} = 1, 429612$.

Пример 2

Рассмотрим пример поиска вещественных нулей функции (рис. 2.6)

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

При этом ограничимся нахождением значений первых 6 нулей с абсолютной точностью $\varepsilon = 10^{-5}$.

Из рис. 2.6 видно, что в качестве границ $x_{\min}^{(k)}$, $x_{\max}^{(k)}$ областей локализации k -го корня ($k = 1, \dots, 6$) можно выбрать:

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

Построение алгоритмов дихотомии, хорд и касательных непосредственно следует из вида функции $f(x)$, а также её первой и второй производных на интервале.

В свою очередь, при построении алгоритма метода итераций необходимо учесть периодические свойства входящих в $f(x)$ функций. Это дает из (2.13)

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

Результаты нахождения указанными методами 6 корней приведены в табл. 2.1.

В ней приведены значения:

I_{iter} — количество итераций, потребовавшихся для достижения заданной абсолютной точности $\varepsilon = 10^{-5}$;

x_* — найденные значения 6 корней функции;

f_* — значения функции в найденных корнях.

Таблица 2.1 — Результаты поиска нулей дисперсионной функции

Номер нуля	Значения результатов	Метод дихотомии	Метод хорд	Метод Ньютона	Метод итераций
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

Из приведенных данных следует, что все использованные методы дают достаточные результаты. При этом, хотя методом дихотомии корни находятся медленнее, чем другими методами, именно этот метод не требует дополнительного исследования поведения производных функций и *всегда* определяет искомый корень. Методом Ньютона получаются решения, у которых $f_* = f(x_*) = 0,000000$.

При поиске нулей очень важно выбрать *область локализации*, относящейся к каждому из нулей. Эта задача, достаточно простая в скалярном случае, быстро усложняется с увеличением числа переменных.

2.8. Решение систем нелинейных уравнений

Рассмотрим систему из M уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0, \\ \dots\dots\dots \\ f_M(x_1, x_2, \dots, x_M) = 0 \end{array} \right. \quad (2.16)$$

относительно набора из M переменных $X = (x_1, x_2, \dots, x_M)$ для набора заданных функций $F = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_M(X))$.

Опишем два распространенных метода, используемых для нахождения решений системы (2.16).

Метод простых итераций

Заключается в реализации итерационного процесса по следующей формуле

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

эквивалентной исходной системе (2.16).

При этом $X^{(0)}$ – начальный набор переменных, который определяется на исходном этапе работы графическим или каким-либо иным способом.

Векторнозначную функцию $G(X) = (g_1(X), g_2(X), \dots, g_M(X))$ выбирают аналогично тому, как это было в скалярном случае.

Она должна удовлетворять следующим условиям:

а) значения $X^{(0)}$ и все последующие приближения $X^{(n)}$ должны принадлежать области, в которой находится единственное решение исходной системы нелинейных уравнений;

б) во всех точках указанной области должны выполняться неравенства

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

или неравенства

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

По выполнении этих условий итерационный процесс последовательных приближений сходится к решению.

Метод Ньютона

Этот метод является наиболее распространенным при решении систем нелинейных уравнений и реализуется при помощи следующего алгоритма.

1. Задаем абсолютную погрешность ε и вектор начальных приближений

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

2. Используя явный вид набора функций $f_1(X), f_2(X), \dots, f_M(X)$, формируем матрицу Якоби W со следующими матричными элементами:

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

3. В цикле по номеру итераций проверяем, что $\det(W) \neq 0$, после чего составляем систему линейных уравнений

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

обращаем матрицу Якоби и получаем формулу для итерационного процесса

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

4. На каждом шаге проверяем набор условий

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

После его выполнения итерационный цикл прекращаем.

Сходимость метода последовательных приближений и метода Ньютона сильно зависит от выбора начальной точки. Важным их преимуществом является высокая скорость сходимости.

2.9. Метод Ньютона для системы двух уравнений

Рассмотрим систему двух уравнений

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

Здесь $f(x, y)$ и $g(x, y)$ – непрерывные и дифференцируемые функции.

Пусть оказались найденными n -е приближения x_n, y_n неизвестных x, y . Для более точных приближений x_{n+1}, y_{n+1} можно получить

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

Тогда систему (2.24) запишем в виде:

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

Разложим функции $f(x, y)$ и $g(x, y)$ в ряд Тейлора в окрестности точки с координатами (x_n, y_n) :

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

где слагаемые $O(\Delta x_n, \Delta y_n)$ содержат члены более высокого порядка малости, чем Δx_n и Δy_n . Ограничимся в системе (2.26) лишь линейными слагаемыми относительно Δx_n и Δy_n . Тогда получим

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

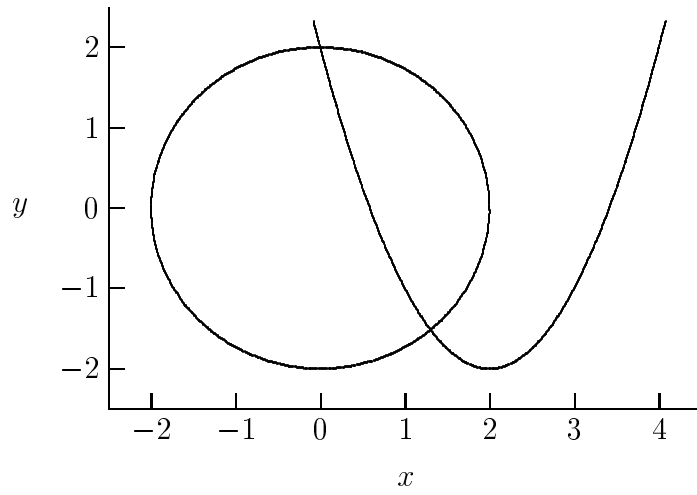


Рисунок 2.7 — Функции $f(x, y) = x^2 + y^2 - 4$ и $g(x, y) = (x - 2)^2 - y - 2$

Выражение (2.28) можно рассматривать как систему уравнений относительно неизвестных приращений Δx_n и Δy_n . Запишем её в стандартном виде

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

В точке с координатами $x = x_n, y = y_n$ введем обозначение для функций

$$f_n = f(x_n, y_n), \quad g_n = g(x_n, y_n)$$

и для частных производных (также при $x = x_n, y = y_n$)

$$\begin{aligned} f'_{xn} &= \partial f(x, y)/\partial x, & f'_{yn} &= \partial f(x, y)/\partial y, \\ g'_{xn} &= \partial g(x, y)/\partial x, & g'_{yn} &= \partial g(x, y)/\partial y. \end{aligned}$$

Тогда решение системы (2.29) можно записать в следующем виде :

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

Теперь можно записать

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

Как и в других методах, начальные значения координат x_0 и y_0 необходимо задавать, опираясь на априорные сведения, например из графических построений.

Пример

Рассмотрим систему из двух уравнений (рис. 2.7)

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

Пользуясь методом Ньютона, найдем решение.

1. Введем две функции :

$$f(x, y) = x^2 + y^2 - 4;$$

$$g(x, y) = (x - 2)^2 - y - 2,$$

а также их производные :

$$f'_x(x, y) = \partial f(x, y)/\partial x = 2x;$$

$$f'_y(x, y) = \partial f(x, y)/\partial y = 2y;$$

$$g'_x(x, y) = \partial g(x, y)/\partial x = 2(x - 2);$$

$$g'_y(x, y) = \partial g(x, y)/\partial y = -1.$$

2. Построим графические зависимости для функций $f(x, y)$ и $g(x, y)$.

Из рис. 2.7 видно, что вещественных корней два. Интервалы, в которых содержатся корни :

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

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

Таблица 2.2 — Итерационная таблица поиска первого нуля

Номер итерации n	Результаты вычислений			
	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

3. Поиск первого корня.

3.1. Задаем стартовый вектор начальных приближений искомого нуля системы $X^{(0)} = (x_0, y_0) = (0, 0; 1, 0)$.

3.2. На основе алгоритма (2.29)–(2.31) находим решение (см. табл. 2.2).

Таблица 2.3 — Итерационная таблица поиска второго нуля

Номер итерации n	Результаты вычислений			
	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

4. Поиск второго корня.

4.1. Задаем стартовый вектор начальных приближений искомого нуля системы $X^{(0)} = (x_0, y_0) = (2, 0; -2, 0)$.

4.2. На основе алгоритма (2.29)–(2.31) находим решение (см. табл. 2.3).

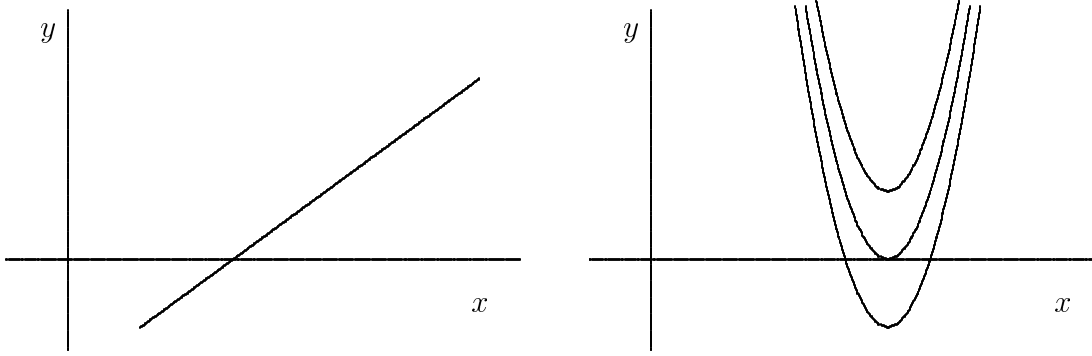


Рисунок 2.8 — Нули полиномов; слева: $n = 1$; один простой ноль; справа: $n = 2$; вещественных нулей нет (сверху), один ноль двойной кратности (посередине), два простых вещественных нуля (снизу)

2.10. Нули полиномов

Определение нулей полиномов можно выполнить с помощью *прямых методов* (для полиномов до четвертой степени включительно). Удобно записывать полиномы $P_n(x)$ так, чтобы коэффициент при старшей степени переменной x равнялся единице.

Полином первой степени (рис. 2.8)

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

имеет решение

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

Полином второй степени

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

имеет два корня:

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

При $b^2 - 4c = 0$ эти корни совпадают. Отметим, что $x_1 + x_2 = -b$ и $x_1 \cdot x_2 = c$.

Полином третьей степени (рис. 2.9) обычно записывают в виде

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

Его нули следующие :

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

где

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

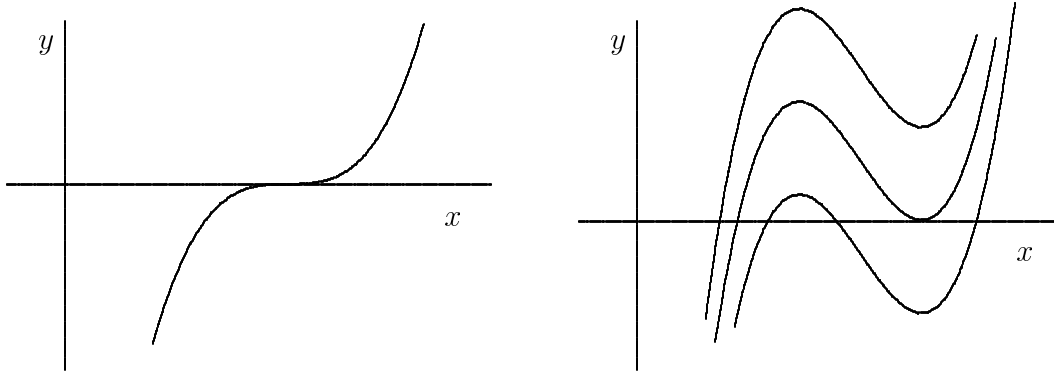


Рисунок 2.9 — Вещественные нули полинома, $n = 3$; слева: кратность нуля — 3; справа: один простой (сверху), один простой и один двойной кратности (посередине), три простых нуля (снизу)

при этом

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

причем в качестве A и B берут любую пару кубических корней, удовлетворяющих соотношению $AB = -p/3$.

Это — решение Кардано.

Если полином (2.36) имеет вещественные коэффициенты, то уравнение $P_3(x) = 0$ имеет по крайней мере один вещественный корень и два сопряженных комплексных корня.

Уравнение четвертой степени

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

подстановкой $x = y - a/4$ приводят к виду

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

Корни y_1, y_2, y_3, y_4 "неполного" уравнения четвертой степени равны одному из выражений

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

в которых сочетания знаков подбираются так, чтобы удовлетворялось условие $\sqrt{z_1}\sqrt{z_2}\sqrt{z_3} = -q/8$, причем z_1, z_2, z_3 — корни кубического уравнения

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

Это — решение Декарта-Эйлера.

Уравнения пятой степени и более высоких степеней решений в радикалах не имеют (кроме специально подобранных случаев).

Для нахождения нулей уравнения $P_n(x) = 0$, где $n = 5, 6, \dots$, уже необходимо применять численные или приближенные методы.

2.11. Общие свойства алгебраических уравнений

Применительно к алгебраическим уравнениям можно указать ряд свойств, использование которых позволяет ускорить процесс решения задачи.

Общий вид алгебраического уравнения n -й степени:

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

Обычно удобно записывать полином в таком виде, чтобы коэффициент a_n при старшей степени x^n равнялся единице.

Кратность корня z_* равна k , если

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

$$P_n^{(k)}(z_*) \neq 0.$$

Другими словами, полином $P_n(x)$, имеющий корень z_* кратности k , может быть представлен в виде

$$P_n(x) = (x - z_*)^k P_{n-k}(x), \quad (2.43, b)$$

где $P_{n-k}(x)$ – полином степени $n - k$.

Свойства алгебраических уравнений:

1. *Основная теорема алгебры Гаусса.*

Алгебраическое уравнение порядка n имеет n корней, которые могут быть как действительными, так и комплексными. При этом каждый корень считается столько раз, какова его кратность.

Если все коэффициенты $\{a\}$ уравнения (2.42) действительные, то все комплексные корни образуют комплексно-сопряженные пары.

Если все коэффициенты $\{a\}$ уравнения (2.42) действительные, а степень n полинома $P_n(x)$ нечетная, то полином имеет хотя бы один вещественный нуль.

2. *Теорема Декарта.*

Число положительных действительных корней (каждый учитывается столько раз, какова его кратность) уравнения $P_n(x) = 0$ с действительными коэффициентами либо равно числу перемен знаков в последовательности коэффициентов $\{a\}$, либо на четное число меньше (равные нулю коэффициенты не учитываются).

3. *Теорема Лагранжа.*

Если коэффициенты полинома

$$P_n(x) = b_0 x^n + b_1 x^{n-1} + b_2 x^{n-2} + \dots + b_{n-1} x + b_n$$

удовлетворяют условиям $b_0 \geq 0, b_1 \geq 0, b_2 \geq 0, \dots, b_{m-1} \geq 0$, а при этом для некоторого m выполняется $b_m < 0$, то максимальная граница корней уравнения $P_n(x) = 0$ находится по формуле

$$R = 1 + (B/b_0)^{1/m}, \quad (2.44)$$

где B – наибольшая из абсолютных величин отрицательных коэффициентов полинома $P_n(x)$.

4. Правило Безу.

Пусть полином $P_n(x)$, у которого $a_n = 1$, имеет набор нулей $z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, z_n$ (с учетом кратности) уравнения $P_n(x) = 0$. Тогда полином $P_n(x)$ может быть записан в следующем факторизационном представлении

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

Это представление можно использовать для контроля найденных значений нулей $z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, z_n$.

Например,

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

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

где a_{n-1} – коэффициент при x^{n-1} и a_0 – свободный член полинома.

Поэтому каждый полином $P_n(x)$ характеризуется инвариантными свойствами, т.е. обладает набором инвариантов, например, набором коэффициентов $\{a_j\}$ или набором его нулей $\{z_j\}$, $j = 1, 2, \dots, n$.

5. Теорема Гюа.

Если уравнение $P_n(x) = 0$ имеет действительные корни и действительные коэффициенты, то

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

2.12. Численное нахождение нулей полиномов

Задача нахождения нулей полиномов является неустойчивой задачей, поскольку значения нулей оказываются весьма чувствительными к изменению коэффициентов. В этом легко убедиться, рассмотрев, например, полиномы

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

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

Они отличаются только свободными членами на величину 10^{-10} . Между тем, у первого многочлена единственный вещественный нуль $z = 1$ кратности 10, а у второго многочлена 10 однократных корней:

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

В общем случае необходимо исходить из того, что корни многочлена являются комплексными. Кроме того, комплексными могут быть и его коэффициенты.

Задачу нахождения нулей обычно выполняют в три этапа.

Этап 1.

На этом этапе корни *локализуют (изолируют)*. С этой целью определяют *мажорантную область*, т.е. район на комплексной плоскости, в котором достоверно содержатся все нули. В мажорантной области образуют область просмотра Ω . Локализацию нулей полинома N -й степени $P_N(z)$ осуществляют с помощью вещественной функции

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

Таким образом, минимумы функции $M(z)$, равные нулю, совпадают с корнями полинома $P_N(z)$. Для поиска минимумов заданной функции двух аргументов разработано много разнообразных численных методов. Минимумы могут быть расположены достаточно близко, а если корни кратны – то совпадать. В этом случае число минимумов меньше степени полинома. Если число нулей не слишком велико, нули можно локализовать визуально. Вместе с местом локализации конкретного нуля выделяют его мажорантную область, т.е. район на комплексной плоскости, содержащий только один нуль.

Этап 2.

В мажорантной области, принадлежащей, например, конкретному нулю z_1 , *уточняют* его значение. Здесь применяют такие итерационные методы, как метод хорд или метод Ньютона, которые допускают использование комплекснозначных переменных. Начальное значение при этом берется в мажорантной области как можно ближе к предполагаемой точке корня. Найденное значение корня z_1 выделяют

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

а с новым полиномом $P_{N-1}(z)$, степень которого на единицу меньше, продолжают работу согласно этапу 1.

Этап 3.

На этом этапе все найденные нули *проверяют* путем прямой подстановки в исходный полином. Проверяют также инвариантные свойства корней многочлена согласно (2.46).

Пример

Рассмотрим полином 5-й степени от комплекснозначного аргумента $z = x + iy$

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

В качестве алгоритма нахождения нуля выберем итерационный метод Ньютона. Поставим задачу изучения сходимости к нулю $z_1 = 0,5$ в зависимости от выбранного начального значения z_0 .

Решение

На комплексной z -плоскости \mathcal{Z} выберем прямоугольную область размерами $(-3, 0 \leq x \leq 3, 0)$, $(-1, 5 \leq y \leq 1, 5)$, которую равномерно заполним точками из двумерного массива начальных значений $\{z_{nm} = (x_n, y_m) \in \mathcal{Z}_0\}$, $n = 0, 1, \dots, N$, $m = 0, 1, \dots, M$. Общее количество $(N + 1) \times (M + 1)$ элементов массива \mathcal{Z}_0 связано

с требованием к качеству (разрешению), поэтому может быть выбрано, например, $N = 300$ и $M = 150$. Построим теперь рисунок, который называют *бассейном притяжения корня*.

При построении такого рода рисунка примем правило окрашивания :

– если при старте из очередной выбранной точки z_{nm} в результате применения алгоритма поиска нуля был найден корень $z_1 = 0,5$, то такие стартовые точки договоримся окрашивать, например, в черный цвет;

– если же при старте из очередной выбранной точки z_{nm} действие алгоритма привело к любому из четырех других нулей (z_2, z_3, z_4, z_5), то такие стартовые точки договоримся окрашивать, например, в белый цвет.

Рисунки такого вида удобно строить с помощью современных математических пакетов, например, Maple или Mathematica.

Организуем теперь двойной цикл по переменным x и y , по завершении которого заполним двумерный массив начальных значений $\{z_{nm} \in \mathcal{Z}_0\}$.

На рис. 2.10 показан бассейн притяжения корня $z_1 = 0,5$ полинома

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

точки которого указаны черным цветом. Точки, окрашенные белым цветом, принадлежат к бассейну притяжения других корней, значения которых составляют: $z_{2,3} = 0,2 \pm i0,2$; $z_{4,5} = -0,2 \pm i0,2$.

Видна чрезвычайно сложная граница бассейна притяжения (возможности печати не позволяют показать все пять бассейнов притяжения).

На рис. 2.11 показан тот же бассейн притяжения корня $z_1 = 0,5$ полинома

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

у которого кроме корня $z_1 = 0,5$ значения других корней следующие: $z_{2,3} = 0,2 \pm i0,2$; $z_{4,5} = 0,2 \pm i0,2$.

Таким образом, у этого полинома имеется две пары кратных нулей.

Видно, что относительно небольшое изменение значения или структуры корней определяюще влияет на вид бассейна.

Про рисунки такого типа говорят, что они обладают *фрактальными свойствами*.

2.13. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на восемь часов и содержит четыре задания.

З а д а н и е 1

Напишите программу нахождения нуля заданной функции. Программа должна содержать четыре алгоритма, основанных на методе половинного деления, методе хорд, методе Ньютона и комбинированном методе хорд и касательных.

Исходные данные для программы :

$[a, b]$ – интервал изоляции корня,

$f(x)$ – функция, нуль которой ищется.

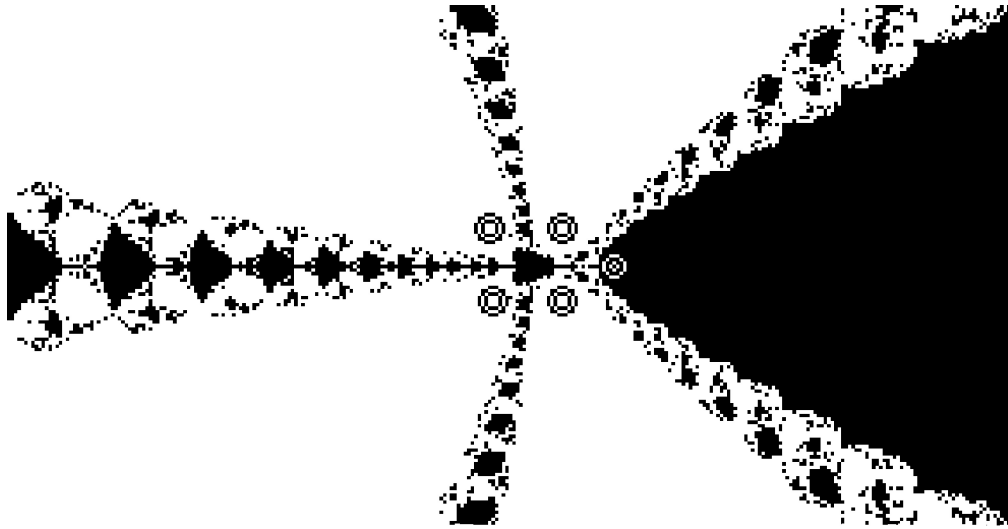


Рисунок 2.10 — Фрактальный бассейн притяжения корня $z_1 = 0,5$ полинома $P_5(z) = (z - 0,5)[(z + 0,2)^2 + 0,04][(z - 0,2)^2 + 0,04]$ (черным цветом окрашены стартовые точки $\{z_{nm}\}$, из которых при поиске нуля был найден корень $z_1 = 0,5$; кружками показаны координаты исходных корней)

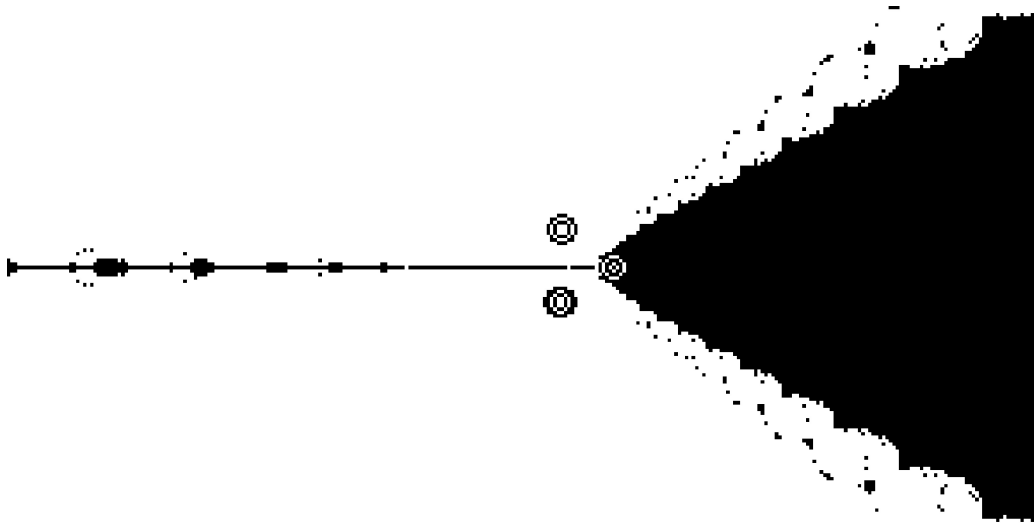


Рисунок 2.11 — Фрактальный бассейн притяжения корня $z_1 = 0,5$ полинома $P_5(z) = (z - 0,5)[(z - 0,2)^2 + 0,04]^2$ (черным цветом окрашены стартовые точки $\{z_{nm}\}$, из которых при поиске нуля был найден корень $z_1 = 0,5$; кружками показаны координаты исходных корней)

Результат работы программы – массив, содержащий таблицу последовательных приближений нуля функции и значений самой функции.

Варианты

- 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) $a = 0,00;$ $b = 0,50;$ $f(x) = (x - 0.25)^2;$
ж) $a = 0,00;$ $b = 0,50;$ $f(x) = (x - 0.25)^3.$

З а д а н и е 2

Напишите программу численного нахождения корня уравнения. Используйте метод последовательных приближений.

Исходные данные для программы:

$[a, b]$ – интервал изоляции корня,

$f(x)$ – функция в уравнении $f(x) = 0$, корень которого ищется.

Результат работы программы – массив, содержащий таблицу последовательных приближений корня уравнения и значений самой функции.

Варианты

- 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 д а н и е 3

Напишите программу численного решения системы нелинейных уравнений. Используйте метод последовательных приближений и метод Ньютона.

Исходные данные для программы:

M – число переменных;

X_0 – вектор начального приближения решения;

$F(X) = 0$ – набор уравнений, решение которых ищется.

Результат работы программы – массив, содержащий таблицу последовательных значений вектора решения, а также результат подстановки решения в каждое из уравнений заданной системы.

Варианты

а) $M = 2; \quad X_0 = (0, 5; 0, 5),$

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

б) $M = 2; \quad X_0 = (0, 5; 0, 2),$

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

в) $M = 2; \quad X_0 = (1, 0; 0, 47),$

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

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

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

З а д а н и е 4

Напишите программу нахождения нуля заданного полинома. Программа должна содержать проверку найденных нулей и выполнение инвариантных свойств (2.46).

Исходные данные для программы :

N – степень полинома;

$P_N(x)$ – полином, набор нулей которого ищется.

Результат работы программы – массив, содержащий таблицу значений нулей полинома, а также результат проверки инвариантных свойств (2.46).

Варианты

а) $N = 3; \quad P_N(x) = x^3 + 6x - 5;$

б) $N = 3; \quad P_N(x) = x^3 - 2x + 7;$

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

г) $N = 3; \quad P_N(x) = x^3 + 4x - 3.$

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание задания;
- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу последовательных приближений нуля функции и значений самой функции;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

2.14. Задания для проверки

1. Проведите классификацию методов нахождения нулей функции.
2. В чем отличие метода Ньютона от метода хорд?
3. В связи с чем для решения систем нелинейных уравнений возможно применение только итерационных методов?
4. Составьте алгоритмическую блок-схему решения системы нелинейных уравнений: а) по методу итераций, б) по методу Ньютона.
5. Какие из рассмотренных методов можно использовать для нахождения комплексных нулей полиномов?
6. Составьте блок-схему алгоритма нахождения нулей функции:
 - по методу дихотомии;
 - по методу хорд;
 - по методу Ньютона;
 - по комбинированному методу хорд и касательных;
 - по методу итераций.
7. Обоснуйте формулу, обобщающую итерационный процесс в методе Ньютона

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

8. Какие из рассмотренных методов можно использовать для нахождения нулей полиномов с комплексными коэффициентами?
9. Какие из описанных методов можно применять для нахождения комплексных нулей функции?

3. Численные методы линейной алгебры

3.1. Основные теоретические положения

Большое количество задач анализа и синтеза физических, технических, экономических систем различной природы на определенном этапе решения может быть сформулировано в терминах основных задач линейной алгебры. К ним, прежде всего, относятся: решение системы линейных алгебраических уравнений, нахождение собственных чисел, вычисление функций от матриц.

Основными объектами, с которыми выполняются численные методы линейной алгебры, являются векторы и матрицы.

Вектором $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ называется упорядоченная последовательность из N чисел.

Квадратной матрицей A размера N называется упорядоченная прямоугольная таблица, составленная из элементов и имеющая N строк и N столбцов

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \dots & a_{NN} \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Элементы матрицы A обозначаются через a_{ij} , где i – номер строки и j – номер столбца, на пересечении которых находится этот элемент.

Сокращенная запись :

$$A = [a_{ij}], \quad i, j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.2)$$

Если в матрице A поменять местами строки и столбцы, то получится матрица A^T , которая называется *транспонированной* по отношению к матрице A , т.е. $(A^T)_{ji} = A_{ij}$.

Элементы $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{NN}$ образуют *главную диагональ* матрицы A .

3.2. Методы решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

Рассмотрим систему из N линейных алгебраических уравнений с N неизвестными

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1N}x_N = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2N}x_N = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3N}x_N = b_3, \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + a_{N3}x_3 + \dots + a_{NN}x_N = b_N. \end{cases} \quad (3.3)$$

Для использования компактной записи введем вектор-столбец неизвестных X и вектор-столбец свободных членов B :

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

В таких обозначениях СЛАУ принимает вид

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

Применяемые на практике численные методы нахождения решения СЛАУ с точки зрения организации вычислений делятся на два класса: *прямые* (точные) и *итерационные* (приближенные). Прямыми называются методы, которые (в предположении, что вычисления ведутся без округлений) позволяют получить точное решение за конечное число арифметических операций. К числу таких методов относятся метод Крамера и метод Гаусса с выбором главного элемента. Итерационные методы (также в предположении, что вычисления ведутся без округления) дают приближенное решение системы с наперед заданной точностью. Можно сказать, что с помощью итерационного метода точное решение получается в результате бесконечного (предельного) процесса. Характерным примером является метод Зейделя.

Перед тем как перейти к описанию различных методов нахождения решения СЛАУ, подчеркнем, что любой из них должен завершаться *проверкой*, т.е. подстановкой найденного вектора решения в исходную систему.

3.3. Метод Крамера решения СЛАУ

Примем далее, что матрица A невырожденная, т.е. $\det A \neq 0$, и вектор свободных членов B ненулевой ($B \neq 0$).

Противный случай, когда $\det A = 0$ и $B = 0$, т.е. имеет место однородная СЛАУ, рассматривать не будем.

Если эти условия выполнены, система уравнений (3.3) имеет единственное решение. Значения неизвестных x_j ($j = 1, 2, \dots, N$) могут быть получены по *формуле Крамера*

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

Здесь $\det A$ – *определитель матрицы A* и $\det A_j$ – *определитель матрицы A_j* , которая образуется из матрицы системы A заменой её j -го столбца на столбец B свободных членов СЛАУ.

С практической точки зрения метод Крамера удобен в случае СЛАУ небольшой размерности, когда $N \leq 4$. С ростом размерности ($N \geq 5$) эффективность метода быстро снижается. Это связано с тем, что его реализация требует выполнения значительного количества арифметических операций (т.е. больших ресурсов).

Как недостаток данного метода следует отметить повышенную чувствительность к ошибкам округления.

Пример

Рассмотрим СЛАУ

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

Для неё

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

Поскольку число уравнений совпадает с числом неизвестных, решение существует и единственное. Для его нахождения вычислим:

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

Это дает

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

Подстановкой найденных решений в исходную СЛАУ убеждаемся, что уравнения, её образующие, обращаются в тождества.

3.4. Метод Гаусса с выбором главного элемента

Решение СЛАУ этим методом проводят в два этапа.

На первом этапе (*прямой ход*) последовательным исключением неизвестных составляют преобразованную эквивалентную систему уравнений с *треугольной матрицей*, у которой все элементы под главной диагональю равны нулю. При этом одно из уравнений (последнее) содержит только одно неизвестное, а в каждом последующем добавляется еще по одному переменному.

На втором этапе (*обратный ход*) решают преобразованную систему, последовательно определяя значения неизвестных.

Рассмотрим алгоритм метода подробнее.

Прямой ход.

1. Среди элементов a_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, N$) матрицы A выбирают наибольший по модулю a_{pq} , называемый *главным элементом*. Соответствующая строка матрицы A с номером p называется *главной строкой*. Предположим, что $a_{pq} = a_{11}$. Если это не так, то меняют местами первую строку с p -й строкой и первый столбец с q -м столбцом, соответствующим образом перенумеровывая коэффициенты и неизвестные. Информация о перенумерации запоминается. В результате перенумерации первая строка становится главной.

2. Полученное на предыдущем этапе первое уравнение системы делят на $a_{pq} = a_{11}$

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

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

3. Исключают неизвестную x_1 из каждого уравнения исходной системы, начиная со второго, путем вычитания уравнения шага 2, умноженного на a_{i1}

Наибольшими по модулю элементами матрицы A являются a_{21} и a_{42} . Поскольку их модули равны, выберем, например, вторую строку СЛАУ и переставим её с первой. Этим выполним шаг 1. Разделив в получившейся первой строке (главной) элементы на $a_{11} = -5$ (шаг 2), получим СЛАУ

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

Выполняя шаг 3, исключим неизвестную x_1

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

Исключая из этой СЛАУ первую строку, получим СЛАУ для неизвестных x_2, x_3, x_4 . В этой новой СЛАУ максимальным по модулю элементом является элемент $c_{42} = -24/5$. Переставляя в новой СЛАУ третью и первую строки, получим после деления на c_{42} (шаг 4) СЛАУ

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

что после исключения x_2 дает

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

Последние два уравнения в этой СЛАУ дают

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

Объединяя все главные уравнения, получим (шаг 5) систему

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

Обратный ход по формулам (3.10) приводит к следующему решению исходной СЛАУ

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

Прямой проверкой в исходную СЛАУ убеждаемся, что это решение обращает равенства в тождества.

3.5. Вычисление определителя и обратной матрицы с помощью прямых методов решения СЛАУ

Используя рассмотренные методы решения СЛАУ и учитывая факторизацию матрицы системы (3.1) в виде треугольных матриц, можно вычислить значение определителя матрицы A по формуле

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

Возникающая при этом матрица P получается перестановкой строк единичной матрицы E , поэтому

$$\det P = \begin{cases} 1 & \text{при четном числе } k \text{ перестановок,} \\ -1 & \text{при нечетном числе } k \text{ перестановок.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Окончательно определитель матрицы A равен

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

Если матрица A является диагональной матрицей D , то имеем

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

Обратная матрица A^{-1} находится решением N систем линейных уравнений методом исключения Гаусса для последовательности неизвестных векторов X_i

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

Описанный в п.4 процесс продолжают до тех пор, пока все x_j^{k+1} не станут близкими к x_j^k , $j = 1, 2, \dots, N$. Итерации прекращают по выполнении условия

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

где ε – некоторое заданное положительное число (точность вычислений).

Сходимость итерационного процесса характеризуется следующим условием. Исходную СЛАУ (3.3) $AX = B$ приводят к виду

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

где $C = E - q^{-1}A$, $D = q^{-1}B$, q – некоторая постоянная, используемая в алгоритме. Если сумма модулей элементов строк или сумма модулей элементов столбцов меньше единицы :

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

или

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

то процесс итерации для данной системы сходится к единственному решению независимо от выбора начального вектора. Поэтому параметр q в алгоритме (3.21) может быть в известном смысле произвольным, лишь бы выполнялись условия сходимости (3.22).

Скорость сходимости, т.е. число итераций, необходимых для нахождения решения исходной СЛАУ в смысле выполнения условия (3.20), зависит от выполнения неравенств (3.22). Из возможных значений параметра q необходимо остановиться на том, который доставляет минимум левой части в (3.22).

Пример

Систему уравнений

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

приведем к виду (3.21)

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

Условие гарантированной сходимости для этой СЛАУ выполнено, поскольку

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

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

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

Выберем исходный вектор равным $X^0 = (2, 2, 2)$. Качество решения будем характеризовать с помощью величины (возможны и другие критерии качества решения)

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

Тогда, последовательно применяя итерационный процесс, получим решение $X^* = (3, 1, 1)$ с точностью $\delta_k = 5 \cdot 10^{-5}$, величина которой достигнута за $k = 11$ шагов.

3.7. Метод Зейделя решения СЛАУ

Этот численный метод решения СЛАУ представляет собой модификацию метода последовательных приближений. В *методе Зейделя* при вычислении $(k + 1)$ -го приближения компонент неизвестного $x_j^{k+1}, \dots, x_N^{k+1}$ учитывают уже найденные $(k + 1)$ -е приближения неизвестных $x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{j-1}^{k+1}$.

Пусть дана СЛАУ

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

Предполагая, что k -е приближение вектора X известно, по методу Зейделя строим $(k + 1)$ -е приближение искомого вектора по следующим формулам:

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

Процесс Зейделя $X = CX + D$, как и процесс последовательных приближений, сходится, если какая-нибудь из норм матрицы C меньше единицы, т.е. если выполняется одно из условий

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

либо

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

либо

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

Процесс Зейделя сходится к единственному решению быстрее простого процесса последовательных приближений.

Пример

Рассмотрим СЛАУ, решенную в предыдущем примере методом последовательных приближений. Запишем её в приведенном виде

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

Выбирая, как и выше, значение начального вектора $X^0 = (2, 2, 2)$, получим последовательно

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

Тогда, последовательно применяя итерационный процесс для критерия качества

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

получим следующие результаты (Δ_1 – значение критерия δ_k , найденное методом последовательных приближений, Δ_2 – то же значение, найденное методом Зейделя):

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

Из этих результатов видно, что точность $\delta_k = 5 \cdot 10^{-5}$, полученная методом последовательных приближений за $k = 10$ шагов, достигается методом Зейделя за $k = 7$ шагов. Решение СЛАУ равно $X^* = (3, 1, 1)$.

Эффективность итерационных методов сильно зависит от выбора начального значения вектора X^0 .

3.8. Итерационное уточнение решения СЛАУ

Если реально полученное решение искажено вычислительной погрешностью, то будет найдено лишь приближенное решение X_0 системы, которое необходимо уточнить. Пусть X – точное решение, тогда погрешность решения $\varepsilon = X - X_0$ удовлетворяет системе уравнений

$$\begin{aligned} A\varepsilon &= r, \\ r &= B - AX_0, \end{aligned} \tag{3.25}$$

где X_0 – решение системы (3.3), полученное в результате применения одного из прямых методов. Решение системы (3.3) тем же прямым методом с двойной точностью приводит к уточнению $X_1 = X_0 + \varepsilon$. Если точность нового приближения является неудовлетворительной, то уточняется полученное решение X_1 до тех пор, пока вектор поправок ε не станет равным нулю с заданной точностью.

3.9. Сравнение методов нахождения решения СЛАУ

Выбор в каждом отдельном случае конкретного метода решения системы линейных алгебраических уравнений определяется многими факторами: особенностями матрицы коэффициентов и порядком системы, быстродействием, доступным объемом памяти компьютера и др.

Метод Крамера применяется для СЛАУ размерности $N = 2, 3, 4$. Чаще всего им пользуются непосредственно при вычислениях ”вручную”.

Метод Гаусса – один из наиболее универсальных и эффективных при решении СЛАУ. Применение его целесообразно для линейных систем общего вида с плотно заполненной матрицей коэффициентов. Число выполняемых арифметических операций при решении методом в общем случае составляет примерно $2N^3/3$. Чаще всего им пользуются при нахождении решения СЛАУ размерности $N \geq 4$.

При решении СЛАУ высокого порядка, когда N может достигать 10^3 и выше, с разреженной матрицей коэффициентов наиболее эффективно применение итерационных методов. У разреженных матриц большинство элементов равно нулю. В памяти компьютера хранятся только ненулевые элементы таких матриц.

В отличие от метода Гаусса, ошибки округления в итерационных методах сказываются существенно меньше, так как неточное приближение можно рассматривать как новый начальный вектор. Итерационные методы требуют выполнения однообразных повторяющихся операций, поэтому удобны при программировании.

В общем случае СЛАУ с неразреженной матрицей коэффициентов, удается найти её решение лишь, когда $N \leq 20$.

Для СЛАУ с матрицами более высокой размерности (такого рода матрицы встречаются, например, в задачах обработки изображений) удается получить решение лишь в специальных случаях.

3.10. Нахождение собственных чисел и векторов матрицы

Ненулевой вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ называется *собственным вектором* с отвечающим ему *собственным числом* λ матрицы A размером $(N \times N)$, если имеет место соотношение

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

У каждой матрицы размером $(N \times N)$ имеется (с учетом кратности) N собственных чисел. Для нахождения собственных чисел рассмотрим выражение (3.26) как уравнение относительно переменной λ

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

Эта СЛАУ является однородной. Для существования нетривиальных (ненулевых) решений однородной СЛАУ необходимо, чтобы определитель этой системы равнялся нулю, т.е.

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

В развернутом виде это уравнение имеет следующий вид:

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

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

Многочлен (3.28) называется *характеристическим полиномом* $P_N(\lambda)$ матрицы A . Корни этого многочлена $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N-1}, \lambda_N)$ могут быть как действительными, так и комплексными, они и являются собственными числами. Набор собственных чисел $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N-1}, \lambda_N)$ образует *спектр матрицы* A .

Частные случаи характеристического многочлена следующие:

полином степени $N = 2$

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

полином степени $N = 3$

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

Каждая квадратная матрица размером N характеризуется набором из N *инвариантов*. Этот набор можно выбрать по-разному. Например, коэффициенты $p_1, p_2, p_3, \dots, p_N$ характеристического полинома (3.28) $P_N(\lambda)$ матрицы A образуют набор инвариантов. В свою очередь, ему можно поставить в соответствие набор собственных чисел $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N$. Последовательность симметричных комбинаций, основанных на собственных числах $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N$ матрицы A , также образует набор инвариантов. Например, для определителя $\det(A)$ и суммы диагональных элементов $\text{Sp}(A)$ матрицы A имеют место равенства:

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

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

Эти равенства удобно использовать для проверки правильности найденного спектра.

Задача определения спектра матрицы A , таким образом, эквивалентна задаче нахождения набора нулей характеристического полинома $P_N(\lambda)$, т.е. нахождения всех корней уравнения N -й степени

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

В ряде задач необходимо найти максимальное по модулю собственное значение λ_{\max} заданной матрицы A . Итерационная процедура решения такой задачи следующая:

1. Выбирают начальный вектор X_0 размером N , у которого значение максимального по модулю элемента равняется единице, и задают точность вычисления ε .

2. В цикле по номеру итераций $k = 1, 2, \dots$ вычисляют вектор Y_k размером N

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

3. Среди компонент вектора Y_k находят максимальный по модулю

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

после чего получают вектор X_k по формуле

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

4. Если для вектора X_k выполняется условие

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

то процедура прекращается. В противном случае итерации продолжаются.

Если процесс сходится, то последовательность $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ сходится к наибольшему собственному значению λ_{\max} . При этом последовательность нормированных векторов X_1, X_2, \dots, X_k сходится к собственному вектору, отвечающему собственному числу λ_{\max} .

Аналогично можно найти наименьшее по модулю собственное число λ_{\min} . Для этого исходную систему (3.26) умножим на обратную матрицу $B = A^{-1}$. Тогда получим

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

Решая эту задачу на собственные значения итерационным методом, найдем наибольшее собственное число ν_{\max} матрицы B , по которому находим наименьшее собственное число матрицы A :

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

3.11. Численное определение функции от матрицы

В математических моделях многих физических, технических, экономических процессов возникает необходимость численного определения заданной функции от квадратной матрицы.

Введем квадратную матрицу и поставим задачу создания численного алгоритма, дающего возможность по заданной матрице A находить матрицу $B = f(A)$, где $f(x)$ – некоторая определенная функция скалярного аргумента x .

Рассмотрим некоторые типы такого алгоритма.

А. Метод разложения в степенной ряд

Для значительного количества функций известно их представление в виде ряда, например, разложение в ряд Тейлора. Эти формулы могут быть использованы для вычисления соответствующих функций от заданной матрицы A .

Например:

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

Выбирая вариант этих формул с четырьмя или пятью слагаемыми, получим

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

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

Здесь E – единичная матрица той же размерности, что и матрица A .

Применение алгоритмов, основанных на формулах такого типа, имеет такие же ограничения, что и в скалярном случае (необходимо брать количество слагаемых, обеспечивающее заданную точность вычисления функции).

В матричном случае эти ограничения относятся к каждому собственному числу, которое необходимо или определить или знать их верхнюю границу.

Пример

Пусть матрица A равна

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

По формуле (3.38) до квадратичного члена получим

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

Учет слагаемого $A^3/6$ дает

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

С учетом $A^4/24$ получим

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

И лишь учет слагаемого $A^5/120$

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

дает результат, удовлетворительно согласующийся с точным значением матричной экспоненты

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

Б. Метод дробно-рационального приближения

Значения многих функций скалярного аргумента могут быть получены с помощью их представления в виде подходящего *дробно-рационального приближения*. Для распространенных функций, таких как \exp , \sin , \cos , \ln , tg и многих других, получено большое количество подобных представлений, имеющих различную степень точности.

Переходя от скалярного аргумента к матричному, запишем для экспоненциальной функции несколько дробно-рациональных приближений все возрастающей точности:

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

С использованием полиномов все более высоких степеней возможно обеспечить любую наперед заданную точность. При этом, однако, необходимо, чтобы все компоненты $\{\lambda_n\}_A$ спектра матрицы A были локализованы в единичном круге ($|\lambda_n| < 1$, $n = 1, 2, \dots, N$).

Пример

Для матрицы A

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

последовательно имеем по формулам (3.40):

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

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

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

Сравнивая эти матрицы с приведенным точным значением матричной экспоненты $\exp(A)$, можно сделать вывод о низкой достигнутой точности, обеспеченной лишь первой значащей цифрой. Такой малообещающий вывод связан с тем, что рассматриваемая матрица A имеет собственные числа λ_1, λ_2 , одно из которых превышает единицу.

В. Вычисление функции от матрицы с помощью интерполяционной формулы Лагранжа-Сильвестра

Набор собственных значений $\{\lambda\}_A$ квадратной матрицы A порядка N совпадает с набором корней алгебраического уравнения N -й степени

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

В свою очередь, если матрице A отвечает характеристический полином $P_A(\lambda)$, то имеет место *теорема Гамильтона-Кэли*, согласно которой

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

т.е. каждая квадратная матрица удовлетворяет своему собственному характеристическому уравнению (*матричному*). Полином $P_A(A)$ поэтому называют *аннулирующим* полиномом по отношению к A , поскольку результатом в (3.42) является нулевая матрица.

Это позволяет каждую целочисленную степень A^N матрицы A представить в виде линейной комбинации её неотрицательных степеней до $(N - 1)$ -й включительно. Тем самым оказывается возможным и каждую аналитическую функцию от матрицы A (т.е. функцию, представляемую в виде, может быть, бесконечной комбинации неотрицательных степеней своего аргумента), вычислить таким же способом.

Если, как и выше, обозначить набор коэффициентов характеристического многочлена матрицы A через $\{p\}$, т.е.

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

то можно записать

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

Здесь также результатом является нулевая матрица, а $A^0 = E$.

Выделим в этом выражении старшую степень матрицы и учтем, что $p_N = 1$. Тогда, после перегруппировки слагаемых получим

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

и аналогично – для более высоких степеней. Таким образом, любая натуральная степень M матрицы A , где $M \geq N$, является линейной комбинацией набора степеней $A^0, A^1, A^2, \dots, A^{N-1}$.

Если при этом выполняется $\det(A) \neq 0$, т.е. матрица A – невырожденная, то после перегруппировки слагаемых и умножения на A^{-1} получим удобное для вычислений выражение для обратной матрицы

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

Это выражение также можно умножить на A^{-1} и получить A^{-2} и т.д. Условие $\det(A) \neq 0$ означает, что в спектре $\{\lambda\}_A$ матрицы A отсутствуют нулевые компоненты. Для таких невырожденных матриц их любые натуральные степени являются линейной комбинацией набора степеней $A^0, A^1, A^2, \dots, A^{N-1}$.

Это означает, что можно найти любую функцию $f(x)$ от матрицы A , если эта функция представима в виде комбинации целых степеней своего аргумента x .

Если все собственные числа матрицы A различны, то заданную матричную функцию $B = f(A)$ можно вычислить с помощью *интерполяционной формулы Лагранжа-Сильвестра*

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

Интерполяционная формула Лагранжа-Сильвестра позволяет найти точное значение заданной функции от матрицы, если функция $f(x)$ определена на спектре $\{\lambda\}_A$ матрицы A . Для возможности её использования, однако, необходимо предварительно найти весь набор из N различных собственных чисел заданной матрицы A .

Пример

Как и выше, рассмотрим матрицу

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

Для этой матрицы полином $P_A(\lambda)$ имеет следующий вид:

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

Решая уравнение $P_A(\lambda) = 0$, находим два собственных числа матрицы

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

Тогда по интерполяционной формуле (3.47) получим

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

что после вычислений дает

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

Для проверки этого результата воспользуемся тем, что $\ln(\exp(z)) = z$, поскольку натуральный логарифм – суть функция, обратная экспоненте. Обозначая $B = \exp(A)$, из выражения (3.47) получим

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

где ν_1 и ν_2 – собственные числа матрицы B , причем $\nu_{1,2} = \exp(\lambda_{1,2})$. Они определяются уравнением

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

и равны $\nu_1 = 8,435$, $\nu_2 = 2,381$.

Поэтому

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

После вычислений получим

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

что совпадает с исходной матрицей A .

Г. Вычисление функции от матрицы с помощью контурного интеграла

Из теории функций комплексного переменного известно, что если аналитическая функция $f(z)$ задана на контуре C , то для любой точки a , содержащейся внутри этого контура, выполняется *интегральная формула Коши*

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

Пусть выбран такой контур C на комплексной плоскости Z , который охватывает весь набор $\{\lambda\}_A$ из всех собственных чисел матрицы A , возможно комплекснозначных. Тогда имеет место матричное обобщение формулы (3.48) – *интегральная формула Пуанкаре-Сильвестра*

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

Матрица-функция скалярного аргумента z вида $R(z) = (Ez - A)^{-1}$ называется *резольвентой* матрицы A .

Отметим, что для определения $f(A)$ необходимо вычислить $N \times N$ комплекснозначных интегралов.

Рассмотрим отдельно важный случай, когда $N = 2$:

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

Спектр этой матрицы состоит из собственных чисел вида :

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2}[a + d + \sqrt{(a + d)^2 - 4(ad - bc)}], \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}[a + d - \sqrt{(a + d)^2 - 4(ad - bc)}].\end{aligned}$$

Выражение (3.49) после вычисления резольвенты

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

и покомпонентного интегрирования принимает вид

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

Если у матрицы A спектр вырожденный, т.е. $\lambda_1 = \lambda_2$, то, обозначив $\lambda_1 = \lambda$ и $\lambda_2 = \lambda + \varepsilon$, выполним в (3.51) предельный переход $\varepsilon \rightarrow 0$. Тогда получим

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

что дает

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

В задаче нахождения значений функций $B = f(A)$ от заданных матриц A существенным является учет в каждом конкретном случае особенностей рассматриваемых матриц. Подчеркнем, что при использовании размерных величин (например, в физических задачах) необходимо обеспечить, чтобы в выражении $B = f(A)$ все матричные элементы матрицы A имели одну и ту же размерность.

3.12. Операции с блочными матрицами

Матрица высокого порядка, у которой совокупности соседних элементов объединены в блоки (клетки), называется *блочной*, или *клеточной матрицей*. Разбиение на блоки обозначают с помощью вертикальных и горизонтальных перегородок. Таким образом, исходная матрица разбивается на подматрицы-блоки, вычислительные действия с которыми производить гораздо проще.

Матрицу A размером 4×4 можно представить в виде блочной матрицы следующим образом :

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

где четыре матрицы размером 2×2 :

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

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

Данные матрицы можно представить в блочном виде различными способами.

Над блочными матрицами можно проводить операции сложения и умножения, оперируя с блоками как с элементами обычной матрицы. Так, для двух матриц A и B одинакового размера

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

возможны блочные представления с соответствующими клетками также одинаковых размеров. Тогда

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

Результатом произведения двух клеточных матриц будет также клеточная матрица следующего вида:

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

или

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

При этом необходимо, чтобы размеры блоков матриц A и B позволяли перемножить соответствующие матричные клетки.

Подчеркнем, что в общем случае $AB \neq BA$.

С помощью блочного представления матриц можно найти матрицу, обратную данной. Пусть дана квадратная матрица Z размером $n \times n$, блочное представление которой следующее:

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

где A – клетка размером $p \times p$; D – клетка размером $q \times q$; при этом выполняется $p + q = n$. Нам нужно найти обратную матрицу

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

в которой X и V – также квадратные блоки размером $p \times p$ и $q \times q$ соответственно.

По определению обратной матрицы

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

где E_n, E_p, E_q – единичные матрицы соответствующих размеров, а символом "0" обозначены блоки, полностью состоящие из нулей. Из матрицы (3.60) имеем

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

Приравнивая в этом соотношении элементам единичной матрицы элементы матрицы-произведения, находим поблочно формулы для определения клеток обратной матрицы.

А. Пусть $\det A \neq 0$ и поэтому существует A^{-1} . Тогда получаем следующую группу 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 алгоритме обращения, основанном на формулах (3.62), действия начинаются с нахождения обратной матрицы A^{-1} .

Б. Пусть $\det D \neq 0$ и поэтому существует D^{-1} . Тогда получаем следующую группу 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 алгоритме обращения, основанном на формулах (3.63), действия начинаются с нахождения обратной матрицы D^{-1} .

Рассмотрим теперь матрицу A размером $2n \times 2n$, блочное представление которой следующее:

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

где A_1, A_2, B_1, B_2 – клетки одного порядка, т.е. размера $n \times n$.

Если матрицы A_1, A_2, B_1, B_2 – невырожденные, т.е. $\det A_1 \neq 0, \det A_2 \neq 0, \det B_1 \neq 0, \det B_2 \neq 0$, то справедливо следующее равенство для обратной матрицы

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

Рассмотрим теперь определитель блочной матрицы, имея в виду матрицу типа (3.64).

Хотя для матрицы размером 2×2 имеет место равенство

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

для блочной матрицы прямая аналогия отсутствует, поскольку две произвольные матрицы в общем случае не коммутируют ($AB \neq BA$).

А именно, если $\det A_1 \neq 0$, то

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

Если же $\det B_2 \neq 0$, то

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

Пример 1

Пусть

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

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

Найдем произведение AB с помощью разбиения матриц A , B на блоки. Из матрицы (3.57, а) имеем

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

Перемножая и складывая клетки размером 2×2 поэтапно, найдем

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

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

Таким образом,

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

Пример 2

Поставим задачу обращения (4×4) -матрицы

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

Шаг 1. Разобьем матрицу на четыре (2×2) -блока:

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

Так как выполняется $\det A \neq 0$, то все вычисления будем проводить согласно формуле (3.62).

Шаг 2. Находим матрицу A^{-1} :

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

Шаг 3. Последовательно находим значения выражений:

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

при этом последнее выражение вычисляем для контроля.

Шаг 4. Образует матрицу

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

и находим обратную

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

Шаг 5. Последовательно находим значения матриц:

$$U = -VCA^{-1} = \begin{pmatrix} 1/15 & 7/15 \\ 6/15 & -6/15 \end{pmatrix};$$

$$Y = -A^{-1}BV = \begin{pmatrix} 1/3 & -1/3 \\ 1/6 & 1/3 \end{pmatrix};$$

$$X = A^{-1} - A^{-1}BU = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 \\ -1/2 & 1/6 \end{pmatrix}.$$

Шаг 6. Объединяя блоки X, Y, U, V , получаем

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

Шаг 7. Убеждаемся в правильности найденных элементов обратной матрицы Z^{-1} путем проверки – вычисления произведения ZZ^{-1} .

Пример 3

Найдем определитель матрицы Z , рассмотренной в примере 2.

Имеем

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

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

Так как $\det A_1 \neq 0$, то воспользуемся формулой (3.67).

Шаг 1. Найдем матрицу A_1^{-1}

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

Шаг 2. Найдем матрицу $A_2A_1^{-1}B_1$

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

Шаг 3. Найдем значение искомого определителя

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

Применение техники обращения с блочными матрицами дает возможность сократить объем вычислений в ряде задач прикладного практического анализа.

3.13. Операции с треугольными матрицами

Квадратная матрица размером $n \times n$ называется *треугольной*, если элементы, расположенные выше (или ниже) главной диагонали, равны нулю.

Если равны нулю элементы, стоящие *выше* главной диагонали, то матрица называется *нижней треугольной*

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

Если же равны нулю элементы, стоящие *ниже* главной диагонали, то матрица называется *верхней треугольной*

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

Определитель треугольной матрицы равен произведению её диагональных элементов. Обратная матрица к неособенной треугольной матрице есть также треугольная матрица того же типа и структуры.

Если квадратная матрица A имеет отличные от нуля диагональные миноры:

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

то эту матрицу возможно разложить на произведение двух треугольных матриц (верхней и нижней). Такое разложение будет единственным, если диагональным элементам одной из треугольных матриц заранее дать отличные от нуля и определенные значения (например, положить их равными единице). Пусть

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

где матрица T_1 дана в (3.69), а матрица T_2 – в (3.70), но у неё $\tau_{ii} = 1$, $1 \leq i \leq n$. Элементы матриц T_1 и T_2 находят путем перемножения, приравнивая соответствующие элементы матрицы $T_1 T_2$ элементам матрицы A , и последовательного решения возникших линейных уравнений.

Пользуясь разложением квадратной матрицы A на произведение двух треугольных, можно легко вычислить обратную матрицу $A^{-1} = T_2^{-1} T_1^{-1}$. Поскольку процедуру разложения удобно алгоритмизировать, то её часто берут за основу алгоритма нахождения обратной матрицы. Обращая найденные в примере 1 матрицы T_1 и T_2 , найдем

$$T_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1/a & 0 \\ -c/(ad - bc) & a/(ad - bc) \end{pmatrix}, \quad T_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & b/a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

Это дает

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Овладение техникой обращения с блочными и треугольными матрицами дает возможность сократить объем вычислений в ряде задач прикладного практического анализа. Явный вид используемых в данной задаче матриц содержит информацию

о свойствах рассматриваемой системы. Учет особенностей этих матриц позволяет определить эти свойства.

Пример 1

Рассмотрим разложение (3.72) на примере 2×2 матрицы

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

Найдем произведение двух треугольных матриц

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

Приравняем соответствующие матричные элементы:

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

Рассматривая эти равенства как систему из четырех уравнений с четырьмя неизвестными, после их последовательного решения найдем

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

Этот подход переносится и на случай матриц более высокого порядка.

Пример 2

Для матрицы размером 3×3

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

найдем её разложение на произведение двух треугольных матриц: $A = T_1 T_2$.

Шаг 1. Запишем результат произведения $T_1 T_2$

$$\begin{aligned} T_1 T_2 &= \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ t_{21} & t_{22} & 0 \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \tau_{12} & \tau_{13} \\ 0 & 1 & \tau_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} t_{11} & t_{11}\tau_{12} & t_{11}\tau_{13} \\ t_{21} & t_{21}\tau_{12} + t_{22} & t_{21}\tau_{13} + t_{22}\tau_{23} \\ t_{31} & t_{31}\tau_{12} + t_{32} & t_{31}\tau_{13} + t_{32}\tau_{23} + t_{33} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Шаг 2. Сопоставляя матричные элементы матрицы A и матрицы $T_1 T_2$, образуем систему из 9 уравнений.

Далее рассмотрим случай $m = n$, т.е. число уравнений совпадает с числом неизвестных.

Утверждение 3. Однородная СЛАУ, у которой $m = n$, имеет ненулевое решение тогда и только тогда, когда определитель матрицы системы равен нулю. Если этот определитель отличен от нуля, то система имеет только нулевое (тривиальное) решение.

Пример 1

Рассмотрим систему

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

Вычислим определитель системы

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

Выбирая в качестве свободной переменной z , запишем $z = \mu$ и

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

что дает искомое нетривиальное решение: $x = \mu$, $y = -\mu$, $z = \mu$.

Пример 2

Рассмотрим систему

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

При любых значениях параметра λ эта однородная система совместна и имеет тривиальное решение $x = 0$, $y = 0$.

Замечательным оказывается то, что эта система допускает и нетривиальное решение, а именно: если $\lambda = 1$, то существует решение $x = 2$, $y = -1$. Более того, при $\lambda = 1$ эта однородная СЛАУ имеет бесконечно много нетривиальных решений вида $x = 2\gamma$, $y = -\gamma$, где γ – произвольное число.

При $\lambda \neq 1$ рассматриваемая однородная СЛАУ имеет единственное тривиальное решение $x = 0$, $y = 0$.

3.15. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на восемь часов и содержит четыре задания.

З а д а н и е 1

Напишите программу численного решения СЛАУ. Программа должна быть основана на методах Крамера и Гаусса. В ней должна быть предусмотрена проверка найденного решения.

Результат работы программы – массив, содержащий компоненты искомого вектора.

Варианты

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

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

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

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

З а д а н и е 2

Напишите программу численного решения СЛАУ. Программа должна быть основана на методе последовательных приближений и методе Зейделя. В ней должна быть предусмотрена проверка найденного решения.

Результат работы программы – массив, содержащий компоненты искомого вектора.

В качестве исходных данных воспользуйтесь вариантами, приведенными в задании 1.

З а д а н и е 3

Напишите программу численного определения набора собственных чисел заданной матрицы на одном из алгоритмических языков.

Исходные данные для программы:

A – исходная матрица размером 3×3 ;

r – переменный параметр.

Результат работы программы – массив, содержащий значения собственных чисел матрицы A , а также массив, содержащий компоненты вектора, отвечающего её максимальному собственному числу.

Варианты

$$\text{а) } A = \begin{pmatrix} 5,0 & 3,0 & 1,0 \\ 6,0 & 4,0 & 2,0 \\ 7,0 & 5,0 & r \end{pmatrix}, \text{ где } r = 1,0; 2,0; 3,0;$$

$$\text{б) } A = \begin{pmatrix} 1,0 & 3,0 & 1,0 \\ 1,0 & 3,0 & 5,0 \\ r & 5,0 & 7,0 \end{pmatrix}, \text{ где } r = 2,0; 2,1; 2,2;$$

$$\text{в) } A = \begin{pmatrix} 3,0 & 5,0 & 1,0 \\ 6,0 & 4,0 & 2,0 \\ 7,0 & r & 5,0 \end{pmatrix}, \text{ где } r = 0,1; 0,2; 0,3;$$

$$\text{г) } A = \begin{pmatrix} 6,0 & r & 8,0 \\ 2,0 & 1,0 & 3,0 \\ 0,0 & 8,0 & 7,0 \end{pmatrix}, \text{ где } r = 0,4; 0,5; 0,6;$$

$$\text{д) } A = \begin{pmatrix} 1,0 & r & 1,0 \\ 0,0 & 1,0 & 0,0 \\ 1,0 & 8,0 & 1,0 \end{pmatrix}, \text{ где } r = 1,4; 1,5; 1,6.$$

З а д а н и е 4

Напишите программу нахождения заданной функции от квадратной матрицы. В качестве алгоритма используйте интерполяционную формулу Лагранжа-Сильвестра. Предусмотрите в программе предварительное определение всех собственных чисел заданной матрицы с проверкой их правильности.

Исходные данные для программы :

A – исходная матрица; r – переменный параметр; $f(x)$ – заданная функция.

Результат работы программы – массив, содержащий элементы матрицы B , являющейся заданной функцией от исходной.

Варианты

$$\text{а) } A = \begin{pmatrix} 0,46 & 0,12 \\ 0,61 & r \end{pmatrix}, \text{ где } f(x) = \sin(x), \quad r = 0,60; 0,61; 0,62; 0,63;$$

$$\text{б) } A = \begin{pmatrix} 0,31 & 0,13 \\ r & 0,88 \end{pmatrix}, \text{ где } f(x) = 1 + x^4, \quad r = 0,10; 0,11; 0,12; 0,13;$$

$$\text{в) } A = \begin{pmatrix} 0,75 & r \\ 0,52 & 0,55 \end{pmatrix}, \text{ где } f(x) = \exp(x), \quad r = 0,50; 0,51; 0,52; 0,53;$$

$$\text{г) } A = \begin{pmatrix} 0,65 & r \\ 0,37 & 0,56 \end{pmatrix}, \text{ где } f(x) = \exp(x^2), \quad r = 0,35; 0,36; 0,37; 0,38;$$

$$\text{д) } A = \begin{pmatrix} 0,48 & r \\ 0,53 & 0,20 \end{pmatrix}, \text{ где } f(x) = \frac{1}{2} \exp(-x^2), \quad r = 0,2; 0,3; 0,4; 0,5.$$

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание задания;
- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;

- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу исходных данных и таблицу значений функции при заданных значениях аргумента;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

3.16. Задания для проверки

1. Исследуйте влияние погрешности в коэффициентах СЛАУ (в частности, погрешности максимального и минимального по модулю коэффициентов) на погрешность решения, полученного по методу Гаусса.

2. Исходную СЛАУ можно привести к виду $X = AX + B$ разными способами. В рамках метода Зейделя сравните эффективность выбранных способов по числу итераций, необходимых для достижения заданной точности.

3. Какими должны быть матричные элементы матрицы A , если известно следующее: а) одно из собственных чисел равно нулю; б) два из собственных чисел равны нулю?

4. Пусть спектр матрицы A определен. Известно, что $B = f(A)$. Каков спектр матрицы B ?

5. Раскройте содержание понятия сходимости итерационного процесса.

6. Исследуйте качество дробно-рациональных приближений (3.40) для экспоненциальной функции. Результат сравните с его аналогами, полученными другими методами.

7. Интерполяционная формула Лагранжа-Сильвестра приведена для случая, когда все собственные числа заданной матрицы разные. Пусть у матрицы размером (3×3) собственные числа отличаются на заданную величину q . Исследуйте аналог интерполяционной формулы для случая, когда q стремится к нулю.

8. Рассмотрите матрицы, указанные в задании 3. Постройте указанные для них функции методом разложения в степенной ряд, выбрав соответствующее разложение Тейлора. Сравните эффективность обоих методов.

9. Для заданных (2×2) и (3×3) -матриц A найдите обратную A^{-1} им, используя характеристический многочлен этой матрицы.

10. Постройте примеры матриц A размером 2×2 таких, что A^2 совпадает с нулевой матрицей.

11. Постройте примеры матриц A размером 3×3 таких, что A^2 и A^3 совпадает с нулевой матрицей.

12. Для двух матриц A и B размерности $N = 2$ убедитесь, что:

$$\exp(A + B) \neq \exp(A)\exp(B);$$

$$\sin(A + B) \neq \sin(A)\cos(B) + \sin(B)\cos(A).$$

При выполнении какого условия будет иметь место равенство?

4. Численное дифференцирование таблично заданной функции

4.1. Основные теоретические положения

Задача численного дифференцирования обычно рассматривается на основе использования интерполяционной формулы Лагранжа или с помощью подходящих аппроксимационных формул выбранного порядка. Вместо исходной таблично заданной функции строится её полиномиальный аналог, после чего находится его производная (табл. 4.1 и табл. 4.2). Эта производная и используется в качестве производной исходной таблично заданной функции.

Таблица 4.1 — Таблично заданная функция

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

Понятие производной связано с понятием *непрерывности функции*. В том случае, когда функция задана таблично, ей ставят в соответствие другую функцию, в некотором смысле ближайшую, производную которой находят, а найденные её значения принимают за производную исходной таблично заданной функции.

4.2. Алгоритмы дифференцирования таблично заданной функции

Иногда требуется определить производную функции, в том числе производную таблично заданной функции.

Постановка задачи численного дифференцирования формулируется следующим образом. Требуется заданной таблице упорядоченных значений некоторой функции поставить в соответствие другую таблицу упорядоченных значений другой функции таким образом, чтобы вторая функция являлась первой производной от исходной функции.

Пусть задана таблица, образованная $(N + 1)$ парами чисел $\{(x_n, y_n)\}$, где $0 \leq n \leq N$. Так же как и выше, будем именовать $\{X_n\}$ — *аргументный массив*, $\{Y_n\}$ — *функциональный массив*. Каждую точку (x_n, y_n) будем называть *узлом*.

Таблица 4.2 — Таблично заданная функция и её производная

n	0	1	2	3	4	\dots	N
x_n	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	\dots	x_N
y_n	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	\dots	y_N
y'_n	y'_0	y'_1	y'_2	y'_3	y'_4	\dots	y'_N

Требуется построить таблицу (т.е. дописать еще одну строчку), которая в наборе узлов образована $(N + 1)$ парами чисел $\{(x_n, y'_n)\}$, где $0 \leq n \leq N$.

Задача численного дифференцирования функции тесно связана с проблемой приближения этой функции. Среди методов приближения наиболее распространены интерполяционные и аппроксимационные методы. Поэтому ниже рассмотрим дифференцирование с помощью интерполяции и аппроксимации.

4.3. Дифференцирование заданной функции с помощью интерполяции

Полином $L_N(x)$ вида

$$L_N(x) = \sum_{n=0}^N y_n \prod_{k=0, k \neq n}^N \frac{x - x_k}{x_n - x_k} \quad (4.1)$$

называется *интерполяционным полиномом Лагранжа*. Легко убедиться, что

$$L_N(x_n) = y_n. \quad (4.2)$$

Таким образом, можно ставить в соответствие функции $y(x)$, задаваемой массивом $\{y\}$, функцию $Y(x) = L_N(x)$. Функция $Y(x)$ является полиномом степени N . Дифференцируя, получим

$$Y'(x) = L'_N(x). \quad (4.3)$$

Рассмотрим случай *равноотстоящих* аргументных узлов с шагом h :

$$x_n = x_0 + nh, \quad (4.4)$$

после чего будем с помощью полинома $L_N(x)$ искать значения производной функции в узлах интерполяции, отвечающих заданной таблице.

4.4. Алгоритмы дифференцирования с помощью интерполяции

Рассмотрим распространенный случай равноотстоящих с шагом h аргументных узлов $x_n = x_0 + nh$, где $n = 0, 1, \dots, N$. На практике обычно выбирается фиксированное количество узлов, прилегающих к тому узлу, в котором ищется

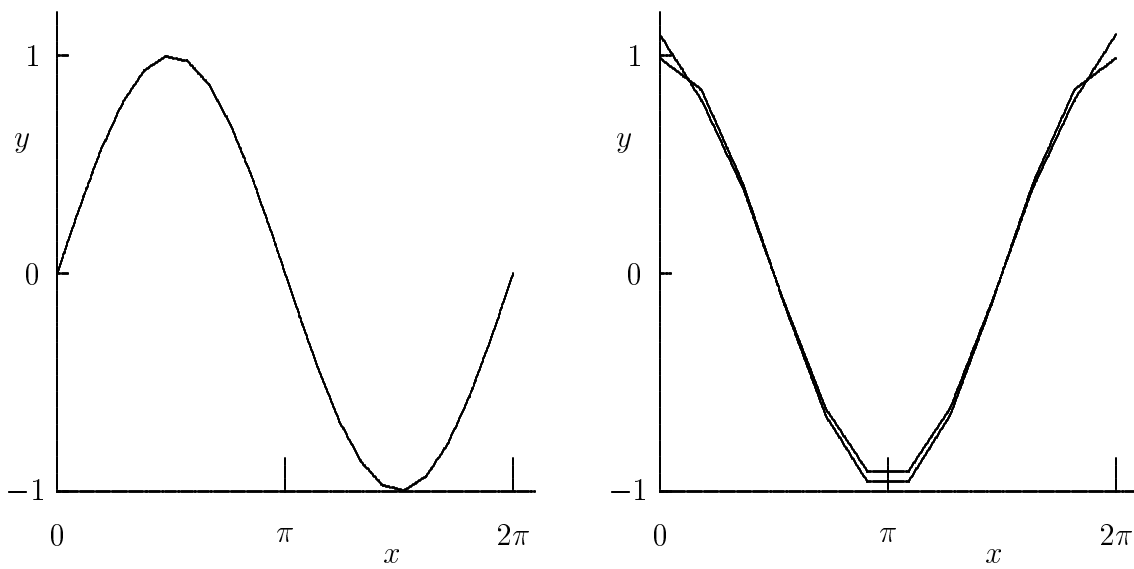


Рисунок 4.1 — Численное дифференцирование таблично заданной функции на интервале $(0, 2\pi)$ с помощью интерполяции; число равноотстоящих узлов $N = 11$; слева – исходная функция $y = \sin(x)$; справа – результат численного дифференцирования (трех- и пятиточечный алгоритмы)

производная. Эту группу прилегающих узлов называют *окном*, так как каждый раз используют узлы из окна (рис. 4.1).

Алгоритм дифференцирования *по трем текущим узлам* осуществляется с помощью следующих формул :

а) для первого узла ($n = 0$):

$$Y'_0 = \frac{1}{2h} (-3Y_0 + 4Y_1 - Y_2); \quad (4.5, a)$$

б) для промежуточных узлов ($n = 1, 2, \dots, N - 2, N - 1$):

$$Y'_n = \frac{1}{2h} (-Y_{n-1} + Y_{n+1}); \quad (4.5, b)$$

в) для последнего узла ($n = N$):

$$Y'_N = \frac{1}{2h} (Y_{N-2} - 4Y_{N-1} + 3Y_N), \quad (4.5, c)$$

где N – номер последней точки. Погрешность этого алгоритма составляет $O(h^2)$.

Алгоритм дифференцирования *по четырем текущим узлам* осуществляется с помощью следующих формул :

а) для первых двух узлов ($n = 0, 1$):

$$\begin{aligned} Y'_0 &= \frac{1}{6h} (-11Y_0 + 18Y_1 - 9Y_2 + 2Y_3); \\ Y'_1 &= \frac{1}{6h} (-2Y_0 - 3Y_1 + 6Y_2 - Y_3), \end{aligned} \quad (4.6, a)$$

б) для промежуточных узлов ($n = 2, 3, \dots, N - 3, N - 2$):

$$Y'_n = \frac{1}{6h} (-2Y_{n-1} - 3Y_n + 6Y_{n+1} - Y_{n+2}), \quad (4.6, b')$$

или

$$Y'_n = \frac{1}{6h} (Y_{n-2} - 6Y_{n-1} + 3Y_n + 2Y_{n+1}); \quad (4.6, b'')$$

в) для последних двух узлов ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned} Y'_{N-1} &= \frac{1}{6h} (Y_{N-3} - 6Y_{N-2} + 3Y_{N-1} + 2Y_N); \\ Y'_N &= \frac{1}{6h} (-2Y_{N-3} + 9Y_{N-2} - 18Y_{N-1} + 11Y_N), \end{aligned} \quad (4.6, c)$$

где N – номер последней точки. Погрешность этого алгоритма составляет $O(h^3)$.

Приведем также формулы для нахождения производной, основанные на *пяти-точечной* интерполяционной формуле ($N = 4$):

а) для первых двух узлов ($n = 0, 1$):

$$\begin{aligned} Y'_0 &= \frac{1}{12h} (-25Y_0 + 48Y_1 - 36Y_2 + 16Y_3 - 3Y_4); \\ Y'_1 &= \frac{1}{12h} (-3Y_0 - 10Y_1 + 18Y_2 - 6Y_3 + Y_4); \end{aligned} \quad (4.7, a)$$

б) для промежуточных узлов ($n = 2, 3, \dots, N - 3, N - 2$):

$$Y'_n = \frac{1}{12h} (Y_{n-2} - 8Y_{n-1} + 8Y_{n+1} - Y_{n+2}); \quad (4.7, b)$$

в) для последних двух узлов ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned} Y'_{N-1} &= \frac{1}{12h} (-Y_{N-4} + 6Y_{N-3} - 18Y_{N-2} + 10Y_{N-1} + 3Y_N); \\ Y'_N &= \frac{1}{12h} (3Y_{N-4} - 16Y_{N-3} + 36Y_{N-2} - 48Y_{N-1} + 25Y_N), \end{aligned} \quad (4.7, c)$$

где N – номер последней точки. Погрешность этого алгоритма составляет $O(h^4)$.

Формулы (4.5)–(4.7) для таблиц с большим числом M применяют следующим образом. Выбирают число узлов интерполяции N . При фиксированном числе узлов пользуются соответствующими выражениями, отвечающими центральному узлу интерполяции.

Например, при $N = 4$ используют любую из формул для $Y'(x)$, которые применимы для всех внутренних узлов исходной таблицы функции.

Для нахождения значений производной на границах таблицы значений функции пользуются выражениями, отвечающими нецентральному узлам интерполяции. Например, при $N = 5$ для первых двух узлов (левая граница таблицы) используют формулы для $Y'(x_0)$ и $Y'(x_1)$ соответственно, а для последних двух узлов (правая граница таблицы) – формулы для $Y'(x_{N-1})$ и $Y'(x_N)$ соответственно.

Обработка исходного массива из M точек осуществляется так, что каждый раз для требуемого узла с текущим номером n используются соседние к нему N узлов таблицы (включая и сам n -й узел).

Если не принимать во внимание граничные узлы (это возможно при достаточно большой величине M узлов в окне), то значения производной в основном ищут по выражениям, отвечающим центральным узлам интерполяции.

4.5. Алгоритмы дифференцирования с помощью аппроксимации

В тех случаях, когда данные в исходной таблице не свободны от ошибок, отношение $\Delta y/\Delta x$ может стать очень чувствительным к погрешностям задания функции (рис. 4.2). В этом случае задача нахождения производной функции может быть решена с помощью аппроксимации, основанной на *методе наименьших квадратов*.

Рассмотрим этот подход на примере аппроксимации совокупности из пяти текущих точек $y_{k-2}, y_{k-1}, y_k, y_{k+1}, y_{k+2}$ параболой второго порядка $Y(x) = \alpha + \beta x + \gamma x^2$.

В основе метода лежит условие минимальности *невязки*

$$\delta = \delta(x) = \sum_{n=k-2}^{n=k+2} [Y(x) - y_n]^2 \quad (4.8)$$

для случая равноотстоящих точек с шагом h , отсчитываемых от узла x_k . Выполнение этого экстремального условия приводит к параболе следующего вида:

$$Y(x) = \frac{1}{70h^2} \sum_{n=-2}^2 [(34 - 10n^2)h^2 + 7nhx + 5x^2(n^2 - 2)] y_n. \quad (4.9)$$

Это дает для производной

$$Y'(x) = \frac{1}{70h^2} \sum_{n=-2}^2 (7nh + 10xn^2 - 20x)y_n, \quad (4.10)$$

или в развернутой форме

$$Y'(x) = \frac{1}{70h^2} \left[(-14h + 20x)y_{-2} + (-7h - 10x)y_{-1} - \right. \\ \left. - 20xy_0 + (7h - 10x)y_1 + (14h + 20x)y_2 \right], \quad (4.11)$$

при этом текущие значения аргумента x должны находиться в интервале $x_{k-2} \leq x \leq x_{k+2}$.

Таким образом, в том случае, когда производная функции ищется на основе пяти текущих табличных значений, алгоритм дифференцирования следующий:

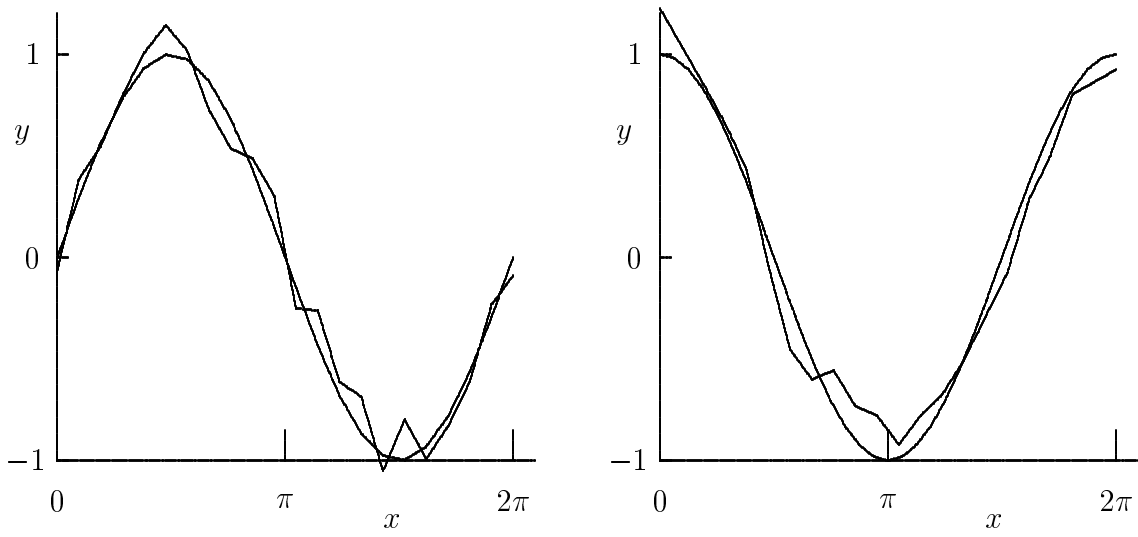


Рисунок 4.2 — Численное дифференцирование таблично заданной функции на интервале $(0, 2\pi)$ с помощью аппроксимации; число равноотстоящих узлов $N = 21$; слева — исходная функция $y = \sin(x)$ и возмущенная функция (уровень возмущения — 0,2); справа — производная $y' = \cos(x)$ и результат численного дифференцирования (пятиточечный алгоритм)

а) для первых двух узлов ($n = 0, 1$):

$$\begin{aligned} Y'_0 &= \frac{1}{70h} (-54Y_0 + 13Y_1 + 40Y_2 + 27Y_3 - 26Y_4); \\ Y'_1 &= \frac{1}{70h} (-34Y_0 + 3Y_1 + 20Y_2 + 17Y_3 - 6Y_4); \end{aligned} \quad (4.12, a)$$

б) для промежуточных узлов ($n = 2, 3, \dots, N - 3, N - 2$)

$$Y'_n = \frac{1}{70h} (-14Y_{n-2} - 7Y_{n-1} + 7Y_{n+1} + 14Y_{n+2}); \quad (4.12, b)$$

в) для последних двух узлов ($n = N - 1, N$):

$$\begin{aligned} Y'_{N-1} &= \frac{1}{70h} (6Y_{N-4} - 17Y_{N-3} - 20Y_{N-2} - 3Y_{N-1} + 34Y_N); \\ Y'_N &= \frac{1}{70h} (26Y_{N-4} - 27Y_{N-3} - 40Y_{N-2} - 13Y_{N-1} + 54Y_N). \end{aligned} \quad (4.12, c)$$

Для центральных точек, когда $2 \leq n \leq (N - 2)$, получаем особенно простое приближение

$$Y'_n = \frac{1}{10h} (-2Y_{n-2} - Y_{n-1} + Y_{n+1} + 2Y_{n+2}). \quad (4.13)$$

Применение этих выражений аналогично описанному выше. Здесь отметим, что на практике получили распространение, помимо трех-, четырех- и пятиточечных алгоритмов, дифференцирующие алгоритмы, использующие и большее число точек.

Например, если используются не две пары соседних точек, как в пятиточечном алгоритме (4.9) нахождения значения производной (в центральных точках), а K

точек с каждой стороны, то формула численного дифференцирования имеет вид

$$Y'_n = \frac{1}{h} \left(\sum_{k=-K}^K k Y_{n+k} \right) \left(\sum_{k=-K}^K k^2 \right)^{-1}. \quad (4.14)$$

На основе использованных подходов можно создавать численные алгоритмы, позволяющие находить вторые производные таблично заданной функции и производные более высоких порядков. Однако с ростом порядка производной результат дифференцирования становится более неустойчивым.

Алгоритмы, позволяющие находить значения необходимых производных определенного порядка от таблично заданной функции, принято называть *линейными дифференцирующими фильтрами*.

Приведем выражение для часто используемых линейных дифференцирующих фильтров:

дифференцирующие фильтры второго порядка:

$$\begin{aligned} Y''_n &= \frac{1}{h^2} (Y_{n-1} - 2Y_n + Y_{n+1}) + O(h^2); \\ Y''_n &= \frac{1}{12h^2} (11Y_{n-1} - 20Y_n + 6Y_{n+1} + 4Y_{n+2} - Y_{n+3}) + O(h^3); \\ Y''_n &= \frac{1}{12h^2} (-Y_{n-2} + 16Y_{n-1} - 30Y_n + 16Y_{n+1} - Y_{n+2}) + O(h^4); \end{aligned} \quad (4.15)$$

дифференцирующие фильтры третьего порядка:

$$\begin{aligned} Y'''_n &= \frac{1}{2h^3} (-Y_{n-1} + 3Y_n - 3Y_{n+1} + Y_{n+2}) + O(h^2); \\ Y'''_n &= \frac{1}{2h^3} (-3Y_{n-1} + 10Y_n - 12Y_{n+1} + 6Y_{n+2} - Y_{n+3}) + O(h^3). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Если значения функции заданы как результаты измерения и требуется исследование поведения производных, то необходимо предварительно выполнить численное сглаживание с последующим численным дифференцированием.

Получили распространение также (при численном решении дифференциальных уравнений в частных производных) алгоритмы нахождения частных производных от таблично заданных функций нескольких переменных.

Численное дифференцирование таблично заданных функций на практике может дать неправильные значения по двум причинам.

Во-первых, табличные данные, получаемые, как правило, экспериментальным путем, могут содержать более или менее сильный шум, накладываемый на истинный сигнал. При дифференцировании вклад сигнала (плавной функции) относительно убывает, в то время как вклад нерегулярного шума – возрастает.

Во-вторых, используемые интерполяционные или аппроксимационные полиномы могут хорошо передавать ход самой функции, но их производные могут значительно отличаться от истинных тем сильнее, чем выше порядок дифференцирования.

Итак, численно дифференцировать функцию можно, лишь обладая достаточной информацией о ней.

4.6. Нахождение высших производных аналитической функции

В ряде задач требуется найти набор производных $y'(x)$, $y''(x)$, $y'''(x)$, ..., $y^{(n)}(x)$ заданной функции при некотором значении её аргумента x . Если функция $y(x)$ является аналитической, то можно воспользоваться *интегральной формулой Коши*

$$y(\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C (z - \alpha)^{-1} f(z) dz, \quad (4.17)$$

где α – точка, в которой ищется значение функции; C – контур интегрирования на комплексной z -плоскости, охватывающий слева точку $z = \alpha$.

Подставим в этой формуле $\alpha = x$ и k раз продифференцируем по x

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi i} \oint_C (z - x)^{-k-1} f(z) dz. \quad (4.18)$$

Используем в качестве контура интегрирования C окружность с центром в точке x и некоторым радиусом ρ , т.е. $z = x + \rho \exp(i\varphi)$ и $dz = i\rho \exp(i\varphi) d\varphi$.

После преобразований получим

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi \rho^k} \int_0^{2\pi} \exp(-ik\varphi) f(x + \rho e^{i\varphi}) d\varphi. \quad (4.19)$$

Таким образом, для аналитической функции информация о её значениях на заданном контуре C достаточна для нахождения в точках, охватываемых этим контуром, значений как функции, так и её производных.

Пусть

$$R(\varphi) = \operatorname{Re} f(x + \rho e^{i\varphi}) \quad \text{и} \quad I(\varphi) = \operatorname{Im} f(x + \rho e^{i\varphi}).$$

Тогда реальная часть выражения (4.19) принимает вид

$$y^{(k)}(x) = \frac{k!}{2\pi \rho^k} \int_0^{2\pi} [\cos(k\varphi) R(\varphi) + \sin(k\varphi) I(\varphi)] d\varphi, \quad (4.20)$$

а для мнимой части имеем

$$\int_0^{2\pi} [\cos(k\varphi) I(\varphi) - \sin(k\varphi) R(\varphi)] d\varphi = 0. \quad (4.21)$$

Это равенство можно использовать для контроля вычислений.

В частности, для первой производной получаем

$$y'(x) = \frac{1}{2\pi \rho} \int_0^{2\pi} [\cos(\varphi) R(\varphi) + \sin(\varphi) I(\varphi)] d\varphi. \quad (4.22)$$

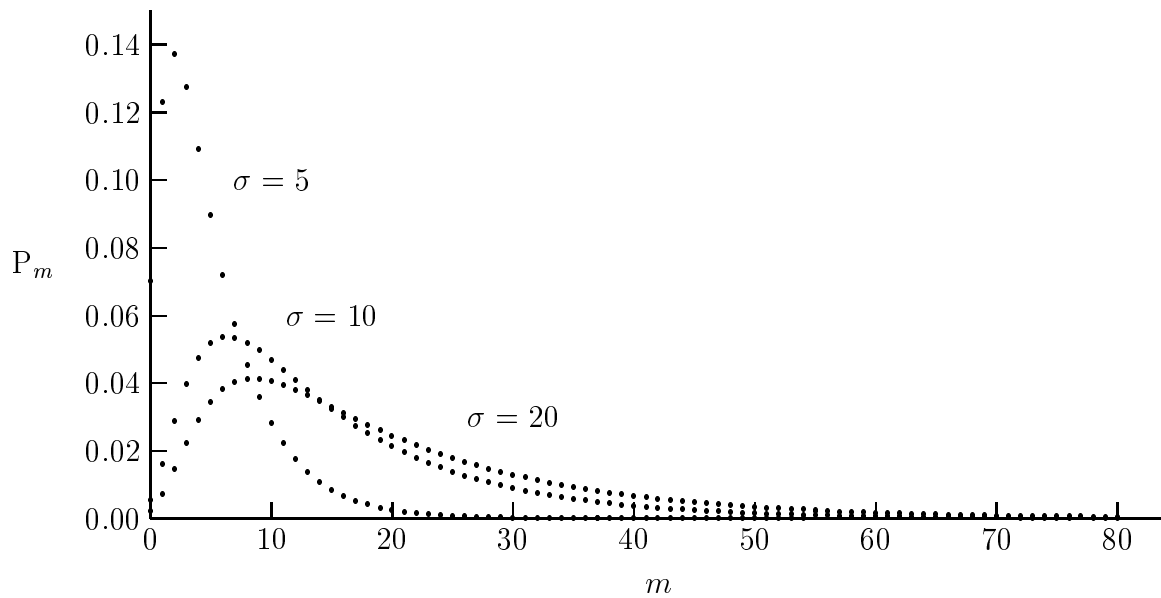


Рисунок 4.3 — Распределение амплитуд P_m ; параметры: $\nu = 1,0$, $T = 1,0$; слева — $\sigma = 5$; посередине — $\sigma = 10$; справа — $\sigma = 20$

Пример

В теории оценивания и принятия решений встречается задача нахождения распределения амплитуд $\{P_m\}$, $m = 0, 1, 2, \dots$. Набор амплитуд $\{P_m\}$ определяется производящей функцией $Q(\lambda)$ следующего вида:

$$Q(\lambda) = \frac{4r\nu \exp(\nu T)}{(r + \nu)^2 \exp(rT) - (r - \nu)^2 \exp(-rT)},$$

где $r = \sqrt{\nu^2 + 2\lambda\nu\sigma}$.

Каждая из амплитуд $\{P_m\}$ находится из соотношения

$$P_m = \frac{(-1)^m}{m!} \left. \frac{d^m}{d\lambda^m} Q(\lambda) \right|_{\lambda=1}.$$

Таким образом, в точке $\lambda = 1$ необходимо определять значения m -х производных, порядок которых находится в области $0 \leq m \leq m_{\max}$. При этом значение максимального порядка выбирается из условия, что величиной амплитуд P_m , $m > m_{\max}$, можно пренебречь.

Примем в алгоритме (4.19), что $\rho = 1$. Тогда получим

$$P_m = \frac{(-1)^m}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} Q(1 + e^{im\varphi}) d\varphi.$$

Результат численного расчета амплитуд $\{P_m\}$ для $0 \leq m \leq 80$ представлен на рис. 4.3.

4.7. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на четыре часа и содержит два задания.

З а д а н и е 1

Напишите программу вычисления таблицы производной функции. Используйте метод интерполяции с числом узлов $N = 3, 4$ и 5 .

Исходные данные для программы :

x_0 – первый аргументный узел;

M – полное число узлов таблицы функции;

h – шаг;

$f(x)$ – функция, производная которой ищется.

Результат работы программы – массив, содержащий значения производных функции в узлах.

Варианты

- 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) $x_0 = 0,0$; $h = 0,10$; $M = 31$; $f(x) = (10 + x^2)^{-1}$.

З а д а н и е 2

Напишите программу вычисления таблицы производной функции. Используйте метод аппроксимации.

Исходные данные для программы :

x_0 – первый аргументный узел;

M – полное число узлов таблицы функции;

h – шаг;

$f(x)$ – функция, производная которой ищется.

Результат работы программы – массив, содержащий значения производных функции в узлах.

Варианты

- 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) $x_0 = -0,0$; $h = 0,10$; $M = 31$; $f(x) = (1 + x)^{-1}$.

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание задания;

- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу исходных данных в узлах и таблицу значений производной функции при заданных значениях аргумента,
- 5) интерпретацию полученных результатов.

4.8. Задания для проверки

1. В чем суть алгоритма дифференцирования таблично заданных функций?
2. Проверьте справедливость формул (4.5)–(4.7) и (4.14)–(4.15) для случая постоянной функции. Убедитесь, что $Y'(x) = 0$.
3. Проверьте справедливость формул (4.5)–(4.7) и (4.14)–(4.15) для случая линейной функции.
4. Сравните значения производных, заданных в п. 3 функций, со значениями производных соответствующих функций, найденных аналитическим дифференцированием.
5. Изучите влияние приращения значения функции в крайних узлах на поведение производной.
6. Составьте функциональную блок-схему алгоритма нахождения производной функции по формулам (4.5)–(4.7).
7. Составьте функциональную блок-схему алгоритма нахождения производной функции по формулам (4.14)–(4.15).
8. В каких случаях предпочтительнее пользоваться трехточечным или пятиточечным алгоритмом дифференцирования таблично заданных функций?
9. Предложите блок-схему нахождения второй и третьей производных таблично заданных функций. Рассмотрите функции: $y = \sin(x)$, $y = \cos(x)$ и $y = \exp(-x)$.
10. Поясните работу алгоритма дифференцирования в концевых узлах и в середине таблицы.
11. В выражениях для алгоритма дифференцирования сумма коэффициентов в каждой строке равна нулю. Дайте интерпретацию этому факту.
12. Предложите развитие алгоритма дифференцирования таблично заданных функций на случай числа узлов, отличного от трех или пяти.

5. Численное интегрирование

5.1. Основные теоретические положения

Из курса математического анализа известно, что если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, то определенный интеграл J от этой функции в пределах от a до b существует и имеет вид

$$J = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a), \quad (5.1)$$

где a и b – нижний и верхний пределы интегрирования, $F(x)$ – первообразная для функции $f(x)$.

Выражение (5.1) называется *формулой Ньютона–Лейбница*.

Сформулируем задачу численного интегрирования – найти значение J определенного интеграла на отрезке $[a, b]$, если подынтегральная функция $f(x)$ на этом отрезке задана.

Формулы приближенного интегрирования называют *квadrатурными*.

Численное интегрирование занимает важное место в задачах анализа данных. На практике часто приходится вычислять значения определенного интеграла численными методами. Это бывает в случаях, когда либо не удастся выразить интеграл в замкнутой форме, либо она настолько сложна, что проще воспользоваться численным интегрированием.

Те или иные приближения интегрального функционала используются при построении алгоритмов численного интегрирования. Существует большое разнообразие в подходах и методах, которые положены в основу квадратурных формул. Это разнообразие формул связано с видами подынтегральной функции и возможными её особенностями, подходами в интерполяции или аппроксимации подынтегральной функции, общим характером поставленной задачи и свойствами модели, используемой при исследовании.

Важным при выборе подходящей квадратурной формулы является учет априорно известной информации о подынтегральном выражении или результате интегрирования.

Отметим, что в практических расчетах с использованием компьютеров возможно применение алгоритмов и программных средств, включенных в её математическое обеспечение.

Квадратурные формулы (за исключением небольшого числа частных случаев) носят приближенный характер. С учетом погрешности, возникающей при усечении, результат численного интегрирования также является приближенным.

В общем случае квадратурные формулы имеют следующий вид :

$$J = \int_a^b f(x) dx = \sum_{n=1}^N c_n f(x_n) + R, \quad (5.2)$$

где $\{x_n\}$ – набор узлов, в которых находят соответствующие значения подынтегральной функции; $\{c_n\}$ – набор квадратурных коэффициентов; R – погрешность результата интегрирования.

Задаваясь числом квадратурных слагаемых N и выбирая наборы узлов $\{x_n\}$ и коэффициентов $\{c_n\}$, приходят к той или иной квадратурной формуле. На её выбор влияет (кроме вида подынтегральной функции) требуемая точность вычисления интеграла и связанное с ней число узлов N квадратурной формулы.

Искомое значение требуемого интеграла наперед неизвестно, что затрудняет контроль точности при вычислениях. Поэтому выбранный для работы алгоритм, как правило, проверяют на примере специально сконструированного модельного интеграла. Модельный интеграл должен интегрироваться точно, т.е. аналитически, при этом пределы и подынтегральная функция у него должны, насколько возможно, соответствовать рабочему интегралу.

На практике используют две группы квадратурных формул. В первой из них шаг h квадратурных узлов выбирают постоянным и равным $h = (b - a)/N$. Во второй группе квадратурные узлы располагаются с переменным расстоянием между ними.

Рассмотрим наиболее распространенные квадратурные формулы и численные процедуры, основанные на них.

5.2. Квадратурные формулы прямоугольников

Эти квадратурные формулы наиболее простые. Они основаны на непосредственном определении интеграла как предельного значения интегральной суммы (рис. 5.1).

Формула левых прямоугольников имеет вид

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} f(a + hn); \quad (5.3)$$

формула средних прямоугольников

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} f(a + hn + h/2); \quad (5.4)$$

формула правых прямоугольников

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{n=1}^N f(a + hn). \quad (5.5)$$

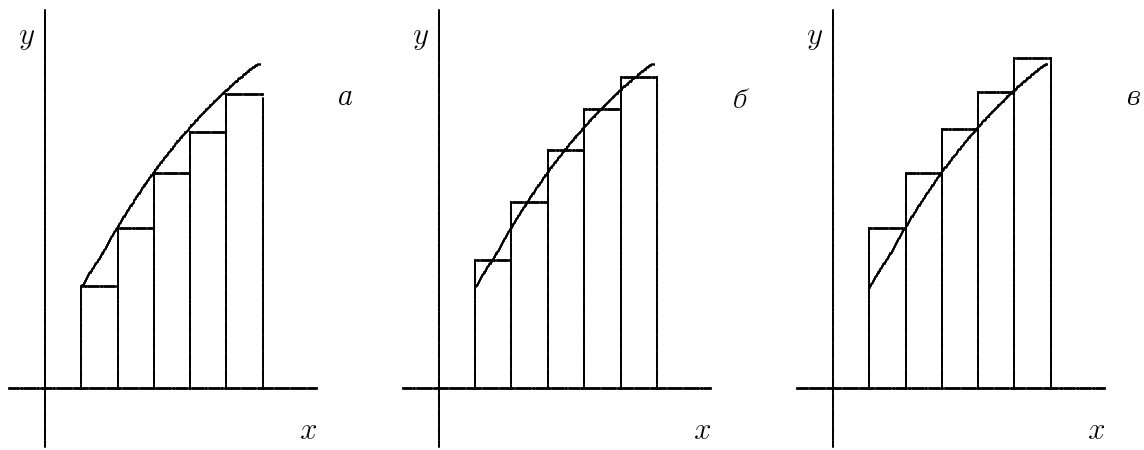


Рисунок 5.1 — Численное интегрирование по методу прямоугольников: *a* — левых, *б* — средних, *в* — правых

В этих формулах: N — число слагаемых; $h = (b - a)/N$ — шаг.

Погрешность R этого алгоритма составляет $R = h^2 M(b - a)/24$, где M — максимум $|f'(x)|$ на отрезке $[a, b]$.

Таким образом, подынтегральную функцию $f(x)$ заменяют на кусочно-постоянную.

Из-за малой точности методы прямоугольников используют редко (для гладких подынтегральных функций).

5.3. Метод трапеций

В рамках *метода трапеций* подынтегральную функцию $f(x)$ заменяют на кусочно-ломаную функцию, точки излома которой совпадают с узлами квадратурной формулы (рис. 5.2)

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{n=1}^{N-1} f(a + hn) \right), \quad (5.6)$$

где $h = (b - a)/N$.

Погрешность R этого алгоритма составляет $R = h^3 M(b - a)/12$, где M — максимум $|f''(x)|$ на отрезке $[a, b]$.

Очевидно, что эта квадратурная формула дает точное значение интеграла для любой линейной функции $f(x)$, поскольку $f''(x) = 0$.

5.4. Метод парабол

Метод парабол часто еще называют *методом Симпсона*.

Точность приближенного интегрирования заметно возрастет, если подынтегральную функцию $f(x)$ на каждом из подынтервалов заменить параболой, принима-

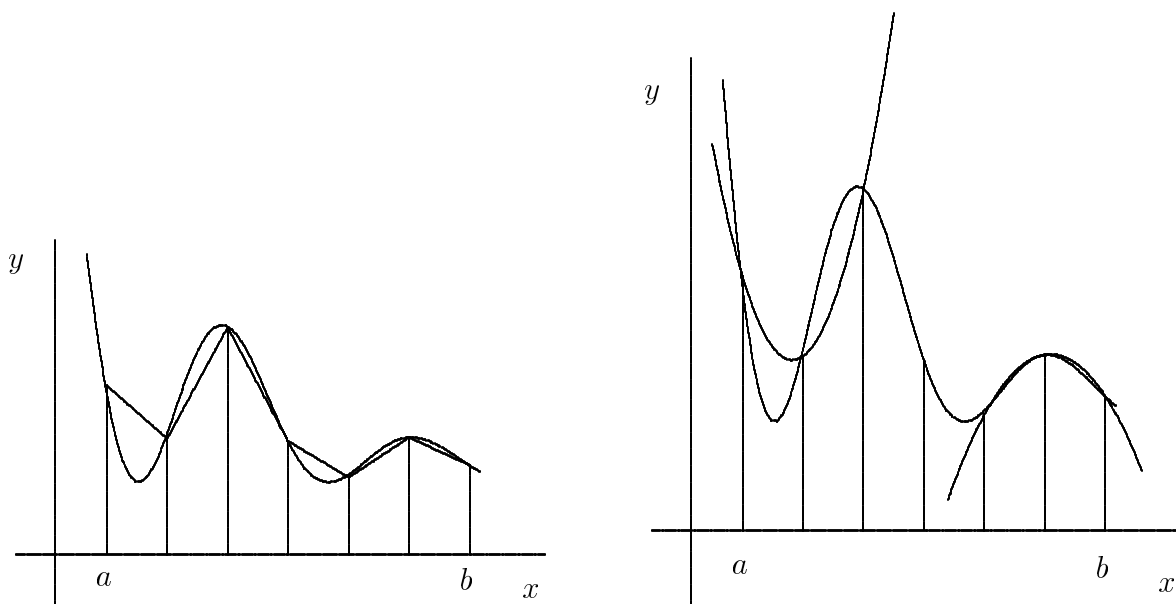


Рисунок 5.2 — К методам численного интегрирования: слева – метод трапеций; справа – метод парабол (указаны первая и последняя интерполирующая параболы)

ющей в каждых трех последовательных узлах значения, совпадающие со значениями подынтегральной функции.

Число узлов в этом методе выбирают четным (рис. 5.2).

Квадратурная формула парабол имеет вид

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 4 \sum_{n=1}^N f(a + 2hn - h) + 2 \sum_{n=1}^{N-1} f(a + 2hn) \right], \quad (5.7)$$

где шаг равен $h = (b - a)/(2N)$.

Всего в этой квадратурной формуле используется $2N + 1$ квадратурный узел. Оценка погрешности R этой квадратурной формулы следующая $R = h^4 M(b - a)/180$, где $M = \max_x |f'''(x)|$.

Формула парабол является точной для полиномов до третьей степени включительно, так как их четвертая производная равна нулю.

Численное интегрирование методом парабол возможно с переменным шагом, выбираемым из условия получения заданной точности результата. Для этого величины N придаются значения 2, 4, 8, 16 и т.д. При каждом удвоении количества узлов N точность интегрирования улучшается приблизительно в 15 раз.

Для применения вышеописанных алгоритмов прямоугольников, трапеций и парабол выбирают число N узлов, что даст для величины шага $h = (b - a)/N$ (в алгоритмах прямоугольников и трапеций) и $h = (b - a)/2N$ (в алгоритме парабол). Обычно принимают $N = 100$.

Если результат интегрирования необходимо получить более точным, то число узлов N алгоритма еще более увеличивают.

5.5. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса

Для дальнейшего увеличения точности квадратурного алгоритма увеличивают степень интерполяционного многочлена, значения которого совпадают со значениями подынтегральной функции в выбранных узлах.

В рамках *метода Ньютона-Котеса* для нахождения значения интеграла (5.1) задаются числом узлов N и для равноотстоящих аргументных узлов выбирают $x_n = a + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$, после чего организуют вычисление набора функциональных узлов $y_n = f(x_n)$. Для равноотстоящих узлов с постоянным шагом интерполяционный многочлен Лагранжа имеет вид

$$L_N(x) = \sum_{n=0}^N y_n \frac{(-1)^{N-n}}{n!(N-n)!} q(q-1)\dots(q-n+1)(q-n-1)\dots(q-N),$$

где $q = (x-a)/h$ – шаг интерполяции.

Перейдя к стандартному интервалу интегрирования $(-1, 1)$

$$J = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) dx$$

и заменив подынтегральную функцию на отвечающий ей интерполяционный многочлен Лагранжа, получим

$$J = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{n=0}^N H_n f(a+nh). \quad (5.8)$$

Таблица 5.1 — Квадратурные коэффициенты Ньютона-Котеса

$N = 1$	$\{H_1\} = (1, 1)$
$N = 2$	$\{H_2\} = \frac{1}{3} (1, 4, 1)$
$N = 3$	$\{H_3\} = \frac{1}{4} (1, 3, 3, 1)$
$N = 4$	$\{H_4\} = \frac{1}{45} (7, 32, 12, 32, 7)$
$N = 5$	$\{H_5\} = \frac{1}{144} (19, 75, 50, 50, 75, 19)$
$N = 6$	$\{H_6\} = \frac{1}{420} (41, 216, 27, 272, 27, 216, 41)$
$N = 7$	$\{H_7\} = \frac{1}{8640} (751, 3577, 1322, 2989, 2989, 1322, 3577, 751)$

Здесь $\{H_n\}$ – коэффициенты Ньютона-Котеса ($n = 1, 2, \dots, N$)

$$H_n = \frac{(-1)^{N-n}}{N n!(N-n)!} \int_0^N t(t-1)\dots(t-n+1)(t-n-1)\dots(t-N) dt.$$

Эти коэффициенты зависят не от вида $f(x)$, а только от количества узлов интерполяции N .

В табл. 5.1 приведено несколько значений узлов $\{H_n\}$ (в строке для данного N за скобку вынесен общий для всех $(N + 1)$ коэффициентов $\{H_n\}$ знаменатель).

Квадратурные коэффициенты вычисляются заранее и сводят в таблицу. Погрешность этого квадратурного алгоритма пропорциональна максимуму $(N + 2)$ -й производной функции $f(x)$ на интервале $[a, b]$.

Если разделить интервал $[a, b]$ на некоторое количество подынтервалов длиной h и применить формулу Ньютона-Котеса для $N = 1$ в каждом подынтервале, то при $N = 1$ мы получим формулу трапеций. Применив эту же формулу при $N = 2$ в каждом подынтервале, мы придем к формуле парабол.

5.6. Квадратурная формула Чебышева

В рассмотренных выше квадратурных формулах интервал h между узлами выбирался постоянным. Это обстоятельство оказалось препятствием для дальнейшего улучшения точности полученных результатов используемых алгоритмов численного интегрирования (при одинаковом и фиксированном числе узлов N). Кроме того, в некоторых точках подынтегральная функция может обладать особенностью (особенно на границах), что делает невозможным применение квадратурных алгоритмов типа трапеций или парабол.

П.Л. Чебышев предложил для вычисления значения определенного интеграла воспользоваться следующей квадратурной формулой, в которой все квадратурные коэффициенты одинаковые, $c_n = 1$, а координаты узлов $\{x_n\}$ подлежат определению:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{2}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n). \quad (5.9)$$

Значения $\{x_n\}$ узлов вычисляются заранее для различных N (рис. 5.3).

Ввиду произвольности выбора узлов используются различные варианты квадратурной формулы Чебышева.

Наиболее распространена квадратурная формула, узлы $\{x_n\}$ которой определяются из условия, что она является точной, когда $f(x)$ – полином степени N .

Из этого условия вытекают уравнения:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + \dots + x_k + \dots + x_N &= 0, \\ x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2 + \dots + x_N^2 &= \frac{N}{3}, \\ \dots & \\ x_1^k + x_2^k + \dots + x_k^k + \dots + x_N^k &= \frac{N}{2(k+1)} [1 + (-1)^k], \\ \dots & \\ x_1^N + x_2^N + \dots + x_k^N + \dots + x_N^N &= \frac{N}{2(N+1)} [1 + (-1)^N], \end{aligned}$$

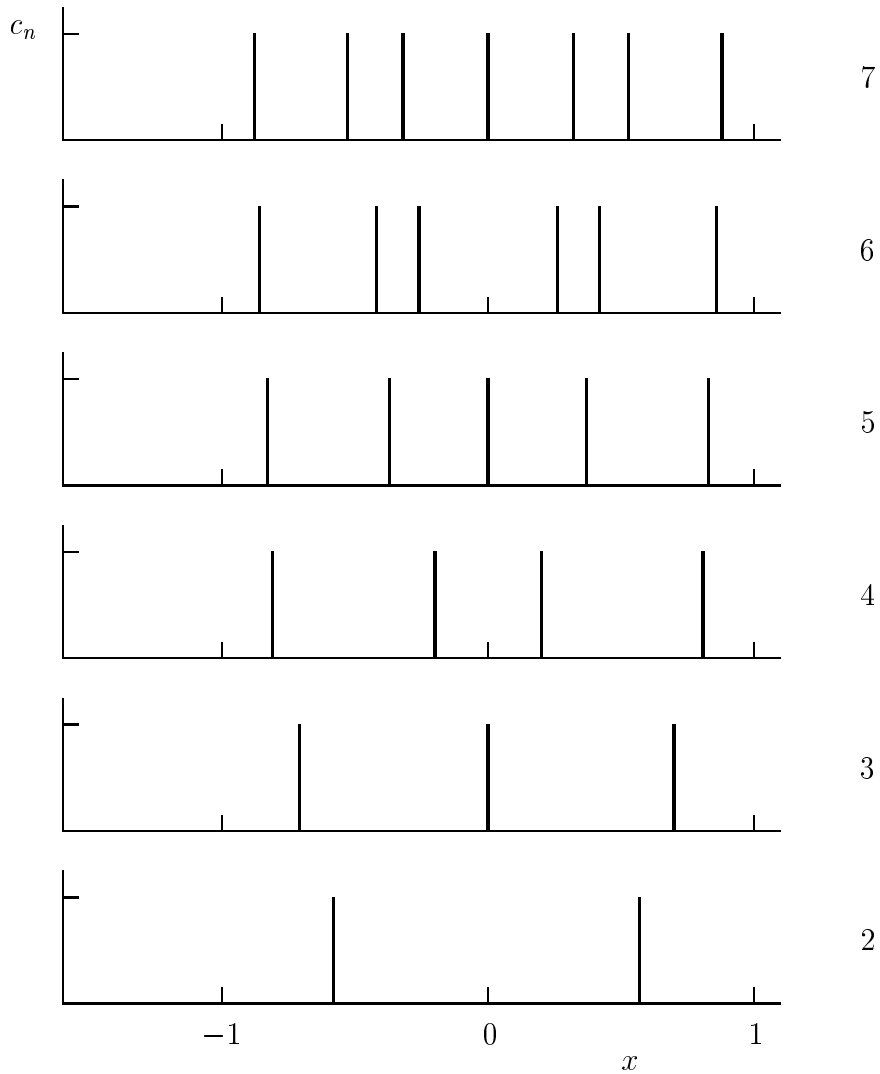


Рисунок 5.3 — Квадратурные узлы $\{x\}$ и квадратурные коэффициенты $\{c\}$ в методе Чебышева (справа указано общее количество узлов; все амплитуды коэффициентов равняются 1)

которые рассматривают как систему.

Если эта система из N уравнений для N неизвестных имеет действительные решения (при выбранном значении N), то эти решения и образуют искомый набор $\{x_n\}$ квадратурных узлов $n = 1, 2, \dots, N$ (табл. 5.2). Значения их сводят в таблицы для различных N (например, есть таблицы для $N = 96$ и $N = 192$).

В табл. 5.2 приведено несколько значений узлов $\{x_n\}$ квадратурной формулы Чебышева.

Если пределы a и b интегрирования отличны от ± 1 , квадратурная формула Чебышева принимает вид

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{n=1}^N f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_n\right). \quad (5.10)$$

Если требуется использовать большее число узлов, то интервал $[a, b]$ предвари-

Таблица 5.2 — Узлы квадратурной формулы Чебышева

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		-0,266636		-0,528762
	-0,000000		0,266636		-0,167906
	0,707107		0,422519		0,000000
4	-0,794655		7		0,866247
	-0,187593	-0,883862		0,528762	
	0,187593	-0,529657	0,601019		
	0,794655	-0,323912	0,911589		
5	-0,832498	0,000000			
	-0,374541	0,323912			
	0,000000	0,529657			
	0,374541	0,883862			
	0,832498				

тельно разбивают на задаваемое программно число M подинтервалов, после чего для каждого из них пользуются алгоритмом по формуле (5.10), а результаты промежуточного интегрирования складывают.

При проведении численного интегрирования, необходимо учитывать сложность программы, требуемую точность и наличие у подынтегральной функции особенностей.

В квадратурной формуле Чебышева абсциссы $\{x_n\}$ узлов никогда не попадают на границы интервала интегрирования. Поэтому, если особенности подынтегральной функции имеют место в граничных точках интервала интегрирования, квадратурная формула Чебышева предпочтительна.

5.7. Квадратурная формула Гаусса

Для улучшения точности при численном интегрировании используют *квадратурную формулу Гаусса*

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{n=1}^N c_n f(x_n), \quad (5.11)$$

в которой используются как квадратурные узлы $\{x_n\}$ интерполяции, так и квадратурные коэффициенты $\{c_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N$.

Погрешность квадратурной формулы Гаусса следующая :

$$R_N = \frac{(b-a)^{2N+1}}{2N+1} \frac{(N!)^4}{[(2N)!]^3} \max_x |f^{(2N)}(x)|. \quad (5.12)$$

Набор из $2N$ величин $\{c_n\}$ и $\{x_n\}$ определяют из условия, что квадратурная формула точна для любого многочлена степени $2N$, и находят заранее (рис. 5.4).

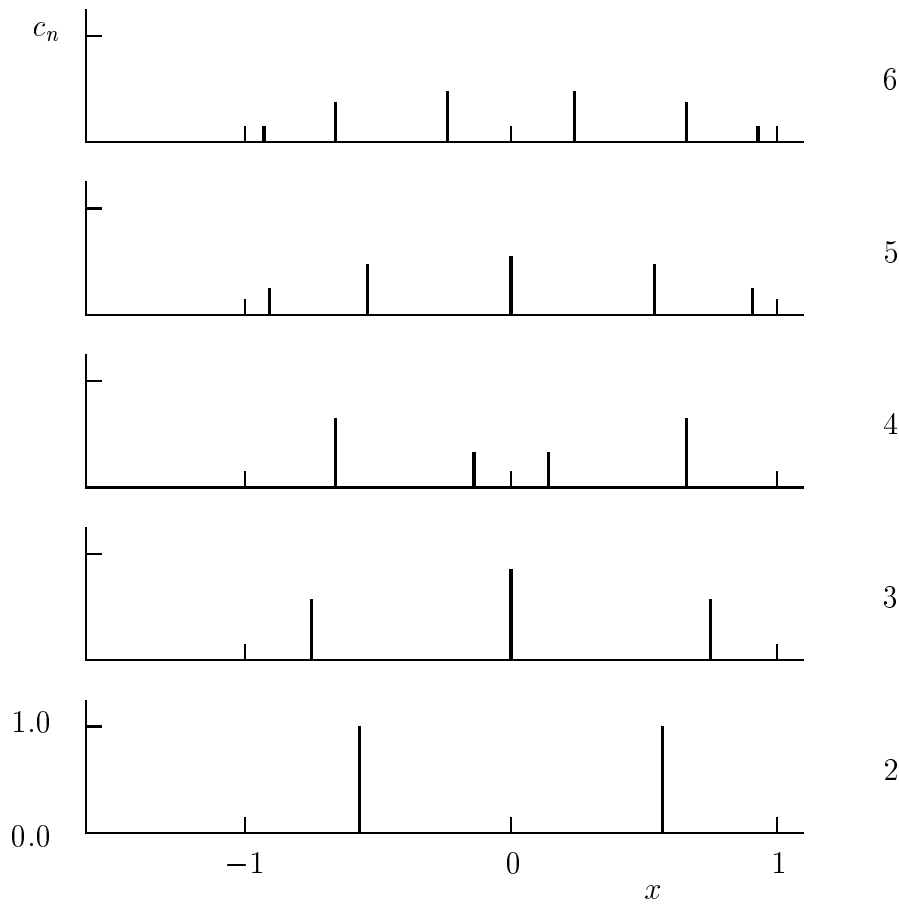


Рисунок 5.4 — Квадратурные узлы $\{x\}$ и квадратурные коэффициенты $\{c\}$ в методе Гаусса (справа указано общее количество узлов)

Абсциссы $\{x_n\}$ образованы из нулей многочлена Лежандра $P_N(x)$, а весовые множители находятся из выражения

$$c_n = \frac{2}{(1 - x_n^2) [P'_n(x_n)]^2}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (5.13)$$

В общем случае с помощью линейной замены переменной интегрирования квадратурную формулу Гаусса приводят к виду

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{n=1}^N c_n f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_n\right). \quad (5.14)$$

В табл. 5.3 приведено несколько значений квадратурных узлов $\{x_n\}$ и квадратурных коэффициентов $\{c_n\}$ для $2 \leq N \leq 6$ алгоритма Гаусса. Имеются таблицы для $\{x_n\}$ и $\{c_n\}$ большого объема, например $N = 96$ и $N = 192$.

Квадратурная формула Гаусса обеспечивает высокую точность численного интегрирования при небольшом числе узлов. Так же, как и в квадратурной формуле Чебышева, абсциссы $\{x_n\}$ узлов квадратурной формулы Гаусса *никогда не попадают на границы интервала*.

Таблица 5.3 — Узлы квадратурной формулы Гаусса

N	x_n	c_n
2	-0,5773503	1,0000000
	0,5773503	1,0000000
3	-0,7745967	0,5555556
	-0,0000000	0,8888889
	0,7745967	0,5555556
4	-0,8611363	0,3478548
	-0,3399810	0,6521452
	0,3399810	0,6521452
	0,8611363	0,3478548
5	-0,9061798	0,2369269
	-0,5384693	0,4786287
	0,0000000	0,5688888
	0,5384693	0,4786287
	0,9061798	0,2369269
6	-0,9324695	0,1713245
	-0,6612093	0,3607616
	-0,2386192	0,4679131
	0,2386192	0,4679131
	0,6612093	0,3607616
	0,9324695	0,1713245

По сравнению с другими описанными квадратурными алгоритмами формула Гаусса при заданном N наиболее точна. Эта квадратурная формула удобна в работе, ею широко пользуются в практике численного интегрирования.

5.8. Развернутый пример применения квадратурных алгоритмов

Применение квадратурных алгоритмов связано с видом подынтегрального выражения, требуемой точностью и наличием вычислительных ресурсов.

Рассмотрим применение перечисленных выше квадратурных алгоритмов на примере интеграла (рис. 5.5)

$$J(x) = \int_0^x f(x') dx', \quad (5.15)$$

где

$$f(x') = \exp(x') \sin(x'). \quad (5.16)$$

Такой выбор подынтегральной функции связан с её трансцендентностью и при этом дает возможность сравнения результатов с их аналитическим аналогом.

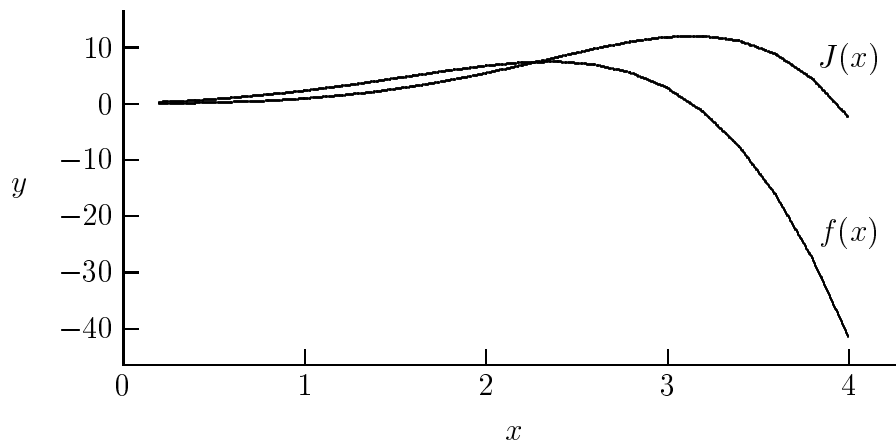


Рисунок 5.5 — Зависимости подынтегральной функции $f(x)$ и результаты интегрирования $J(x)$

В выражении (5.15) для каждого текущего значения результата $J = J(x)$ интервал интегрирования будет равен $[0, x]$ (рис. 5.5), а для каждого значения аргумента x результат аналитического интегрирования следующий:

$$J_{\text{ideal}}(x) = \frac{1}{2} [1 + \exp(x)(\sin x - \cos x)]. \quad (5.17)$$

Поскольку часть результатов практически сливаются при их построении на графике, приведем численные значения интеграла $J(x)$ в табл. 5.4.

В ней обозначено:

- $J_1(x)$ — метод левых прямоугольников (5.3);
- $J_2(x)$ — метод средних прямоугольников (5.4);
- $J_3(x)$ — метод правых прямоугольников (5.5);
- $J_4(x)$ — метод трапеций (5.6);
- $J_5(x)$ — метод парабол Симпсона (5.7);
- $J_6(x)$ — метод Чебышева (5.10);
- $J_7(x)$ — метод Гаусса (5.14).

При программной реализации было выбрано для всех значений верхнего предела x в (5.15) количество узлов N :

- в алгоритмах прямоугольников, трапеций и парабол — $N = 25$ квадратурных узлов;
- в алгоритме Чебышева — $N = 7$ квадратурных узлов;
- в алгоритме Гаусса — $N = 6$ квадратурных узлов.

Из табл. 5.4 и рис. 5.6 следует, что если выбирать из относительно простых методов прямоугольников, то следует остановиться на методе средних прямоугольников. При этом важно, что в этом методе не используются значения подынтегральной функции в концевых точках интервала интегрирования, что существенно при нахождении значений интегралов с особенностями в этих точках.

Методы левых и правых прямоугольников дают результаты худшего качества.

Таблица 5.4 — Результаты численного интегрирования

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

Из методов трапеций и парабол предпочтение нужно отдать методу Симпсона (парабол) как более точному при одном и том же количестве квадратурных узлов N . Однако эти методы используют значение подынтегральной функции в конечных точках интервала интегрирования.

Сравнивая результаты интегрирования, полученные по методу Гаусса и методу Чебышева, можно сделать вывод в пользу метода Гаусса, поскольку точность, достигаемая этим методом, лучше. Отметим, что число используемых квадратурных узлов N в этих алгоритмах достаточно невелико (7 и 6).

С увеличением верхнего предела x интегрирования в (5.15) точность всех алгоритмов ухудшается (рис. 5.6). Это можно пояснить тем, что при неизменном количестве квадратурных узлов N шаг h интегрирования в (5.15) растёт.

Для улучшения точности необходимо:

- в алгоритмах прямоугольников, трапеций и парабол увеличивать число квадратурных узлов N ;
- в алгоритмах по методу Чебышева и методу Гаусса при выбранном и неизменном количестве квадратурных узлов дробить весь интервал интегрирования на подынтервалы и находить значение интеграла на каждом из них, после чего эти значения складывать. Общее число подынтервалов необходимо увеличивать до такой величины, которая обеспечит требуемую точность.

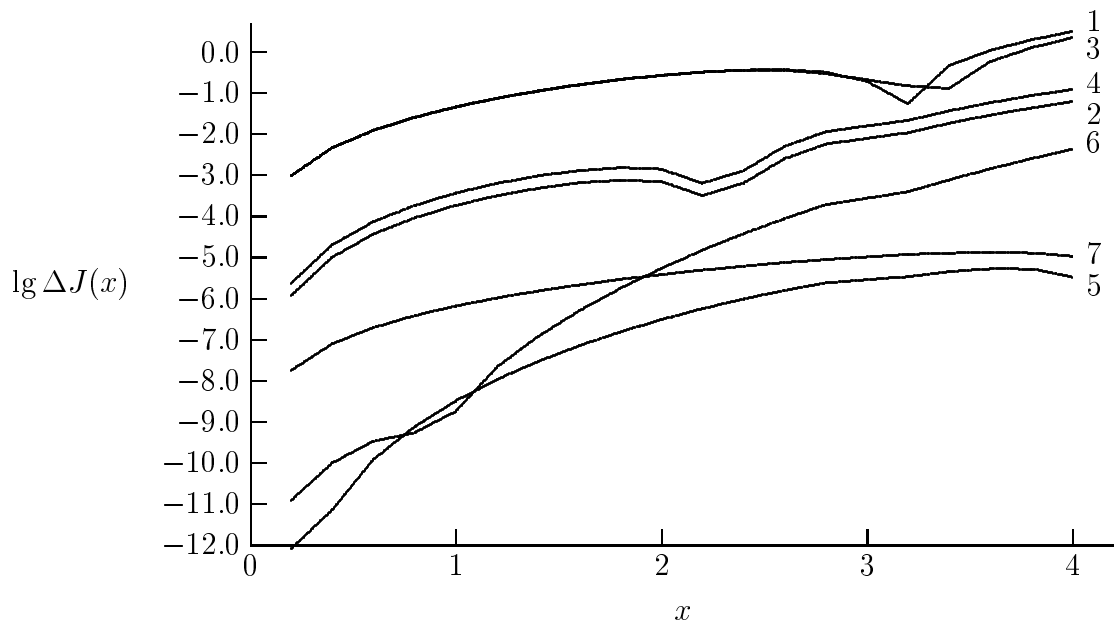


Рисунок 5.6 — Погрешность $\Delta J(x)$ численного определения значения интеграла $J(x)$ с переменным верхним пределом x . Квадратурные алгоритмы: 1 – левых прямоугольников; 2 – средних прямоугольников; 3 – правых прямоугольников; 4 – трапеций; 5 – метод парабол Симпсона (все 25 узлов); 6 – метод Чебышева (7 квадратурных узлов); 7 – метод Гаусса (6 квадратурных узлов)

5.9. Вычисление интегралов с особенностями

При численном интегрировании возможны особенности двух видов:

- а) бесконечны один или оба предела интегрирования;
- б) интегрируемые особенности внутри интервала интегрирования.

Если оба предела интегрирования равны бесконечности, то исходный интеграл J можно привести к виду

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\infty} [f(x) + f(-x)] dx, \quad (5.18)$$

в котором бесконечен уже только один (верхний) предел.

Для вычисления значений интегралов, у которых один из пределов (например, верхний) равен бесконечности, используют одну из стандартных подстановок переменной интегрирования, сводящей исходное выражение к интегралу с фиксированными пределами.

Например,

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\pi/2} f(\operatorname{tg} \varphi) \frac{d\varphi}{\cos^2 \varphi} \quad - \text{ замена } x = \operatorname{tg} \varphi; \quad (5.19, a)$$

$$\int_1^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 f(t^{-1}) \frac{dt}{t^2} \quad - \text{ замена } x = 1/t; \quad (5.19, b)$$

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 [f(t) + t^{-2} f(t^{-1})] dt \quad - \text{ замена } x = 1/t. \quad (5.19, c)$$

Таким образом, имеющаяся особенность переносится из предела интегрирования в граничную точку подынтегрального выражения, а выбор замен определяется конкретным видом функции $f(x)$.

Пусть подынтегральное выражение $f(x)$ в исходном интеграле

$$J = \int_a^b f(x) dx$$

имеет особенности внутри интервала интегрирования в точках $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{M-1}, \gamma_M$.

В таком случае интеграл J необходимо разбить на сумму интегралов

$$J = \int_a^{\gamma_1} f(x) dx + \sum_{m=1}^{M-1} \int_{\gamma_m}^{\gamma_{m+1}} f(x) dx + \int_{\gamma_M}^b f(x) dx \quad (5.20)$$

так, чтобы все особенности оказались локализованными в пределах интегрирования.

Определение значений возникших $(M + 1)$ интегралов можно теперь осуществить с помощью квадратурного алгоритма Чебышева или квадратурного алгоритма Гаусса, поскольку в этих формулах абсциссы $\{x_n\}$ узлов не попадают на границы интервала.

Таким образом, нахождение значений интегралов с особенностями требует предварительного исследования подынтегрального выражения и сведения исходного интеграла к виду, удобному для применения подходящей квадратурной формулы.

5.10. Вычисление интегралов, подынтегральные функции которых содержат весовой множитель

В практическом программировании часто встречаются интегралы некоторых стандартных видов. Особенно распространены интегралы с определенными значениями пределов интегрирования и заданными весовыми множителями у подынтегральных функций.

Перечислим наиболее важные из них :

квадратурные формулы Гаусса и Чебышева отвечают интегралу

$$J = \int_{-1}^1 f(x) dx; \quad (5.21, a)$$

квадратурная формула Гаусса-Лагерра отвечает интегралу

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-x) f(x) dx; \quad (5.21, b)$$

квadrатурная формула Гаусса-Эрмита отвечает интегралу

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) f(x) dx; \quad (5.21, c)$$

квadrатурная формула Гаусса-Чебышева отвечает интегралу

$$J = \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\pm 1/2} f(x) dx; \quad (5.21, d)$$

квadrатурная формула Гаусса-Ахиезера отвечает интегралу

$$J = \int_{\alpha}^{\beta} [x(x-\alpha)(\beta-x)]^{-1/2} f(x) dx, \quad (5.21, e)$$

присоединенная квadrатурная формула Гаусса-Лагерра отвечает интегралу

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-x^2) x^{-1/2} f(x) dx. \quad (5.21, f)$$

Для этих и многих других специальных интегралов стандартного вида разработаны квadrатурные формулы, для практической реализации которых наборы квadrатурных коэффициентов и узлов интерполяции определены заранее (для различного числа слагаемых, входящих в квadrатурную формулу) и сведены в таблицы.

Отметим также, что для многих специальных функций, которые часто используются и имеют практическое значение, таких как функция Лапласа $\Phi(x)$, функция Бесселя $J_n(x)$ индекса n , функция ошибок $\operatorname{erf}(x)$ и дополнительная к ней $\operatorname{erfc}(x)$, в математических обеспечениях программных компьютерных сред имеются встроенные подпрограммы их вычисления. Поэтому часто оказывается удобным сводить рассматриваемый интеграл к этим специальным функциям.

5.11. Комплекснозначные интегралы

В ряде задач, таких как вычисление преобразований Фурье или обращение преобразований Лапласа, возникает необходимость найти значение *комплекснозначного интеграла*. В общем случае интегралы такого типа имеют следующий вид:

$$J = \int_C f(z) dz, \quad (5.22)$$

где $f(z)$ – комплекснозначная аналитическая функция комплексного аргумента z ; C – путь интегрирования.

Пусть на комплексной плоскости путь C начинается в точке $z = z_n$ и заканчивается в точке $z = z_k$. Возможный подход к вычислению интеграла J – это параметризация пути интегрирования C .

Чаще всего путь C с помощью вещественной переменной t параметризуют прямой

$$z = z(t) = \frac{1}{2} [(z_K + z_H) + t(z_K - z_H)]. \quad (5.23)$$

В этом случае интеграл (5.22) принимает вид

$$J = \frac{z_K - z_H}{2} \int_{-1}^1 f \left(\frac{z_K + z_H}{2} + t \frac{z_K - z_H}{2} \right) dt. \quad (5.24)$$

Далее, после разделения подынтегрального выражения на реальную и мнимую части ($i = \sqrt{-1}$)

$$f(\xi) = \operatorname{Re} f(\xi) + i \operatorname{Im} f(\xi), \quad \text{где } \xi = \frac{z_K + z_H}{2} + t \frac{z_K - z_H}{2}, \quad (5.25)$$

находят значения возникших двух интегралов и, наконец, интеграла J .

5.12. Двухкратные и трехкратные интегралы

Кратные интегралы можно вычислять повторным применением методов, построенных для однократных интегралов.

Для *двухкратных интегралов*, например, можно пользоваться формулой

$$\int_{\alpha_1}^{\beta_1} \int_{\alpha_2}^{\beta_2} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M c_n c_m f(x_{1,n}, x_{2,m}), \quad (5.26)$$

где $\{c_n\}$ и $\{c_m\}$ – наборы квадратурных коэффициентов, а $\{x_{1,n}\}$ и $\{x_{2,m}\}$ – наборы квадратурных узлов.

Аналогичную формулу можно построить и для *трехкратных интегралов*

$$\int_{\alpha_1}^{\beta_1} \int_{\alpha_2}^{\beta_2} \int_{\alpha_3}^{\beta_3} f(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3 = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L c_n c_m c_l f(x_{1,n}, x_{2,m}, x_{3,l}). \quad (5.27)$$

При вычислении двухкратных и трехкратных интегралов алгоритмы однократного интегрирования используются рекуррентно. Объем вычислительных затрат в этих случаях пропорционален произведениям NM и NML соответственно, а при равном числе узлов ($M = L = N$) необходимые ресурсы растут как N^2 и N^3 .

5.13. Многократные интегралы

Будем предполагать, что искомый интеграл J_K кратности K приведен к стандартным пределам интегрирования $[0, 1]$ по всем K переменным интегрирования

$$J_K = \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ раз}} f(X) d^K X, \quad (5.28)$$

где вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ образован из набора переменных интегрирования, а $f(X)$ – подынтегральная функция (у дифференциала $d^K X$ указана размерность – кратность интегрирования K).

Для вычисления определенного интеграла кратности K (5.28) Н.М. Коробов построил *оптимальные интерполяционные формулы* для скалярных функций, зависящих от заданного набора из K аргументов. На этой основе предложена квадратурная формула

$$\underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ раз}} f(X) d^K X = \sum_{m=1}^M c_m f(X_m), \quad (5.29)$$

для которой набор из M весовых коэффициентов $\{c_m\}$ и координаты узлов $\{X_m\}$ ($m = 1, 2, \dots, M$) вычисляются заранее для различных K . Построены таблицы этих величин для кратности $2 \leq K \leq 21$.

Алгоритм Коробова применяют при многократном интегрировании подынтегральных выражений гладкого типа.

В тех случаях, когда подынтегральная функция обладает особенностями (хотя и интегрируемыми), например задается условными выражениями или характеризуется скачками её значений, применяют *метод статистических испытаний* или *метод Монте-Карло*. Этот метод не имеет ограничений на величину кратности интегрирования (от неё зависят только требуемые временные ресурсы). Подробно с методом Монте-Карло можно ознакомиться в соответствующей теме.

Таблица 5.5 — Применение квадратурных алгоритмов для интегралов заданной кратности

Кратность K	Алгоритм				
	Симпсона	Чебышева	Гаусса	Коробова	Монте-Карло
1	+	+	+		+
2	±	+	+	+	+
3	–	±	±	+	+
4	–	–	–	+	+
≤ 21	–	–	–	+	+
> 21	–	–	–	–	+

В табл. 5.5 систематизированы сведения о применимости некоторых квадратурных алгоритмов для интегралов заданной кратности.

В этой таблице символ “+” говорит о применимости метода, символ “–” указывает на невозможность использования, а символ “±” – на частичную возможность применения. Из табл. 5.5 следует, что по мере увеличения кратности K интегрирования возможность применения перечисленных алгоритмов сужается.

В математических обеспечениях программных сред различных компьютеров, а также во многих специализированных математических пакетах (среди них отметим различные версии таких пакетов, как Maple, Mathematica, MathCAD, Matlab и Statistica) имеются встроенные подпрограммы вычисления многократных интегралов с наперед заданной точностью. Однако до их использования необходимо

обязательно выполнить проверку на примере модельного интеграла, результат интегрирования которого может быть определен аналитически и поэтому его значение является наперед известным.

5.14. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на шесть часов и содержит три задания.

З а д а н и е 1

Напишите программу численного интегрирования. Программа должна содержать пять квадратурных алгоритмов, основанных на формулах прямоугольников (5.3)–(5.5), формуле трапеций (5.6) и формуле парабол (5.7).

Исходные данные для программы:

a – нижний предел интегрирования;

b – верхний предел интегрирования;

$f(x)$ – функция, интеграл от которой ищется;

N – число шагов.

Результат работы программы – массив, содержащий значения пяти вычисленных интегралов.

Варианты

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 д а н и е 2

Напишите программу численного интегрирования функции. Используйте метод Чебышева.

Исходные данные для программы:

a – нижний предел интегрирования;

b – верхний предел интегрирования;

$f(x)$ – подынтегральная функция;

N – полное число узлов квадратурной формулы.

Результат работы программы – массив, содержащий значения вычисленных интегралов.

Результаты необходимо сравнить с аналитическими значениями интегралов.

Варианты

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 д а н и е 3

Напишите программу численного интегрирования функции. Используйте метод Гаусса.

Исходные данные для программы :

a – нижний предел интегрирования;

b – верхний предел интегрирования;

$f(x)$ – подынтегральная функция;

N – число узлов квадратурной формулы.

Результат работы программы – массив, содержащий значения вычисленных интегралов. Результаты необходимо сравнить со значениями интегралов, полученных аналитически.

Варианты

- 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) $a = 0,8$; $b = 1,6$; $f(x) = x \cdot (\ln(x) + 1)$; $N = 2, 3, 4, 5, 6$.

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание работы;
- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения числовых экспериментов, содержащий исходные данные и результаты численного интегрирования;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

5.15. Задания для проверки

1. В чем суть методов численного интегрирования функций?
2. Сравните методы численного интегрирования по точности на основании остаточных членов квадратурных формул.
3. Проанализируйте работу квадратурных алгоритмов: а) для постоянной подынтегральной функции, $f(x) = \text{const}$; б) подынтегральной функции линейного вида.
4. Для повышения точности численного интегрирования возможны два подхода. В первом из них увеличивают число узлов в выбранной квадратурной формуле, во

втором исходный интервал $[a, b]$ делится на совокупность подынтервалов, в каждом из которых используют квадратурную формулу с фиксированным числом узлов, а результаты складывают. Какой подход предпочтительней?

5. Предложите и обоснуйте квадратурные алгоритмы для расчета двукратных интегралов.

7. Для выбранного полинома второй степени $P_2(x)$ проверьте справедливость формулы (5.6).

8. Для выбранного полинома третьей степени $P_3(x)$ проверьте справедливость формулы (5.7).

9. Рассмотрите приближенную формулу, аппроксимирующую алгоритм Гаусса для пяти узлов:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \{0,2572 [f(x_1) + f(x_5)] + 0,5 [f(x_2) + f(x_4)] + 0,4856 f(x_3)\},$$

со следующими узлами квадратурного алгоритма

$$x_1 = \frac{19a+b}{20}; \quad x_2 = \frac{3a+b}{4}; \quad x_3 = \frac{a+b}{2}; \quad x_4 = \frac{a+3b}{4}; \quad x_5 = \frac{a+19b}{20}.$$

Сравните точность этого алгоритма и алгоритма интегрирования Гаусса.

6. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

6.1. Основные теоретические положения

Во многих практических задачах приходится сталкиваться с необходимостью решения уравнений, содержащих производные от функции. Уравнение, в которое искомая функция входит под знаком производной, называется *дифференциальным уравнением*. Решить дифференциальное уравнение – это значит отыскать такую функцию, которая обратит заданное уравнение в тождество. Существует много приемов для нахождения аналитических решений дифференциальных уравнений. Однако в большинстве практических случаев использование классических (аналитических) методов практически невозможно. Это обуславливает важность численных методов для решения дифференциальных уравнений, являющихся основой при составлении алгоритмов и программ.

Если неизвестная функция, входящая в дифференциальное уравнение, зависит только от одной независимой переменной, то дифференциальное уравнение называется *обыкновенным*.

Рассмотрим простейшее обыкновенное дифференциальное уравнение

$$y' = f(x, y) \quad (6.1)$$

с заданной правой частью $f(x, y)$, зависящей в общем случае от аргумента x и искомой функции $y = y(x)$. Любая функция, удовлетворяющая этому уравнению, называется *общим решением*.

Частным решением дифференциального уравнения называется решение, которое может быть получено из общего по выполнению некоторого условия. Хотя условия могут быть самыми разнообразными, среди них чаще всего встречаются *начальные* и *граничные*.

Основной задачей, относящейся к дифференциальному уравнению (6.1), является *задача Коши* – найти частное решение $y = y(x)$ этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию $y(x_0) = y_0$.

Решить дифференциальное уравнение численным методом – значит для заданной последовательности x_0, x_1, \dots, x_N и заданного значения y_0 найти такие значения y_1, y_2, \dots, y_N , что $y_n = y(x_n)$, где $n = 1, 2, \dots, N$.

Таким образом, численные методы вместо нахождения функции $y(x)$ позволяют получить таблицу значений этой функции для заданной последовательности аргументов. Такая последовательность называется *аргументной сеткой*. В случае равноотстоящих аргументов постоянное расстояние между соседними точками сетки называется постоянным *шагом интегрирования*.

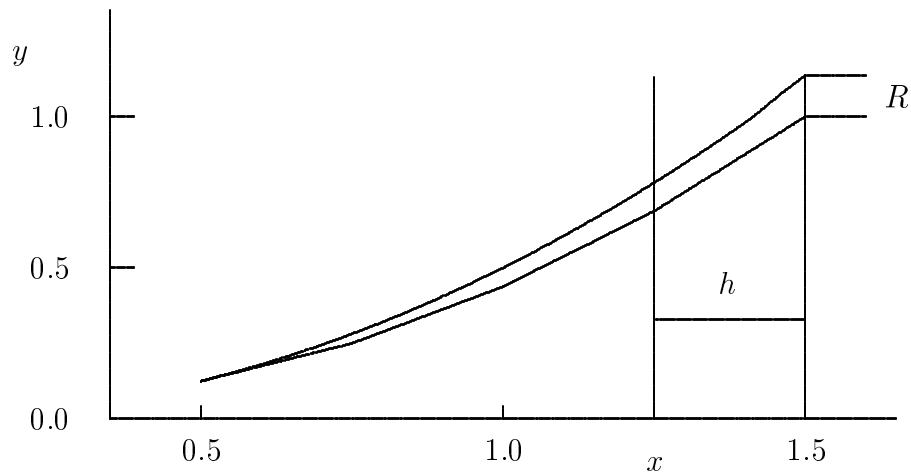


Рисунок 6.1 — Пример решения задачи Коши; число постоянных шагов $N = 4$; плавная кривая – точное решение; ломаная – результат итерационного алгоритма

По завершении расчетов в таблицу результатов войдут данные, отличающиеся от истинных (идеальных). Разница $|y(x_n) - y_n|$ между точным значением функции в каждом из аргументных узлов $0 \leq n \leq N$ и полученными численными значениями называется *погрешностью* R . Для уменьшения погрешности либо выбирают более подходящий метод, либо увеличивают число узлов N , т.е. уменьшают шаг интегрирования h .

Наиболее распространены *итерационные алгоритмы* решения задачи Коши на аргументном интервале $[a, b]$. В них по заданному начальному условию y_0 в точке $x_0 = a$ с помощью уравнения (6.1) находят значение y_1 в следующей точке x_1 . По значению y_1 в точке x_1 находят значение y_2 в точке x_2 и так далее, пока не будут заполнены все требуемые узлы (рис. 6.1) вплоть до точки $x_N = b$.

Рассмотрим некоторые из численных методов решения задачи Коши.

6.2. Метод Эйлера

Хотя этот метод является сравнительно грубым, идеи, положенные в его основу, являются исходными для ряда других методов. Пусть дано дифференциальное уравнение первого порядка

$$y' = f(x, y) \quad (6.2)$$

с начальным условием

$$x = x_0, \quad y(x_0) = y_0. \quad (6.3)$$

Требуется найти решение уравнения на отрезке $[a, b]$, где $a = x_0$.

Разобьем рассматриваемый отрезок $[a, b]$ на N равных частей и получим последовательность

$$x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N,$$

где $h = (b - a) / N$ – постоянный шаг интегрирования, причем $x_0 = a$ и $x_N = b$.

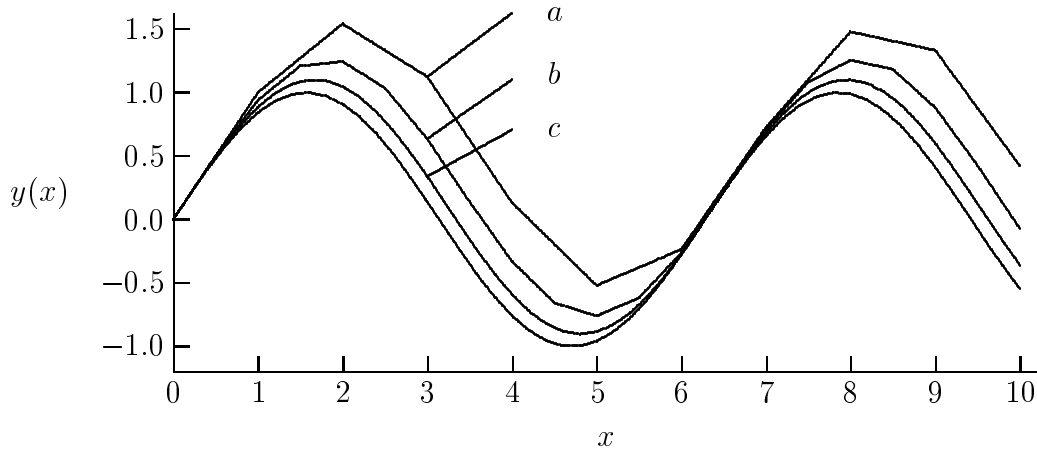


Рисунок 6.2 — К решению методом Эйлера дифференциального уравнения $y' = \cos(x)$ с начальным условием $y(x_0) = 0, 0 \leq x \leq 10$ и различным числом шагов N . Плавная кривая — аналитическое решение $y(x) = \sin(x)$; a — $N = 10$, b — $N = 20$, c — $N = 50$

Итерационный алгоритм метода Эйлера следующий :

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (6.4)$$

Повторяя этот процесс, получим таблицу значений y решений исходного дифференциального уравнения на сетке $[a, b]$. Погрешность R метода составляет $O(h^2)$. Метод Эйлера является *одноточечным*.

Хотя этот метод является самым грубым, он достаточно распространен в связи с тем, что он требует мало ресурсов. Его, в частности, широко применяют при построении алгоритмов нахождения решений дифференциальных уравнений в частных производных.

Пример

Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$y' = \cos(x), \quad y(x_0) = 0, 0$$

на интервале $0 \leq x \leq 10$.

Требуется найти его численное решение с использованием описанного метода Эйлера и исследовать зависимость от количества шагов интегрирования N .

Решение

Аналитическое решение этого уравнения легко получить, это функция $y(x) = \sin(x)$.

С целью сравнения работы методов выберем на интервале решения относительно небольшое число узлов и отвечающий ему шаг интегрирования $h = 10/N$: а) $N = 10$, $h = 1, 0$; б) $N = 20$, $h = 0, 5$; в) $N = 50$, $h = 0, 2$.

На рис. 6.2 приведены графические зависимости для аналитического решения $y(x)$ и трех численных. Из рис. 6.2 видно, что с увеличением количества шагов N (соответственно уменьшением величины шага h) качество решения улучшается. Для большего количества узлов N зависимости на рис. 6.2 не приводятся, т.к. они сливаются с графиком аналитического решения $y(x) = \sin(x)$.

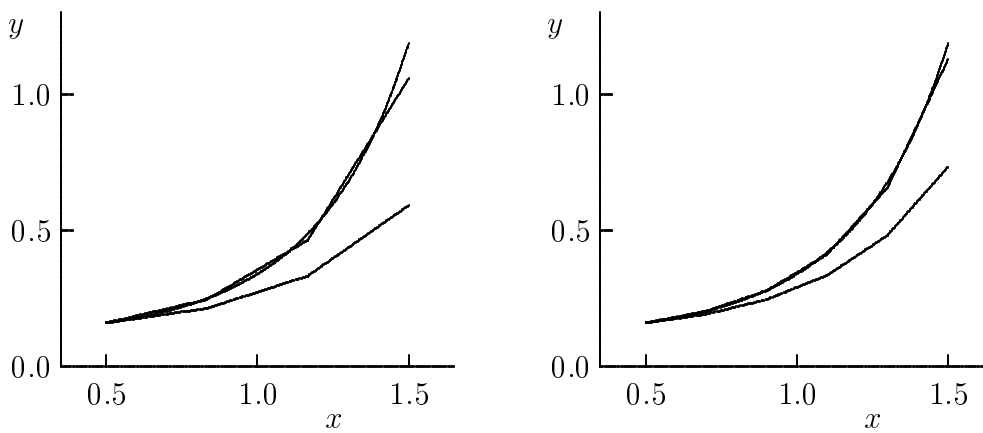


Рисунок 6.3 — Пример численного интегрирования обыкновенного дифференциального уравнения $y' = 2xy$ на интервале $(0,5; 1,5)$ с начальным условием $y(0,5) = 0,16$; число шагов: слева $N = 3$; справа $N = 5$. Ломаные: снизу – метод Эйлера, сверху – Эйлера-Коши; плавная кривая – аналитическое решение $y(x) = \exp(x^2)/8$

6.3. Модифицированный метод Эйлера

Этот метод еще часто называют *методом Эйлера-Коши*. Часто используют различные модификации метода Эйлера. В одной из них каждый шаг итерационного алгоритма состоит из двух операций.

Сначала находят

$$y_n^* = y_n + hf(x_n, y_n), \quad (6.5, a)$$

а затем

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_n, y_n^*)]. \quad (6.5, b)$$

Этот метод двухточечный, так как на каждом шаге требуется находить значение правой части уравнения $y' = f(x, y)$ в двух точках. Погрешность метода R зависит от величины шага $h = (b - a)/N$ как $O(h^3)$.

Пример применения описанных двух методов приведен на рис. 6.3. О точности полученных результатов при сравнительно небольшом числе шагов ($N = 3$ и $N = 5$) можно судить, если сравнить полученные численные результаты с ходом аналитического решения. На практике подобное решение, как правило, отсутствует. Поэтому при практической работе с конкретным дифференциальным уравнением строят похожее на него уравнение, но зато имеющее аналитическое решение. На модели проверяют алгоритм и выбирают его параметры, изучают точность. Только после этого численно находят решение искомого дифференциального уравнения.

6.4. Метод Рунге–Кутты

Алгоритмы, принадлежащие к группе *методов Рунге-Кутты*, отличаются друг от друга объемом вычислений и получаемой при этом точностью. Сущность этого метода заключается в том, что переход из одного аргументного узла в следующий

реализуется не сразу, а с помощью вычисления значений в промежуточных точках (аргументных узлах), например, двух, трех или четырех.

Рассмотрим схему метода Рунге-Кутты на примере *четырёхточечного численного алгоритма*, который является одним из методов повышенной точности.

В рамках метода Рунге-Кутты численного решения дифференциального уравнения $y' = f(x, y)$ с начальным условием $y(x_0) = y_0$ итерационный алгоритм следующий.

Сначала для каждой пары текущих значений (x_n, y_n) определяют четыре вспомогательных величины

$$\begin{aligned} R_1 &= hf(x_n, y_n), \\ R_2 &= hf(x_n + h/2, y_n + R_1/2), \\ R_3 &= hf(x_n + h/2, y_n + R_2/2), \\ R_4 &= hf(x_n + h, y_n + R_3), \end{aligned} \tag{6.6, a}$$

после чего находят

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4). \tag{6.6, b}$$

Погрешность R метода Рунге-Кутты зависит от величины шага h как $O(h^5)$.

Обычно используют постоянную величину шага h численного интегрирования. Вместе с тем, возможно построить вариант алгоритма, в котором шаг h изменяется в процессе вычислений. В *адаптивных вариантах* алгоритма Рунге-Кутты величину шага h можно изменять в процессе вычислений. Это особенно удобно в тех случаях, когда искомая функция испытывает резкие изменения.

Распространен *четырёхточечный алгоритм Рунге-Кутты* и при рассмотрении уравнения 2-го порядка

$$y'' = f(x, y, y') \tag{6.7}$$

с начальным условием

$$y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y'_0. \tag{6.8}$$

При решении уравнения (6.7) сначала для каждой тройки текущих значений (x_n, y_n, y'_n) определяют четыре вспомогательных величины

$$\begin{aligned} R_1 &= hf(x_n, y_n, y'_n), \\ R_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_1, y'_n + \frac{1}{2}R_1\right), \\ R_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_2, y'_n + \frac{1}{2}R_2\right), \\ R_4 &= hf\left(x_n + h, y_n + \frac{h}{2}y'_n + \frac{h}{8}R_3, y'_n + R_3\right), \end{aligned} \tag{6.9, a}$$

после чего находят

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h \left[y'_n + \frac{1}{6} (R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4) \right], \\ y'_{n+1} &= y'_n + \frac{1}{6} (R_1 + 2R_2 + 2R_3 + R_4). \end{aligned} \tag{6.9, b}$$

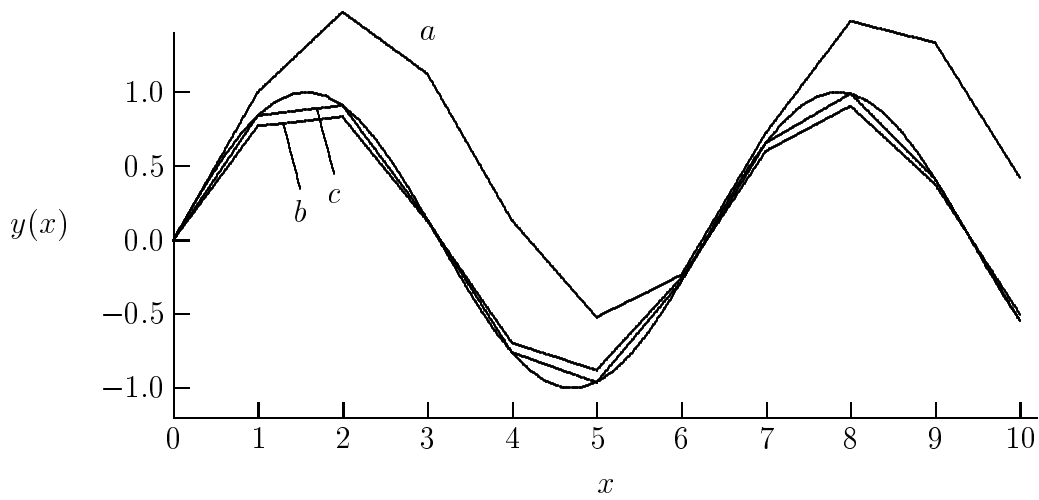


Рисунок 6.4 — К решению дифференциального уравнения $y' = \cos(x)$, с начальным условием $y(x_0) = 0, 0 \leq x \leq 10$, $h = 1$. Плавная кривая — аналитическое решение $y(x) = \sin(x)$; $a - y_E(x)$, метод Эйлера; $b - y_{EC}(x)$, модифицированный метод Эйлера-Коши; $c -$ решение $y_{RK}(x)$ по методу Рунге-Кутты (практически совпадает в узлах с идеальной кривой)

Погрешность R этого варианта метода Рунге-Кутты зависит от величины шага h также как $O(h^5)$.

В практике численного анализа метод Рунге-Кутты получил широкое распространение благодаря своей относительной простоте и высокой точности.

Пример

Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$y' = \cos(x), \quad y(x_0) = 0, 0$$

на интервале $0 \leq x \leq 10$.

Требуется найти его численное решение с использованием описанных трех алгоритмов: — метода Эйлера, модифицированного метода Эйлера-Коши и метода Рунге-Кутты.

Решение

Аналитическое решение этого уравнения легко получить, это функция $y(x) = \sin(x)$.

С целью сравнения работы методов выберем на интервале решения относительно небольшое число узлов $N = 10$, тогда шаг интегрирования составит $h = 1$.

При выполнении численных расчетов используем алгоритмы, отвечающие формулам: (6.4) — метод Эйлера, (6.5) — модифицированный метод Эйлера-Коши, (6.6) — метод Рунге-Кутты.

На рис. 6.4 приведены графические зависимости для аналитического решения $y(x)$ и трех численных:

$y_E(x)$ — метод Эйлера,

$y_{EC}(x)$ — модифицированный метод Эйлера-Коши.

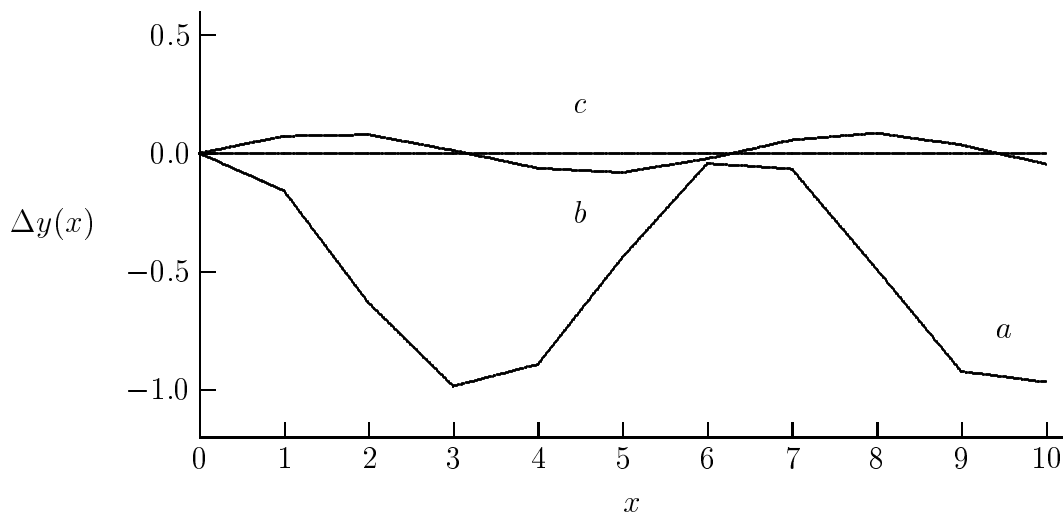


Рисунок 6.5 — Погрешности $\Delta y(x)$ численных решений дифференциального уравнения $y' = \cos(x)$ с начальным условием $y(x_0) = 0, 0 \leq x \leq 10, h = 1$; $a - y_E(x)$, метод Эйлера; $b - y_{EC}(x)$, модифицированный метод Эйлера-Коши; $c - y_{RK}(x)$, метод Рунге-Кутты

При этом решение $y_{RG}(x)$ по методу Рунге-Кутты практически совпало с ходом на графике идеальной кривой $y(x) = \sin(x)$.

Значения погрешностей $\Delta y(x)$ решений дифференциального уравнения, возникших в ходе использования интегрирующего алгоритма, приведены в табл. 6.1. Эти же значения погрешностей можно видеть на рис. 6.5.

Полученные численные данные указывают на относительно большую эффективность использования алгоритма Рунге-Кутты.

6.5. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений с автоматическим изменением шага

Если решение дифференциального уравнения (6.2) с условием (6.3) требуется получить с высокой точностью, то используют алгоритмы с автоматическим изменением шага интегрирования. При высокой точности и решении в виде кривых с сильно различающейся крутизной автоматическое изменение шага обеспечивает уменьшение общего числа шагов, резко уменьшает возможность возникновения числовой неустойчивости, дает более равномерное расположение точек на кривой.

Метод Рунге-Кутты с автоматическим изменением шага заключается в том, что после получения значения y_{n+1} с начальным шагом h все вычисления выполняются повторно с шагом $h/2$. Полученный результат y_{n+1}^* сравнивается с предыдущим y_{n+1} . Если $|y_{n+1}^* - y_{n+1}| < \varepsilon$, где ε — допустимая погрешность, вычисления продолжают с шагом h , в противном случае величину шага уменьшают. Если указанное неравенство слишком сильное, величину шага увеличивают.

Метод Рунге-Кутты-Мерсона с автоматическим изменением шага обеспечивает приближенную оценку погрешности на каждом шаге интегрирования. Погрешность

Таблица 6.1 — Погрешности решений дифференциального уравнения

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

интегрирования имеет порядок $O(h^5)$.

Этот метод реализуется следующим алгоритмом:

1. Задают уравнение $y' = f(x, y)$, начальное условие $y(x_0) = y_0$, допустимую погрешность ε и начальный шаг интегрирования h .

2. Вычисляют вспомогательные коэффициенты:

$$\begin{aligned}
 K_0 &= hf(x_n, y_n); \\
 K_1 &= hf\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{1}{3}K_0\right); \\
 K_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{1}{6}K_0 + \frac{1}{6}K_1\right); \\
 K_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{8}K_0 + \frac{3}{8}K_2\right); \\
 K_4 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}K_0 - \frac{3}{2}K_2 + 2K_3\right).
 \end{aligned} \tag{6.10, a}$$

3. Находят приращение

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (K_0 + 4K_3 + K_4) \tag{6.10, b}$$

и погрешность

$$R_{n+1} = \frac{1}{30} (-2K_0 + 9K_2 - 8K_3 + 4K_4). \tag{6.10, c}$$

4. Проверяют выполнение условий

$$|R_{n+1}| \leq \varepsilon, \quad |R_{n+1}| \geq \varepsilon/30. \tag{6.10, d}$$

Если первое условие (6.10d) не выполняется, делят шаг h на 2 и повторяют вычисления с п. 2, восстановив начальные значения y_n . Если оба условия (6.10d) выполняются, значение y_{n+1} выводится на печать. Если второе условие (6.10d) не выполняется, шаг h увеличивают вдвое и вычисления опять повторяются с п.2.

Метод Рунге-Кутты-Фельберга с автоматическим изменением шага дает более точную оценку погрешности на каждом шаге численного интегрирования и реализуется последовательным вычислением по следующим формулам.

1. Вычисляют вспомогательные коэффициенты:

$$\begin{aligned}
 K_0 &= hf(x_n, y_n); \\
 K_1 &= hf\left(x_n + \frac{2}{9}h, y_n + \frac{2}{9}K_0\right); \\
 K_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{12}K_0 + \frac{1}{4}K_1\right); \\
 K_3 &= hf\left(x_n + \frac{3}{4}h, y_n + \frac{69}{128}K_0 - \frac{143}{128}K_1 + \frac{135}{64}K_2\right); \\
 K_4 &= hf\left(x_n + h, y_n - \frac{17}{12}K_0 + \frac{27}{4}K_1 - \frac{27}{5}K_2 + \frac{16}{15}K_3\right); \\
 K_5 &= hf\left(x_n + \frac{5}{6}h, y_n + \frac{65}{432}K_0 - \frac{5}{16}K_1 + \frac{13}{16}K_2 + \frac{4}{27}K_3 + \frac{5}{144}K_4\right).
 \end{aligned} \tag{6.11, a}$$

2. Находят приращение

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{9}K_0 + \frac{9}{20}K_2 + \frac{16}{45}K_3 + \frac{1}{12}K_4 \tag{6.11, b}$$

и погрешность

$$R_{n+1} = \frac{1}{150}K_0 - \frac{3}{300}K_2 + \frac{16}{75}K_3 + \frac{1}{20}K_4 - \frac{6}{25}K_5. \tag{6.11, c}$$

Если $|R_{n+1}| > \varepsilon$, шаг h уменьшается вдвое. Если $|R_{n+1}| < \varepsilon/20$, шаг h увеличивается вдвое. Этот метод имеет погрешность интегрирования порядка $O(h^5)$.

6.6. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Пусть заданы: $Y = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_M(x))$ – набор из M функций, зависящих от аргумента x , и $F = (f_1, f_2, \dots, f_M)$ – набор из M функций, зависящих от x и Y каждая.

Рассмотрим следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$Y'(x) = F(x, Y) \tag{6.12}$$

с начальным условием $Y(x_0) = Y_0$.

Методы нахождения решения системы дифференциальных уравнений строятся аналогично тому, как это делалось в скалярном случае, но с учетом размерности M рассматриваемой системы. Ниже рассмотрим случай $M = 2$, когда система образована двумя уравнениями относительно функций $y(x)$ и $z(x)$ с функциями $f(x, y, z)$ и $g(x, y, z)$ в правой части уравнений:

$$\begin{aligned}
 y'(x) &= f(x, y, z), & y(x_0) &= y_0, \\
 z'(x) &= g(x, y, z), & z(x_0) &= z_0.
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

А. Итерационный алгоритм по методу Эйлера

На очередном n -ом шаге вычисляются следующие величины:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n, z_n), \\z_{n+1} &= z_n + hg(x_n, y_n, z_n).\end{aligned}\tag{6.14}$$

Б. Итерационный алгоритм по методу Эйлера-Коши

Сначала на n -ом шаге вычисляются следующие вспомогательные величины:

$$\begin{aligned}y_n^* &= y_n + hf(x_n, y_n, z_n), \\z_n^* &= z_n + hg(x_n, y_n, z_n),\end{aligned}\tag{6.15, a}$$

после чего находятся значения y_{n+1} и z_{n+1} на следующем $(n + 1)$ -ом шаге:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + (h/2)[f(x_n, y_n, z_n) + f(x_n, y_n^*, z_n^*)], \\z_{n+1} &= z_n + (h/2)[g(x_n, y_n, z_n) + g(x_n, y_n^*, z_n^*)].\end{aligned}\tag{6.15, b}$$

В. Итерационный алгоритм по методу Рунге-Кутты

Сначала на n -ом шаге вычисляются следующие вспомогательные величины:

$$\begin{aligned}r_1 &= hf(x_n, y_n, z_n), & q_1 &= hg(x_n, y_n, z_n), \\r_2 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_1, z_n + \frac{1}{2}q_1), & q_2 &= hg(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_1, z_n + \frac{1}{2}q_1), \\r_3 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_2, z_n + \frac{1}{2}q_2), & q_3 &= hg(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}r_2, z_n + \frac{1}{2}q_2), \\r_4 &= hf(x_n + h, y_n + r_3, z_n + q_3), & q_4 &= hg(x_n + h, y_n + r_3, z_n + q_3),\end{aligned}\tag{6.16, a}$$

далее находятся значения функций y и z на следующем $(n + 1)$ -ом шаге:

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + (r_1 + 2r_2 + 2r_3 + r_4) / 6, \\z_{n+1} &= z_n + (q_1 + 2q_2 + 2q_3 + q_4) / 6.\end{aligned}\tag{6.16, b}$$

Аналогично строятся алгоритмы для решения систем дифференциальных уравнений, содержащих три и более искомых функций.

В перечисленных методах затруднительно осуществить прямой контроль качества вычислений, поскольку искомая функция $y(x)$ не является известной. Поэтому применяют косвенный контроль точности численного интегрирования дифференциального уравнения путем сравнения во всех аргументных точках результатов счета, полученных при значениях шага h и $h/2$. При этом величина шага выбирается такой, чтобы погрешность не превышала допустимой величины, в противном случае шаг уменьшают.

Во всех случаях рабочий алгоритм *проверяют на тестовом примере*. Он выбирается таким, чтобы обеспечить возможность передать основные свойства исследуемой функции. Для него должно иметься аналитическое решение и возможность полного контроля. Полезным является применение *инвариантов задачи*, т.е. величин, значения которых остаются неизменными на интервале решения.

Пример

Рассмотрим на интервале $(0 \leq t \leq 30)$ дифференциальное уравнение второго порядка, описывающее временную эволюцию затухающего осциллятора

$$\frac{d^2}{dt^2} \eta(t) + 2\beta \frac{d}{dt} \eta(t) + \omega^2 \eta(t) = 0$$

с начальными условиями

$$\eta(0) = 0, \quad \eta'(0) = 1.$$

Для параметров – декремента β и частоты колебаний ω выберем значения $\beta = 0,2$ и $\omega = 1,0$.

Аналитическое решение рассматриваемого уравнения следующее

$$\eta(t) = \frac{1}{\sqrt{\omega^2 - \beta^2}} \exp(-\beta t) \sin(\sqrt{\omega^2 - \beta^2} t).$$

Для численного решения уравнения эволюции осциллятора воспользуемся алгоритмом (6.16). Введем обозначения:

$$y(t) = \eta(t), \quad z(t) = \eta'(t),$$

при этом $y(0) = 0, z(0) = 1$.

В новых обозначениях запишем систему из двух уравнений

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = z(t), \\ \frac{d}{dt} z(t) = -2\beta z(t) - \omega^2 y(t). \end{cases}$$

Разобьем аргументный интервал $[0, 30]$ на $N = 300$ шагов размером $h = 0,1$ каждый. Пользуясь алгоритмом (6.16), построим вычислительную процедуру.

В рассматриваемой задаче не удастся построить временной инвариант. Однако обобщенная энергия колебаний осциллятора $W(t) = (z(t) + \beta y(t))^2 + \Omega^2 y^2(t)$ испытывает экспоненциальное затухание, поэтому должна быть неизменной величина $E = [(z(t) + \beta y(t))^2 + \Omega^2 y^2(t)] \exp(2\beta t)$. Из начальных условий имеем $E(t = 0) = (z(0) + \beta y(0))^2 + \Omega^2 y^2(0) = 1$. В результате расчетов получим $E(t = 30) = 0.9999958$, что при выбранной величине шага интегрирования $h = 0,1$ является вполне удовлетворительным.

Результаты вычислений представлены на рис. 6.6, 6.7 и 6.8.

6.7. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений второго и высших порядков

При построении численных алгоритмов решения дифференциальных уравнений, в которых имеются вторые или более высокие производные искомой функции, используется *метод понижения порядка дифференцирования*.

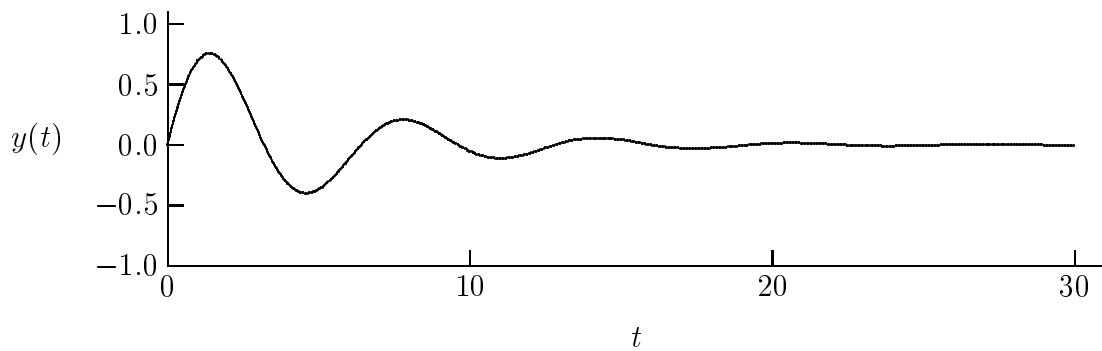


Рисунок 6.6 — Затухающий осциллятор. Зависимость $y(t)$

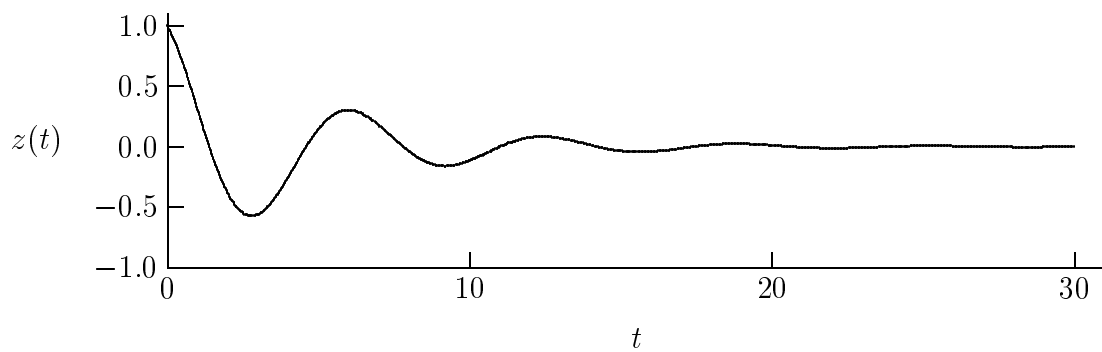


Рисунок 6.7 — Затухающий осциллятор. Зависимость $z(t)$

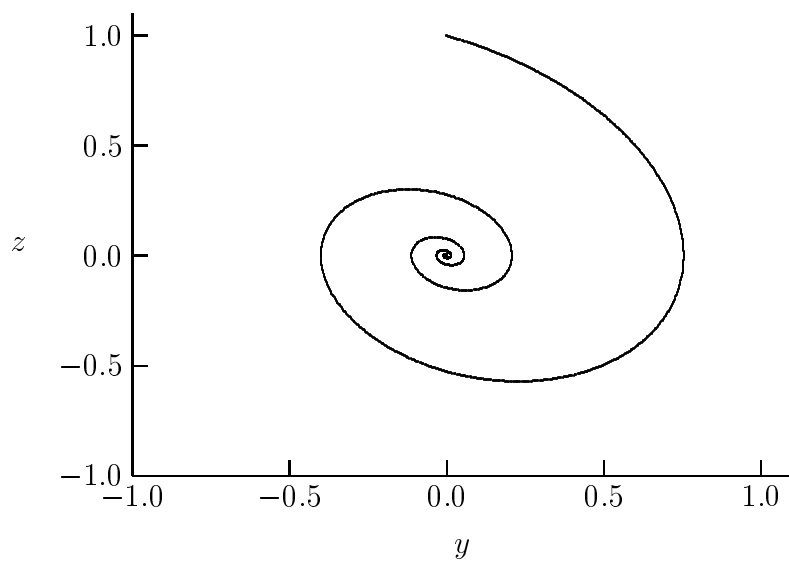


Рисунок 6.8 — Фазовый портрет параметрических зависимостей $y(t)$ и $z(t)$ затухающего осциллятора

Рассмотрим этот метод на примере, когда в дифференциальном уравнении старшей производной является производная второго порядка

$$y'' = f(x, y, y') \quad (6.17)$$

с начальными условиями $y(x_0) = y_0$ и $y'(x_0) = y'_0$.

Введем переменную $z = z(x)$ такую, что $y' = z$. Тогда уравнению (6.17) будет эквивалентна следующая система дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} y'(x) = g(x, y, z), & y(x_0) = y_0, \\ z'(x) = f(x, y, z), & z(x_0) = z_0, \end{cases} \quad (6.18)$$

в которой $g(x, y, z) = z$. Эта система образована уже из двух уравнений первого порядка каждое. Число возникших уравнений совпадает с порядком исходного дифференциального уравнения.

Аналогично можно преобразовать и дифференциальное уравнение заданного порядка M вида $y^{(M)} = f(y, y', y'', \dots, y^{(M-1)})$ с M начальными условиями. Помимо имеющейся функции y вводят еще комплект из $(M - 1)$ функций z_1, z_2, \dots, z_{M-1} , таких что $y' = z_1, z'_1 = z_2, \dots, z'_{M-2} = z_{M-1}$. Тогда вместе с исходным уравнением получают систему уравнений первого порядка

$$\begin{cases} y'(x) = z_1, \\ z'_1(x) = z_2, \\ z'_2(x) = z_3, \\ \dots \dots \dots \\ z'_{M-2}(x) = z_{M-1}, \\ z'_{M-1}(x) = f(x, y, z_1, z_2, \dots, z_{M-1}), \end{cases} \quad (6.19)$$

при этом начальные условия к введенным функциям z_1, z_2, \dots, z_{M-1} должны соответствовать данным начальным условиям к производным исходной функции $y(x)$.

Если теперь ввести M -компонентную вектор-функцию

$$Y = (y, z_1, z_2, \dots, z_{M-1}) \quad (6.20)$$

и обозначить через вектор-функцию $F(x, Y)$ выражения, расположенные в правых частях системы (6.19), то можно записать

$$Y' = F(x, Y). \quad (6.21)$$

Эту систему вместе с начальными условиями к ней уже можно решать численными методами, описанными выше, если в алгоритмах (6.4), (6.5), (6.6) везде заменить $y(x)$ и $f(x, y)$ на $Y(x)$ и $F(x, Y)$ соответственно.

Пример

Рассмотрим на интервале $(0 \leq t \leq 40)$ систему из двух дифференциальных уравнений второго порядка каждое, используемую в теории поля,

$$\begin{cases} d^2 y(t)/dt^2 = -y(t) z^2(t), \\ d^2 z(t)/dt^2 = -2y^2(t) z(t) - z^3(t) \end{cases}$$

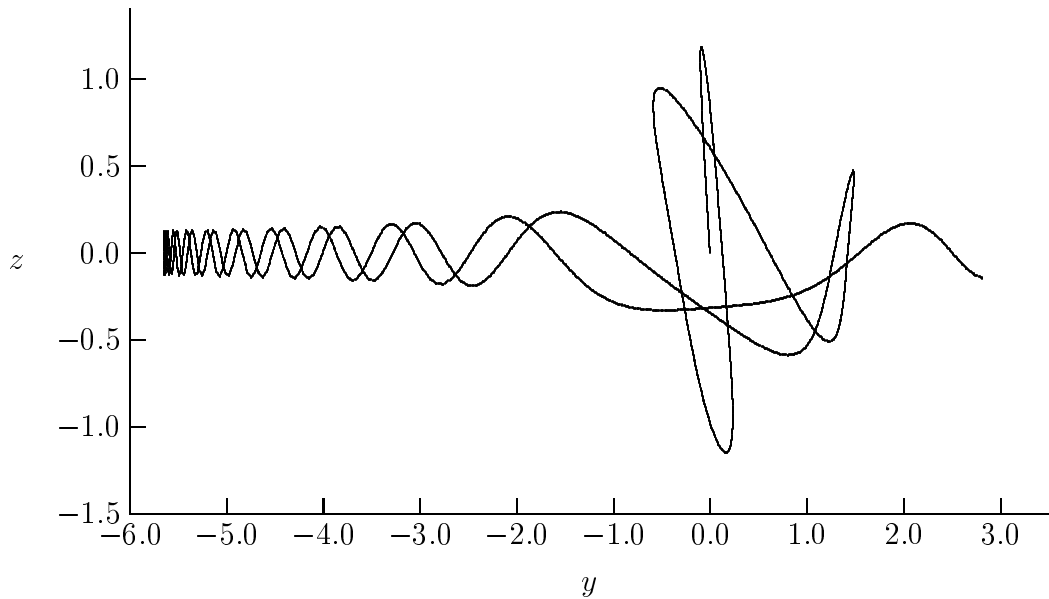


Рисунок 6.9 — Фазовый портрет компонент $y(t)$ и $z(t)$ системы; аргументный интервал $0 \leq t \leq 40$, шаг интегрирования $h = 2,5 \cdot 10^{-4}$; начальные значения: $y_0 = 0$, $z_0 = 0$, $y'_0 = -0,1$, $z'_0 = 1,0$

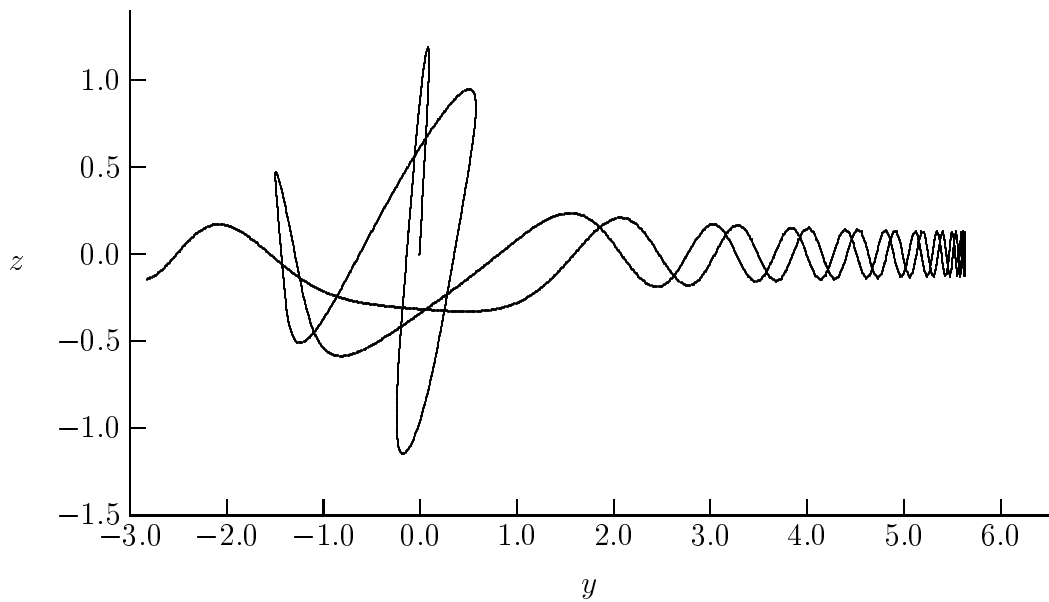


Рисунок 6.10 — Фазовый портрет компонент $y(t)$ и $z(t)$ системы; аргументный интервал $0 \leq t \leq 40$, шаг интегрирования $h = 2,5 \cdot 10^{-4}$; начальные значения: $y_0 = 0$, $z_0 = 0$, $y'_0 = 0,1$, $z'_0 = 1,0$

с начальными условиями

$$y_0 = 0, 0, \quad z_0 = 0, 0, \quad z'_0 = 1, 0,$$

а начальное условие y'_0 зададим ниже.

Для численного решения этой системы уравнений воспользуемся алгоритмом (6.19). Введем обозначения:

$$y_1(t) = y(t), \quad y_2(t) = \frac{d}{dt} y(t), \quad y_3(t) = z(t), \quad y_4(t) = \frac{d}{dt} z(t).$$

В новых обозначениях запишем систему из четырех уравнений

$$\begin{cases} dy_1(t)/dt = y_2(t), \\ dy_2(t)/dt = -y_1(t)y_3^2(t), \\ dy_3(t)/dt = y_4(t), \\ dy_4(t)/dt = -2y_1^2(t)y_3(t) - y_3^3(t) \end{cases}$$

с начальными условиями

$$y_1(0) = y_0 = 0, 0, \quad y_2(0) = y'_0, \quad y_3(0) = z_0 = 0, 0, \quad y_4(0) = z'_0 = 1, 0.$$

Разобьем аргументный интервал $[0, 40]$ на $N = 160000$ шагов и выберем при этом величину шага равной $h = 40/160000 = 2,5 \cdot 10^{-4}$. Воспользуемся алгоритмом (6.19), в котором число уравнений составляет $M = 4$. Теперь построим вычислительную процедуру.

В рассматриваемой задаче удастся построить временной инвариант

$$W = \frac{1}{2} (y_2^2 + y_4^2) + y_1^2 y_3^2 + \frac{1}{2} y_3^4,$$

значение которого необходимо использовать для контроля. Из начальных условий имеем

$$W = \frac{1}{2} (y'^2(t) + z'^2(t)) = \frac{1}{2} (y_0'^2 + z_0'^2).$$

Результаты вычислений представлены на рис. 6.9 для случая $y'_0 = -0,1$ и на рис. 6.10 для случая $y'_0 = 0,1$. Из этих рисунков видно, что относительно небольшое изменения одного начального условия в системе приводит к заметному изменению вида решения в целом. Численные эффекты подобного рода принято называть *неустойчивостью по Адамару*.

6.8. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на четыре часа и содержит два задания

З а д а н и е 1

Напишите программу численного интегрирования обыкновенного дифференциального уравнения с начальным условием

$$y' = f(x, y), \quad y_0 = y(x_0),$$

на одном из алгоритмических языков.

Программа должна содержать три алгоритма нахождения решения, основанных на формуле метода Эйлера (6.4), модифицированной формуле Эйлера (6.5) и формуле метода Рунге-Кутты (6.6).

Исходные данные для программы :

a – начало аргументного отрезка нахождения решения, $x_0 = a$;

b – конец аргументного отрезка нахождения решения;

y_0 – начальное значение искомой функции, $y_0 = y(x_0)$;

$f(x, y)$ – функция, заданная в правой части уравнения;

M – число шагов табулирования функции $y(x)$ на отрезке $[a, b]$.

Результат работы программы – массивы из M элементов, содержащие значения искомой функции $y(x)$ на отрезке $[a, b]$ и решения дифференциального уравнения, найденного аналитически (с возможностью их сравнения).

Варианты

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 д а н и е 2

Напишите программу численного интегрирования системы из двух обыкновенных дифференциальных уравнений

$$Y' = F(x, Y); \quad Y_0 = Y(x_0)$$

на одном из алгоритмических языков.

Программа должна содержать два алгоритма нахождения решения, основанных на формулах метода Эйлера (6.4), (6.5) и формулах метода Рунге-Кутты (6.6).

Исходные данные для программы :

a – начало аргументного отрезка нахождения решения, $x_0 = a$;
 b – конец аргументного отрезка нахождения решения;
 Y_0 – вектор начальных значений искомых функций, $Y_0 = Y(x_0)$;
 $F(x, Y)$ – векторная функция, заданная в правой части системы дифференциальных уравнений;

M – число шагов табулирования набора искомых функций на отрезке интегрирования $[a, b]$.

Результат работы программы – массивы из M элементов, содержащие значения набора искомых функций $Y(x)$ на отрезке $[a, b]$ (с возможностью их сравнения).

Варианты

а) $a = 0,0$; $b = 1,0$; $M = 21$,

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 1,0, \\ z' = 1 - y + \exp(x), & z_0 = 1,0; \end{cases}$$

б) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $M = 21$,

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 2,0, \\ z' = (y/x - 2,5z)/x, & z_0 = 3,5; \end{cases}$$

в) $a = 0,0$; $b = 1,0$; $M = 21$,

$$\begin{cases} y' = z, & y_0 = 1,0, \\ z' = 2 - x + x^2 - y, & z_0 = 0,0; \end{cases}$$

г) $a = 0,0$; $b = \pi$, $M = 21$,

$$\begin{cases} y' = z + x + 1 + \sin(x), & y_0 = 0,1, \\ z' = x - y + 1 + \sin(x), & z_0 = 0,1; \end{cases}$$

д) $a = 0,0$; $b = \pi$; $M = 21$,

$$\begin{cases} y' = z + \sin(x) + \cos(x), & y_0 = 1,0, \\ z' = -y + \sin(x) - \cos(x), & z_0 = 0,0. \end{cases}$$

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать:

- 1) содержание задания;
- 2) использованные формулы;
- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу исходных данных в узлах и таблицу значений функции при заданных значениях аргумента;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

6.9. Задания для проверки

1. В чем суть методов численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений?
2. Проведите сравнение методов численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений по точности.
3. Проанализируйте работу алгоритмов нахождения решения обыкновенного дифференциального уравнения с начальными условиями в следующих случаях: а) постоянной правой части, $f(x, y) = \text{const}$, б) правой части, равной нулю.
4. Предложите и обоснуйте численные алгоритмы для нахождения решения обыкновенного дифференциального уравнения: а) второго порядка, б) третьего порядка.
5. Для случая обыкновенного дифференциального уравнения с начальным условием изучите зависимость достигнутой на конце аргументного интервала точности от величины шага интегрирования: в методе а) Эйлера, б) Эйлера-Коши, в) Рунге-Кутты.
Предложите схему численного эксперимента по изучению этой зависимости.
6. Составьте блок-схему алгоритма численного интегрирования дифференциального уравнения: по методу а) Эйлера, б) Эйлера-Коши, в) Рунге-Кутты.
7. Постройте обобщение алгоритма решения системы дифференциальных уравнений (6.6)–(6.7) для $M = 2$ на случай:
 - а) системы из трех дифференциальных уравнений;
 - б) системы из четырех дифференциальных уравнений.
8. Предложите вариант алгоритма решения обыкновенного дифференциального уравнения с переменной величиной шага. Укажите примеры задач, для решения которых полезен подобный алгоритм.
9. Рассмотрите "ухудшенный" вариант алгоритма решения обыкновенного дифференциального уравнения, в котором на каждом шаге вносится некоторая заданная помеха с известными свойствами. Предложите вариант алгоритма, позволяющий при поиске численного решения ослабить влияние помехи.
10. Постройте вариант модифицированного метода Эйлера-Коши, отличающийся от алгоритма (6.5).

7. Метод Монте-Карло

7.1. Основные теоретические положения

Численный метод решения вычислительных и имитационных задач, основанный на моделировании случайных величин или процессов и последующем построении статистических оценок для искомых величин, называется *методом Монте-Карло*, или *методом статистических испытаний*.

7.2. Построение метода Монте-Карло

Общую схему метода Монте-Карло можно рассмотреть на примере схемы построения оценки некоторого (в общем случае многократного) интеграла по области G с подинтегральной функцией $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$

$$I_K = \underbrace{\int \dots \int}_{K \text{ раз}} f(x_1, x_2, \dots, x_K) dP(x_1, x_2, \dots, x_K). \quad (7.1)$$

Рассмотрим следующее *выборочное (эмпирическое) среднее* от функции $f(x_1, x_2, \dots, x_K)$ (здесь значком-шляпкой "^\wedge" указывается, что речь идет о *выборочной оценке* \hat{Z} рассматриваемой величины Z)

$$\hat{f}_{\text{ср}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n)) \quad (7.2)$$

по выборке из N экземпляров реализаций $\{x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n); n = 1, \dots, N\}$ K -мерной случайной величины (x_1, x_2, \dots, x_K) с известной функцией распределения $P(x_1, x_2, \dots, x_K)$, характеризуемой дифференциалом

$$dP(x_1, x_2, \dots, x_K) = p(x_1, x_2, \dots, x_K) dx_1 dx_2 \dots dx_K. \quad (7.3)$$

Количество реализаций N называется *объемом выборки*, а последовательность $\{f(x_1(n), x_2(n), \dots, x_K(n)); n = 1, 2, \dots, N\}$ образует *выборочную совокупность*.

Обозначим через X векторный K -мерный аргумент $X = (x_1, x_2, \dots, x_K)$ и через G произвольную (заданную) область интегрирования $X \in G$. Тогда в компактной форме записи формула (7.1) определяет многократный интеграл по этой области

$$I_K = \underbrace{\int \dots \int}_{K \text{ раз}} f(X) p(X) d^K X \quad (7.4)$$

от подинтегральной функции $f(X)$ с некоторой весовой функцией $p(X)$.

Общая схема метода Монте-Карло при этом указывает способ вычисления такого рода интегралов (7.4) при помощи нахождения выборочного (эмпирического) среднего

$$\hat{f}_{\text{cp}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n) \quad (7.5)$$

функции $f(X)$ по её N выборочным значениям.

В основе вычисления оценки интеграла (7.4) по выборочным средним (7.5) лежит простое приближение

$$\hat{I}_K = \hat{f}_{\text{cp}} V_K, \quad (7.6)$$

где V_K – область интегрирования в пространстве размерностью K , $X \in G$, а значение \hat{f}_{cp} вычисляется по формуле (7.5) для N случайных значений векторного аргумента $\{X_n\}$, $n = 1, \dots, N$, представляющих собой выборку случайной величины (вектора X) с плотностью распределения вероятностей $p(X)$, которая определяется весовой функцией в интеграле (7.4). При этом предполагается, что подинтегральная функция непрерывна в области интегрирования, а весовая функция $p(X)$ обладает свойствами плотности распределения вероятностей некоторой случайной величины X , т.е.

$$p(X) \geq 0, \quad \forall X \in G, \quad \underbrace{\int \dots \int}_{K \text{ раз}} p(X) d^K X = 1. \quad (7.7)$$

Соотношения (7.5), (7.6) составляют вычислительную схему метода Монте-Карло.

Для практической реализации метода Монте-Карло прежде всего требуется *датчик случайных чисел*, с помощью которого можно получать выборки $\{X_n\}$, $n = 1, \dots, N$ случайных чисел (векторов) X , распределенных в соответствии с (7.7).

Моделирование случайных величин с заданным распределением $p(X)$, как правило, осуществляется преобразованием одного или нескольких независимых значений стандартной случайной величины, распределенной в интервале $[0; 1]$. Значения такой случайной величины получают программными средствами.

Следующий этап реализации метода Монте-Карло заключается в вычислении эмпирического среднего подинтегральной функции \hat{f}_{cp} по формуле (7.5).

Наконец, использование соотношения (7.6) позволяет по вычисленному значению \hat{f}_{cp} оценить весь интеграл (7.4).

Оценка \hat{I}_K значения интеграла I_K в силу своей природы является случайной величиной.

Если независимо повторить процедуру нахождения оценки \hat{I}_K интеграла, будет получено новое её значение – также случайное.

Однако с увеличением объема выборки N эти случайные величины группируются около своего идеального значения I_K , при этом относительный разброс оценок \hat{I}_K около I_K уменьшается.

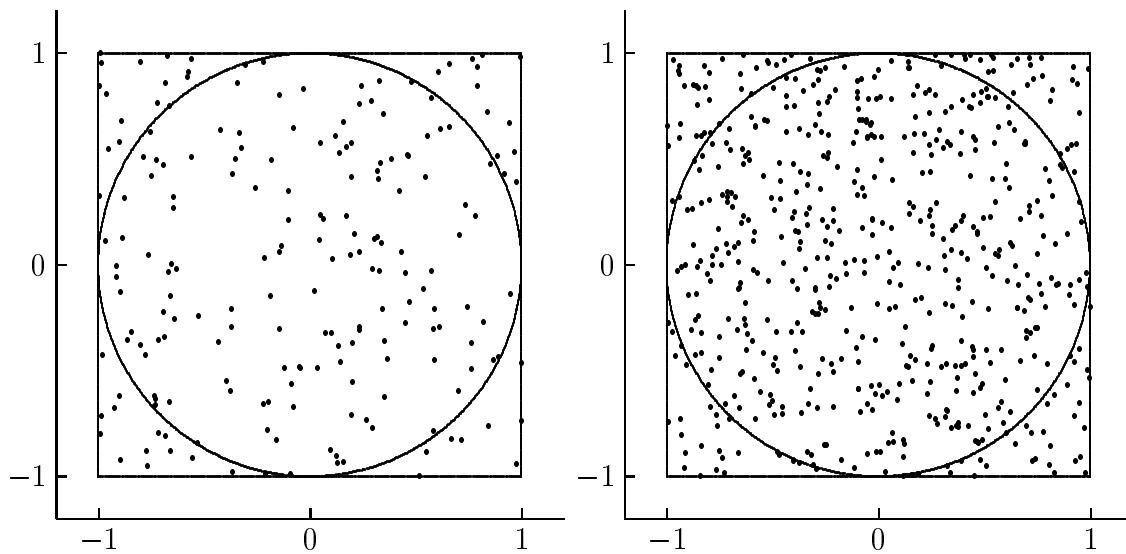


Рисунок 7.1 — К оценке $\hat{\pi}$ числа π ; N — объем выборки; слева $N = 200$; справа $N = 600$

Погрешность $\delta(\hat{I}_K)$ оценки \hat{I}_K значения интеграла I_K методом Монте-Карло обратно пропорциональна корню квадратному из числа случайных испытаний N

$$\delta(\hat{I}_K) \approx \frac{const}{\sqrt{N}} \quad (7.8)$$

с некоторой постоянной $const$ и слабо связана с кратностью интеграла K . Именно поэтому применение метода целесообразно для вычисления интегралов высокой кратности ($K = 2, 3, \dots$).

Особенно эффективно применение метода Монте-Карло в тех случаях, когда подинтегральное выражение достаточно сложно или имеет причудливую форму. Часто применяют этот метод в задачах оценки площадей плоских фигур и объемов пространственных тел.

Распространено использование метода Монте-Карло при моделировании временной динамики сложных производственных и финансовых систем, при расчете пропускных способностей линий связи, во многих научных и технических задачах.

7.3. Построение квадратурного алгоритма на примере задачи оценки числа π

Рассмотрим задачу оценки значения числа π . Величину этой константы мы хорошо знаем, это 3,141593... Для получения требуемой оценки применим следующий подход, в рамках которого используем встроенную функцию среды Паскаля *Random*.

Представим, что в квадрат со стороной 2 (т.е. площадью, равной 4) вписан круг единичного радиуса. Тогда его площадь равна искомому значению π . Пусть мы наугад бросили точку в квадрат. Попад в квадрат, эта точка может попасть или не попасть в круг (рис. 7.1).

Зададимся целым числом N – количеством наших попыток – *объемом выборки*. Из N брошенных наугад точек какая-то их часть окажется в круге. Пусть число этих точек (*число благоприятных исходов*) окажется равным L .

Геометрически ясно, что при очень большом объеме выборки (в пределе – при бесконечном) отношение L/N приближается к искомой величине π . Такого рода утверждения обосновываются в теории вероятностей. Мы рассмотрим поэтому численный эксперимент, с помощью которого изучим эффективность подобного рода опытов (рис. 7.1).

7.4. Применение случайных величин при построении квадратурных алгоритмов

Вычислительная схема метода Монте-Карло предполагает возможность генерации случайных значений.

Для получения очередной случайной точки в квадрате дважды обратимся к встроенной функции *RANDOM*, возвращающей значение *Random* случайной величины, равномерно распределенной в интервале $[0; 1]$.

С помощью преобразований $X = -1 + 2 * Random$; $Y = -1 + 2 * Random$ мы получим точку с координатами (X, Y) , равномерно распределенную в квадрате, имеющем левую нижнюю вершину в точке $(-1; -1)$ и правую верхнюю вершину в точке $[1; 1]$. В нашем примере площадь S_{maj} такого квадрата равна $(2R)^2 = 4$ (эту величину принято называть *мажорантой*, поскольку квадрат включает искомый круг). Площадь S круга равна $S = \pi R^2 = \pi$, поскольку $R = 1$.

Итак, мы готовы перейти к построению алгоритма и созданию программы получения оценки $\hat{\pi}$ числа π . Центральный вопрос, который имеет важное практическое значение, это вопрос о требуемом ресурсе (т.е. о величине объема выборки N) для получения оценки $\hat{\pi}$ величины числа π с заданной точностью. Поэтому предусмотрим в программе цикл по возрастающим значениям N , а именно $N = 2^m$, где m – текущий номер. Таким образом, каждый раз объем выборки N при каждом эксперименте будем удваивать.

В табл. 7.1 приведен пример результатов расчета искомой оценки по методу статистических испытаний.

Из табл. 7.1 видно, что *случайные значения текущей оценки $\hat{\pi}$* по мере увеличения объема выборки все точнее приближаются к величине π . Так, для $N = 2^{14} = 16384$ оценка площади составила $\hat{S} = 3,145264$; таким образом, $\lg |\hat{\pi} - \pi| = -2,435213$ и $|\hat{\pi} - \pi| = 0,003671$.

Общая тенденция указывает на улучшение качества оценки с ростом N , скорость сходимости её к точному значению, однако, невелика.

А именно, из центральной предельной теоремы теории вероятностей следует, что в среднем для уменьшения погрешности оценки $|\hat{\pi} - \pi|$ в K раз необходимо увеличить объем статистических испытаний N в K^2 раз.

Таким образом, метод Монте-Карло требует значительных временных ресурсов.

Таблица 7.1 — Зависимость оценки $\hat{\pi}$ числа π от объема выборки N

Объем N	$\log_2 N$	Оценка площади \hat{S}	Погрешность $ \hat{\pi} - \pi $	$\lg \hat{\pi} - \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

7.5. Распределения случайных величин

При вычислении интегралов общего вида (7.4) методом Монте-Карло возникает потребность генерирования непрерывных случайных чисел с заданным законом распределения $p(x)$.

Для простоты ограничимся рассмотрением одномерных ($K = 1$) плотностей распределений $p(x)$, наиболее распространенных на практике.

Таковыми распределениями являются следующие :

равномерное распределение

$$p(x) = 1/(b - a), \quad a \leq x \leq b; \quad (7.9)$$

нормальное распределение Гаусса

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - m)^2}{2\sigma^2}\right), \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.10)$$

экспоненциальное распределение

$$p(x) = \lambda \exp(-\lambda x), \quad 0 \leq x < \infty; \quad (7.11)$$

распределение Коши

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\nu}{\nu^2 + x^2}, \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.12)$$

гамма-распределение

$$p(x) = \frac{\beta^\alpha x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \exp(-\beta x), \quad 0 \leq x < \infty; \quad (7.13)$$

логарифмическое распределение

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma x} \exp\left(-\frac{\ln^2 x}{2\sigma^2}\right), \quad 0 < x < \infty; \quad (7.14)$$

распределение Стьюдента

$$p(x) = \frac{\Gamma[(n+1)/2]}{\sqrt{\pi n} \Gamma(n/2)} (1+x^2/n)^{-(n+1)/2}, \quad -\infty < x < \infty; \quad (7.15)$$

закон арксинуса

$$p(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{a^2-x^2}}, \quad -a < x < a. \quad (7.16)$$

Многочисленные аналогичные примеры распределений известны и для многомерных случайных величин.

Наиболее распространенными в практических вычислительных задачах являются равномерное (7.9) и нормальное (7.10) распределения.

7.6. Равномерно распределенные случайные числа

Равномерно распределенные случайные числа обычно генерируются средствами компьютера на отрезке значений $[0; 1]$, причем любое значение q_n в этом интервале равновероятно. Датчик последовательности чисел с такими свойствами называется *стандартным датчиком*.

В распространенных алгоритмах, на которых основаны стандартные датчики, используется отделение дробной части от сложного арифметического выражения, содержащего предшествующее число q_n .

В простейшем случае для получения последовательности из N равномерно распределенных на интервале $[0; 1]$ случайных величин $\{q_n\}$ используется рекуррентное выражение

$$Y_n = (\alpha Y_{n-1} + \beta) \bmod P, \quad q_n = Y_n / P, \quad (7.17)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$; α и β – константы; P – большое положительное число, кратное степени 2. Операция \bmod возвращает значение Y_n , если $Y_n \leq P$, и присваивает $Y_n = Y_n - P$, если $Y_n > P$.

При соответствующем выборе констант α и β и начального ($n = 0$) значения последовательности Y_0 с помощью указанного выражения можно получить последовательность равномерно распределенных в интервале $[0; P]$ случайных целых чисел. Последовательность случайных чисел в интервале $[0; 1]$ получают делением на величину P .

Обычно перед использованием датчика случайных чисел задается начальное значение Y_0 . Задание разных Y_0 позволяет формировать различные последовательности случайных чисел.

В действительности получают "псевдослучайные" числа, т.е. спустя некоторое большое число циклов последовательность повторяется. (В среде программирования Turbo Pascal вместо того, чтобы задавать в начале работы стартовое значение

Y_0 , используется команда `Randomize`, при этом в качестве стандартного применяется датчик `Random`).

Перевод равномерно распределенных на отрезке $[0; 1]$ случайных чисел q_n в случайные числа x_n , равномерно распределенные на отрезке $[a, b]$, производится с помощью формулы

$$x_n = a + (b - a)q_n. \quad (7.18)$$

7.7. Нормально распределенные случайные числа

Нормально распределенные случайные числа могут формироваться различными методами.

На практике удобно использовать методы, основанные на преобразованиях стандартных равномерных последовательностей $\{q_n; n = 1, \dots, N\}$ с плотностью распределения

$$\begin{cases} p(q) = 1, & \text{если } 0 \leq q \leq 1, \\ p(q) = 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (7.19)$$

Из *закона больших чисел теории вероятностей* следует, что аддитивная случайная величина

$$Z = \alpha \sum_{l=1}^L q_l - \beta \quad (7.20)$$

при большом L будет характеризоваться приближенно нормальным распределением. При этом степень близости распределения вероятностей $p(x)$ к нормальной (7.10) будет тем выше, чем больше число L слагаемых в (7.20). Удобно потребовать, чтобы параметры нормальной плотности (7.10) равнялись $m = 0$ и $\sigma = 1$. Это приводит к следующему аддитивному алгоритму

$$Z = \sqrt{12/L} \sum_{l=1}^L (q_l - 0,5). \quad (7.21)$$

Хотя закон $p(x)$ будет лишь асимптотически (при $L \rightarrow \infty$) нормальным, на практике оказывается достаточным ограничиться сравнительно небольшим числом L равномерно распределенных случайных величин. Обычно выбирают $L = 12$, $L = 48$, $L = 108$. Это дает соответственно

$$Z = \sum_{l=1}^{12} \left(q_l - \frac{1}{2} \right); \quad (7.22, a)$$

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{48} \left(q_l - \frac{1}{2} \right); \quad (7.22, b)$$

$$Z = \frac{1}{3} \sum_{l=1}^{108} \left(q_l - \frac{1}{2} \right). \quad (7.22, c)$$

Описанный алгоритм (7.22) часто применяют при решении тех задач, в которых необходимо использовать случайные реализации величины Z , со значениями, локализованными около своего максимума в интервале $-3 < Z < 3$.

При фиксированных L периферийные значения (на "хвостах" распределения) не соответствуют нормальному закону распределения, при этом несоответствие проявляется тем сильнее, чем больше значение Z . В таких практических задачах, как рассмотрение проблемы риска или моделирование систем передачи сигналов, важным является учет именно периферийных значений с большими отклонениями, поэтому датчик (7.22) применять нельзя.

Другим практически распространенным методом получения нормальных случайных чисел с $m = 0$ и $\sigma = 1$ из стандартной равномерно распределенной последовательности $\{q_n; n = 1, \dots, N\}$ является метод, основанный на функциональных преобразованиях

$$\begin{cases} x = x_n = \sqrt{-2 \ln q_n} \cos(2\pi r_n), \\ y = y_n = \sqrt{-2 \ln q_n} \sin(2\pi r_n), \end{cases} \quad (7.23)$$

где q_n и r_n – два независимых датчика случайных равномерно распределенных последовательностей.

Преобразование, обратное к (7.23), имеет вид

$$\begin{cases} \xi = \xi_n = \exp[-(x^2 + y^2)/2], \\ \eta = \eta_n = \arctg(y/x). \end{cases} \quad (7.24)$$

Совместная плотность вероятностей случайных величин X, Y может быть определена путем вычисления якобиана преобразования

$$D = \det \begin{pmatrix} \partial\xi/\partial x & \partial\eta/\partial x \\ \partial\xi/\partial y & \partial\eta/\partial y \end{pmatrix},$$

что для преобразований (7.23), (7.24) дает

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right). \quad (7.25)$$

Из выражения (7.25) следует, что совместная плотность вероятностей $p(x, y)$ может быть выражена в виде произведения плотностей

$$p(x, y) = p(x) \times p(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right).$$

Каждая из этих плотностей отвечает стандартному нормальному распределению (7.10) с параметрами $m = 0$ и $\sigma = 1$, причем случайные величины X и Y при этом оказываются статистически независимыми.

Теперь для получения последовательности случайных чисел z_n с нормальным законом распределения (7.10) и произвольными параметрами m и σ достаточно выполнить линейное преобразование

$$z_n = \sigma x_n + m, \quad (7.26, a)$$

либо

$$z_n = \sigma y_n + m. \quad (7.26, b)$$

Алгоритм (7.23) часто используют в тех практических задачах, для решения которых важно правильно отобразить влияние случайного возмущения со свойствами нормальной величины на характеристики рассматриваемой системы.

7.8. Основные законы распределения и моделирование случайных величин

Кроме двух законов распределения (равномерного и нормального), о которых шла речь выше, в практическом численном анализе используются и многие другие. Рассмотрим способы генерации основных из них.

Примем, что в нашем распоряжении имеется стандартный датчик последовательности $\{\xi_n\}$, ($n = 1, 2, \dots$) значений случайной величины, равномерно распределенной на интервале $[0; 1]$.

Интервалы между соседними точками в пуассоновском потоке подчиняются *экспоненциальному распределению* (7.11) с параметром λ .

Алгоритм генерации значений $\{x_n\}$ случайной величины, имеющей экспоненциальное распределение, следующий:

$$x_n = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi_n. \quad (7.27)$$

Отношение двух нормальных случайных величин (с нулевыми математическими ожиданиями) подчиняется *распределению Коши* (7.12) с параметром ν .

Алгоритм генерации значений $\{x_n\}$ случайной величины, подчиняющейся этому распределению, следующий

$$x_n = \nu \operatorname{tg}(\pi \xi_n). \quad (7.28)$$

Сумма независимых случайных величин, каждая из которых распределена по экспоненциальному закону, подчиняется *гамма-распределению* (7.13) с параметрами β, n .

Алгоритм генерации значений $\{x_n\}$ случайной величины, подчиняющейся этому распределению, следующий:

$$x_n = -\beta \ln \left(\prod_{j=1}^n \xi_j \right). \quad (7.29)$$

Закон арксинуса (7.16) описывает распределение мгновенных значений синусоидального сигнала со случайной равновероятной фазой и амплитудой a .

Алгоритм генерации значений $\{x_n\}$ случайной величины, подчиняющейся этому закону, следующий:

$$x_n = a \sin(\pi \xi_n). \quad (7.30)$$

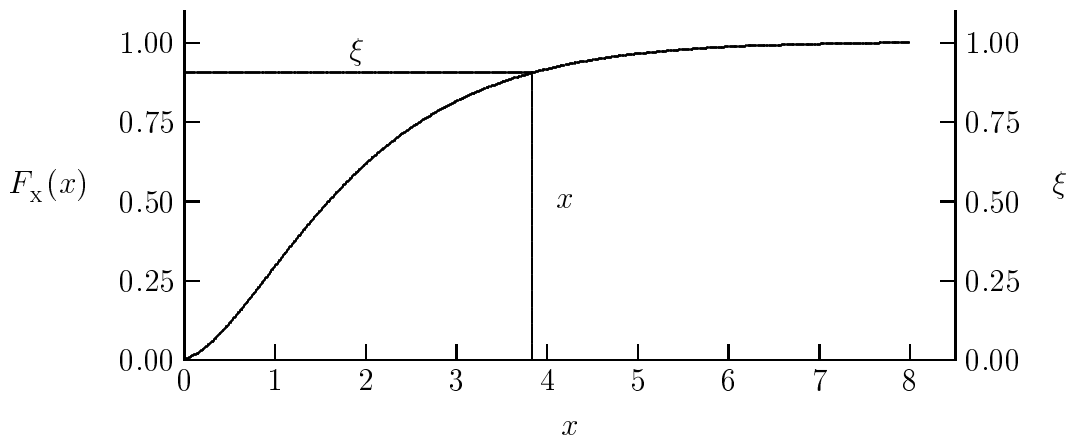


Рисунок 7.2 — К алгоритму генерации непрерывной случайной величины X с плотностью $f_X(x) = x \exp(-x)$ и интегральным законом распределения вероятностей $F_X(x) = 1 - (x+1) \exp(-x)$; значению $\xi = 0,9048$ равномерной на $[0; 1]$ случайной величины ξ отвечает значение $x = 3,8400$ непрерывной случайной величины X

Метод генерации значений непрерывных случайных величин на основе функционального преобразования.

В этом методе (рис. 7.2) каждую случайную величину ξ , получаемую с помощью стандартного датчика, подвергают преобразованию с помощью некоторой функции

$$x = \Psi(\xi). \quad (7.31)$$

Если значение случайной величины ξ с некоторой вероятностью попадает в интервал $(\xi', \xi' + d\xi')$, то с той же вероятностью значение x окажется в соответствующем интервале $(x', x' + dx')$, т.е. при условии (7.31) имеем

$$f_\xi(\xi') d\xi' = f_X(x') dx', \quad (7.32)$$

где $f_\xi(\xi)$ — плотность распределения случайной величины ξ , а $f_X(x)$ — плотность распределения случайной величины x .

Для равномерно распределенной случайной величины на интервале $[0; 1]$ имеем $f_\xi(\xi) = 1$, поэтому

$$d\xi' = f_X(x') dx'.$$

Отсюда получаем функциональную связь между ξ и x :

$$\xi = \int_{-\infty}^x f_X(x') dx' \equiv F_X(x), \quad (7.33)$$

где $F_X(x)$ — функция распределения случайной величины X .

Пусть нам известна функция $\Phi(\xi)$, обратная к функции $F_X(x)$. Тогда преобразование

$$x = F_X^{-1}(\xi) = \Phi(\xi) \quad (7.34)$$

дает возможность получить случайную величину X с заданным законом распределения (рис. 7.2).

Таким образом, метод функционального преобразования предполагает получение выборочных значений $\{\xi_n\}$, где $n = 1, 2, \dots, N$, и последующее преобразование их в последовательность выборочных значений $\{x_n\}$.

На практике интервал $[0; 1]$ разбивают на некоторое число K последовательных подинтервалов, после чего запоминают массив $\{\xi\}$ из $K + 1$ значений на их границах. Ширина каждого из подинтервалов может быть выбрана как постоянной, так и переменной.

Далее для каждого $\{\xi_k\}$, ($k = 1, 2, \dots, K$) находят (численно) решение уравнения

$$\xi_k = F_x(x_k) = F_k, \quad (7.35)$$

что дает соответствующие массивы $\{x\}$, $\{F\}$. Эту подготовительную работу выполняют заранее, а массивы $\{\xi\}$, $\{x\}$ и $\{F\}$ запоминают.

При генерации на основе стандартного датчика по очередному случайному значению ξ находят такой номер m , что

$$F_m \leq \xi \leq F_{m+1}. \quad (7.36)$$

Тогда очередная случайная величина может быть выбрана из интервала

$$x_m \leq x \leq x_{m+1}. \quad (7.37)$$

Для уточнения значения случайной величины распространен метод обратной линейной интерполяции

$$x \rightarrow x_m + \frac{x_{m+1} - x_m}{F_{m+1} - F_m} (F_{m+1} - \xi). \quad (7.38)$$

Метод генерации значений дискретных случайных величин на основе функционального преобразования.

В рамках этого метода (рис. 7.3) для генерации значений m дискретной случайной величины с распределением амплитуд вероятностей $\{P_m\}$, где $m = 0, 1, 2, \dots$, заранее рассчитывают набор вероятностей $\{F_m\}$ по правилу

$$F_m = \sum_{n=0}^m P_n. \quad (7.39)$$

Теперь при генерации на основе стандартного равномерного на интервале $[0; 1]$ датчика по очередному случайному значению ξ находят такой номер m , что

$$F_m \leq \xi \leq F_{m+1}. \quad (7.40)$$

Найденный номер m и является очередным значением дискретной случайной величины X .

Метод Неймана генерации случайных величин.

Метод основан на "отбраковке" из выборки случайных величин тех из них, которые удовлетворяют некоторому критерию.

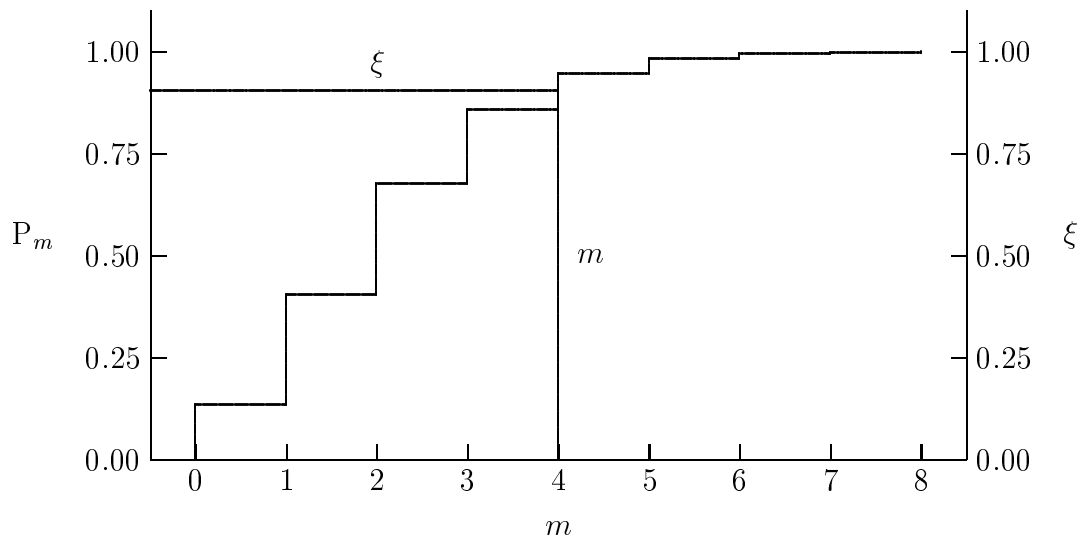


Рисунок 7.3 — К алгоритму генерации дискретной случайной величины X с амплитудой вероятности P_m ; значению $\xi = 0,9048$ равномерной на $[0; 1]$ случайной величины ξ отвечает значение $m = 4$ дискретной случайной величины X

Рассмотрим метод Неймана на примере генерации случайной величины, подчиняющейся нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией. Для этой случайной величины введем функцию

$$\rho(x) = \left(\max_x f_x(x) \right)^{-1} f_x(x) = \exp(-x^2/2). \quad (7.41)$$

Выберем интервал $-x_{\max} \leq x \leq x_{\max}$ такой, чтобы интегральная вероятность

$$P = \int_{-x_{\max}}^{x_{\max}} f_x(x) dx \quad (7.42)$$

отличалась от 1 не более, чем на заданное число $\varepsilon \ll 1$, т.е. $(1 - P) \leq \varepsilon$. Например, для $x_{\max} = 3$ имеем $(1 - P) < 0,0027$ (правило "трех сигм").

Теперь выполняются следующие шаги алгоритма :

Шаг 1. С помощью двух независимых стандартных датчиков случайных чисел получим пару случайных чисел ξ и η , равномерно распределенных на интервале $[0; 1]$.

Шаг 2. С помощью одного из этих чисел получим

$$x = -x_{\max} + 2\xi x_{\max}, \quad y = \rho_x(x). \quad (7.43)$$

Шаг 3. Сравним две величины η и y . Если $\eta > y$, то переходим к шагу 1. Если $\eta \leq y$, случайное число ξ запоминаем.

Методом Неймана можно осуществлять генерацию значений случайной величины с произвольной плотностью распределения вероятностей.

7.9. Статистический анализ датчиков случайных чисел

Качество программных датчиков случайных чисел можно проверить разными способами. Распространенным способом является применение *гистограммы* (рис. 7.4 и рис. 7.5).

При построении гистограммы выполняются следующие шаги.

1. Задают объем выборки N .
2. С помощью выбранного датчика получают последовательность (*выборку*) случайных чисел $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$.
3. Находят $M_{\max} = \max(x_n)$ и $M_{\min} = \min(x_n)$, ($n = 1, 2, \dots, N$) – максимум и минимум выборки. Эти величины определяют границы анализа. Если границы заранее известны, как, например, в случае равномерного датчика, то пользуются этими значениями.
4. Задают число каналов анализа гистограммы M и ширину каждого канала $h = (M_{\max} - M_{\min})/M$.
5. Массив G размерности M , предназначенный для результатов гистограммного анализа, обнуляют.
6. Открывают цикл по элементам выборки $\{x_n\}$, ($n = 1, 2, \dots, N$).
- 6.1. Для каждого текущего x_n элемента определяют номер j канала заполнения по правилу $j = [1 + x_n/h]$, где $[.]$ – символ целой части.
- 6.2. В канал за номером j добавляют единицу, т.е. $G[j] \rightarrow G[j] + 1$.
7. По завершении цикла по элементам выборки проверяют, что сумма $\sum_{j=1}^M G[j]$ совпадает с объемом выборки N .

Гистограмма позволяет визуально удостовериться в качестве датчика. С её помощью можно найти выборочные характеристики, например, *выборочное среднее* x_* и *выборочную дисперсию* σ_*^2 :

$$x_* = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M hjG[j]; \quad (7.44, a)$$

$$\sigma_*^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - x_*)^2 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^M (hj - x_*)^2 G[j]. \quad (7.44, b)$$

При неограниченном увеличении объема выборки N и уменьшении при этом ширины h каналов анализа гистограммы её внешний вид (после нормировки на объем выборки N) становится все более похожим на график плотности распределения вероятностей $f_x(x)$ соответствующей случайной величины X , значения которой генерируются датчиком.

Найденные выборочные средние x_* и σ_*^2 можно сопоставить с их идеальными аналогами

$$m_p = \int x f_x(x) dx, \quad (7.45, a)$$

$$\sigma_p^2 = \int (x - m_p)^2 f_x(x) dx. \quad (7.45, b)$$

В курсе математической статистики подробно обсуждается сравнение выборочных характеристик и анализ свойств выборочных данных. Разработаны различные методы сопоставления, анализа, построения критериев и принятия статистических решений.

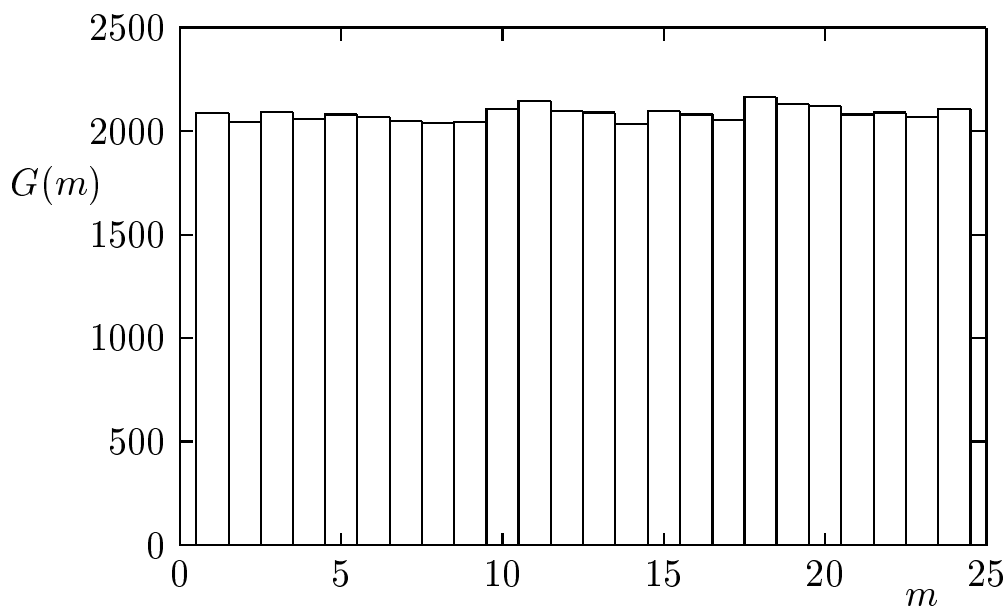


Рисунок 7.4 — Гистограмма $G(m)$ равномерного на интервале $[0; 1]$ датчика `random` среды Pascal (объем выборки $N = 50000$, число каналов анализа гистограммы $M = 24$)

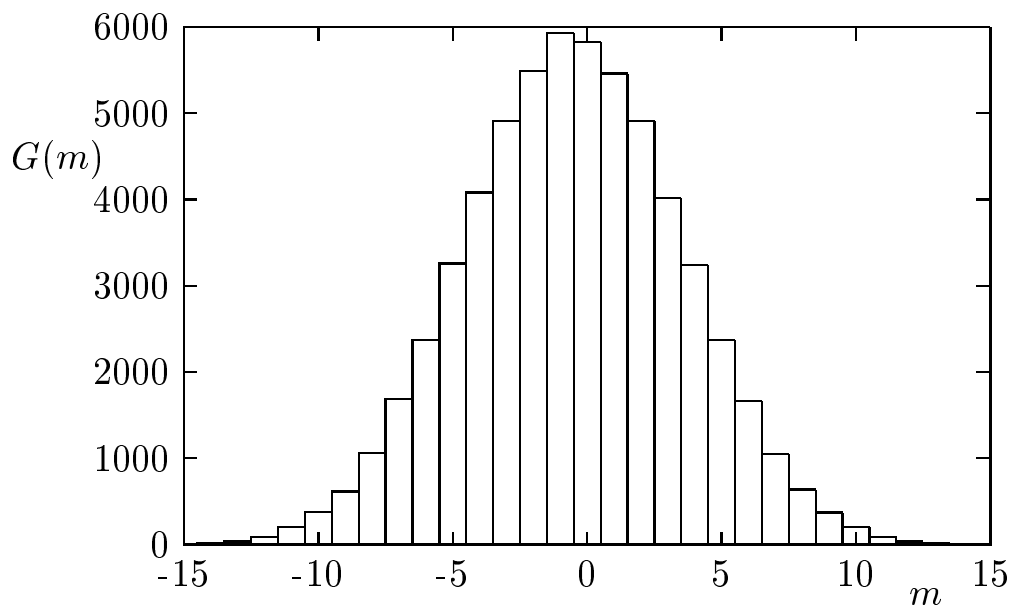


Рисунок 7.5 — Гистограмма $G(m)$ нормального датчика с параметрами $m = 0$, $\sigma = 1$, основанного на датчике `random` среды Pascal (объем выборки $N = 60000$, шаг канала анализа гистограммы $h = 0,25$)

7.10. Применение метода Монте-Карло для вычисления определенных интегралов

Значительная часть величин, которые являются объектом вычислений в различных прикладных задачах, являются либо интегралами, либо выражаются через интегралы общего вида. Зачастую аналитически вычислить такого рода интегралы в замкнутой форме невозможно. В особенности это относится к многократным интегралам, поскольку при вычислении таких интегралов на основе стандартных методов численных квадратур число суммируемых слагаемых возрастает при увеличении кратности интеграла чрезвычайно быстро.

Так, если мы разбиваем интервал изменения каждой переменной на десять частей, то для вычисления тройного интеграла потребуется находить сумму примерно 1000 слагаемых. Для вычисления же 20-кратного интеграла потребуется суммирование порядка 10^{20} слагаемых, что практически неосуществимо.

Единственным численным методом решения подобных задач является метод Монте-Карло, схема которого кратко изложена выше.

Вычисление однократных интегралов

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \quad (7.46)$$

может рассматриваться как частный случай процедуры (7.5), (7.6) для случая $K = 1$, единичной весовой функции $p(x) = 1$ и скалярного аргумента x . Схема метода Монте-Карло для такой задачи принимает вид

$$I_1 \rightarrow \hat{I}_1 = \frac{b-a}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n), \quad (7.47)$$

где $\{x_n; n = 1, \dots, N\}$ – случайные равномерно распределенные в интервале $[a, b]$ числа.

Датчик таких чисел реализуется по алгоритму (7.18) из стандартной последовательности $\{q_n; n = 1, \dots, N\}$. Алгоритм (7.45) аналогичен методу прямоугольников нахождения значения определенного интеграла.

Вычисление кратных интегралов реализуется по той же схеме. Рассмотрим, например, случай трехкратного интеграла

$$I_3 = \iiint_G f(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3, \quad (7.48)$$

в котором область интегрирования ограничена параллелепипедом

$$G : \{a_1 \leq x_1 \leq b_1; a_2 \leq x_2 \leq b_2; a_3 \leq x_3 \leq b_3\}.$$

Заменой переменных

$$x_i = a_i + (b_i - a_i)y_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (7.49)$$

интеграл (7.46) приводится к виду

$$I_3 = (b_1 - a_1)(b_2 - a_2)(b_3 - a_3) \iiint_g f(y_1, y_2, y_3) dy_1 dy_2 dy_3. \quad (7.50)$$

Здесь $f(y_1, y_2, y_3)$ – подинтегральная функция, записанная в новых переменных y_1, y_2, y_3 , а через g обозначена область интегрирования по переменным y_1, y_2, y_3 .

Используя теперь датчик случайных чисел, равномерно распределенных на интервале $[0; 1]$, по схеме метода Монте–Карло (7.5), (7.6) получаем оценку интеграла (7.50) в виде

$$I_3 \rightarrow \hat{I}_3 = \frac{1}{N} (b_1 - a_1)(b_2 - a_2)(b_3 - a_3) \sum_{n=1}^N f(y_{1,n}, y_{2,n}, y_{3,n}). \quad (7.51)$$

7.11. Применение метода Монте-Карло для вычисления многократных интегралов

При расчетах оценок многократных интегралов удобно предварительно путем замены переменных интегрирования перейти к стандартным пределам интегрирования $[0; 1]$ по каждой из них (рис. 7.6).

Будем считать, что подинтегральная функция $f(x_1, \dots, x_K)$ обладает свойством интегрируемости, а исходный интеграл кратности K уже приведен к такому стандартному виду аналогично процедуре (7.48)–(7.51). Возникающий при этом прединтегральный множитель используется в заключительном результате, т.е.

$$I_K = \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{K \text{ раз}} f(x_1, \dots, x_K) dx_1 \dots dx_K, \quad (7.52)$$

Следуя методу Монте-Карло, рассмотрим набор, образованный последовательностью независимых величин $\{\theta_k\}$, $k = 1, \dots, K$. Каждая из этих величин является случайной величиной с плотностью распределения $p_k(\theta_k) = 1$, если $0 \leq \theta_k \leq 1$, и $p_k(\theta_k) = 0$ в противном случае.

Образуем теперь из набора независимых величин $\{\theta_k\}$ случайный вектор $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_K)$. Реализации этого вектора равномерно заполняют пространство, ограниченное гиперкубом Ω со стороной, равной 1.

Тогда

$$I_K = \int_V f(\Theta) d^K \Theta = M_\Theta [f(\Theta)], \quad (7.53)$$

где V – объем единичного гиперкуба; $M_\Theta [f(\Theta)]$ – математическое ожидание относительно случайного вектора Θ .

Построим последовательность значений, образованную из реализаций случайного вектора Θ . Выполнив вычисления в соответствии с формулой

$$y_n = f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}), \quad (7.54)$$

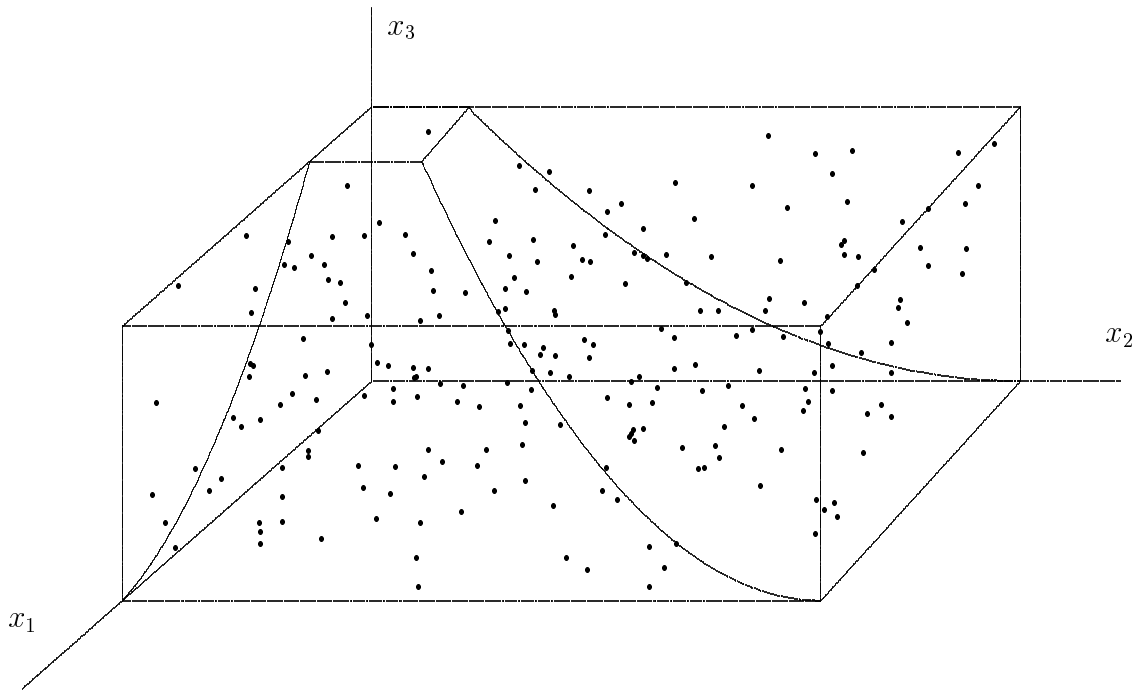


Рисунок 7.6 — К оценке объема сложного трехмерного тела; объем выборки $N = 200$

получим последовательность $\{y_1, y_2, \dots, y_N\}$ из N реализаций возможных значений случайной величины Θ

$$Y_n = f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}). \quad (7.55)$$

Из способа образования последовательности $\{y_n\}$ вытекает, что случайные величины $\{Y_n\}$ взаимно независимы и имеют один и тот же закон распределения. Поэтому, воспользовавшись законом больших чисел теории вероятностей, получим следующий алгоритм получения численной оценки интеграла I_K :

$$\hat{I}_{K,N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Y_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\theta_{1,n}, \theta_{2,n}, \dots, \theta_{K,n}). \quad (7.56)$$

Здесь важно отметить, что требуемый объем вычислений зависит от K уже не по степенному закону, а растет пропорционально кратности интегрирования K (при фиксированных остальных параметрах).

Оценка (7.56) является также случайной величиной, соответствующей величине объема выборки N . С увеличением N последовательные реализации этой случайной величины имеют тенденцию группироваться около идеального уровня – искомого интеграла I_K .

Перейдем к определению величины необходимого объема статистических испытаний N для получения оценки вероятности ошибки $\hat{I}_{K,N}$ при заданной доверительной вероятности и доверительном интервале. Рассмотрим следующее случайное событие: $\{\text{относительная погрешность оценки } \hat{I}_{K,N} \text{ величины } I_K \text{ не превышает } \alpha\}$ и поставим вопрос о вероятности такого события.

Пусть с вероятностью q относительная погрешность оценки $\hat{I}_{K,N}$ величины

I_K не превышает α , т.е.

$$\Pr \left\{ \alpha I_K \left(D_N \left[\hat{I}_{K,N} \right] \right)^{-1/2} \leq \gamma \right\} = q, \quad (7.57)$$

где $\alpha = |I_K - \hat{I}_{K,N}| / I_K$ – допустимая граница погрешности;

$$\gamma = \Phi^{-1}(q);$$

$\Phi(z) = (2\pi)^{-1/2} \int_0^z \exp(-t^2/2) dt$ – функция Лапласа;

$D_N \left[\hat{I}_{K,N} \right]$ – дисперсия оценки величины $\hat{I}_{K,N}$:

$$D_N \left[\hat{I}_{K,N} \right] = \frac{1}{N} \left(M_{\Theta} \left[f^2(\Theta) \right] - \{ M_{\Theta} [f(\Theta)] \}^2 \right). \quad (7.58)$$

Иначе полученное выражение можно записать в виде

$$D_N \left[\hat{I}_{K,N} \right] = \frac{1}{N} C_1, \quad (7.59)$$

где C_1 – некоторая константа задачи, связанная с конкретным видом подынтегральной функции.

Включая в эту константу неизвестное, но *точное* значение I_K , получим выражение, содержащее интересующую нас зависимость для объема выборки

$$\Pr \left\{ \alpha \sqrt{N/C_1} \leq \gamma \right\} \approx q. \quad (7.60)$$

Чем меньше параметр α , тем точнее получающаяся оценка. Соответственно доверие к ней тем больше, чем больше вероятность q . На практике обычно выбирают величины параметра α и вероятности q следующими: $\alpha = 0,05$ и $q = 0,9$ (этому значению q отвечает $\gamma = 1,65$). Для этих значений статистических параметров алгоритма получим из (7.60) следующую формулу для искомого объема выборки

$$N \approx C_1 (\gamma/\alpha)^2. \quad (7.61)$$

Эта полученная величина – требуемый объем статистической выборки (верхняя граница N). Она гарантирует при выполнении расчета интеграла I_K получение его оценки $\hat{I}_{K,N}$, которая не отклоняется с вероятностью q от истинного значения с относительной погрешностью α .

Из (7.61) не удастся получить количественную зависимость для N , поскольку неизвестна константа C_1 . На практике выражением (7.61) пользуются, экспериментируя с разными значениями объема выборки, последовательно их удваивая.

Если интерпретировать доверительный интервал α как относительную погрешность оценки ε , то из (7.61) следует

$$\varepsilon \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \gamma C_1, \quad (7.62)$$

т.е. с увеличением объема выборки в N раз, погрешность оценки интеграла уменьшается в \sqrt{N} раз. Поэтому в качестве погрешности $\varepsilon = \varepsilon_N$ последовательно используют следующую характеристику:

$$\varepsilon_N = |\hat{I}_{K,2N} - \hat{I}_{K,N}| / \hat{I}_{K,2N}, \quad (7.63)$$

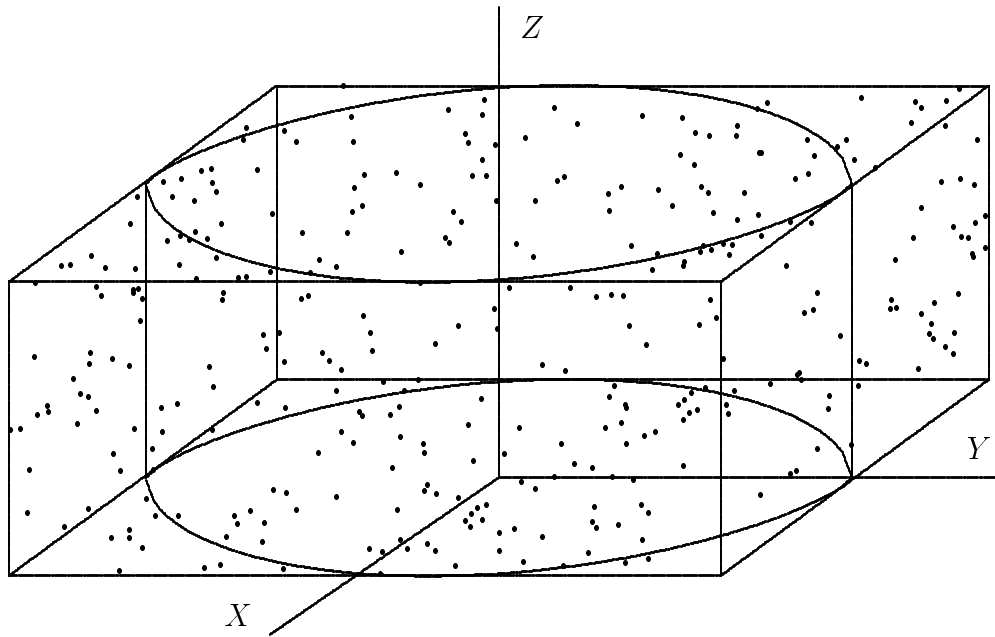


Рисунок 7.7 — К задаче оценки объема цилиндра (объем выборки $N = 300$)

где $\hat{I}_{K,N}$ и $\hat{I}_{K,2N}$ – величины оценок значения искомого интеграла при удвоении объема выборки N .

Из (7.63) следует, что реализации оценок $\hat{I}_{K,N}$ для различных N имеют огибающую погрешности, пропорциональную $N^{-1/2}$. Поэтому в логарифмических переменных графическая зависимость этой огибающей $\log_2 \varepsilon_N$ как функции $\log_2 N$ должна иметь тангенс наклона, равный $-\frac{1}{2}$. Например, при каждом учетверении N погрешность ε_N должна уменьшиться в $\sqrt{4} = 2$ раза.

7.12. Применение метода Монте-Карло для оценки объёма цилиндра

Ниже рассмотрим пример практического применения метода статистических испытаний (метода Монте-Карло).

Пусть задан цилиндр высотой $H = 1$ и радиусом кругового основания $R = 1$. Поставим задачу нахождения оценки объёма такого цилиндра с помощью метода Монте-Карло (рис. 7.7).

Оценка объёма цилиндра находится по формуле

$$\hat{V}_N = V_{\text{maj}} \cdot \frac{L}{N}, \quad (7.64)$$

где $V_{\text{maj}} = 4R^2H$ – объём мажоранты (в данном примере – объём параллелепипеда); N – число всех точек (объём выборки); L – число попавших в цилиндр точек (число благоприятных событий).

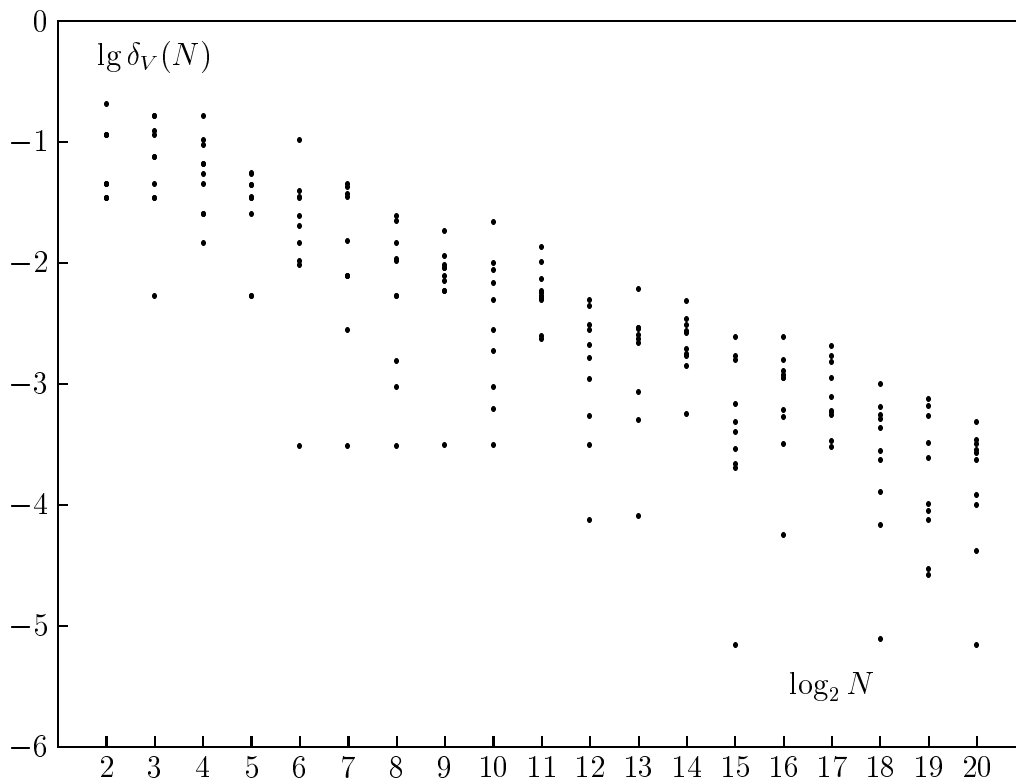


Рисунок 7.8 — Набор экспериментальных данных в задаче оценки объема цилиндра

Здесь еще раз отметим, что оценка \hat{V}_N является случайной величиной, а её значение будет различным для разных объемов выборки N . Более того, значения оценки \hat{V}_N , вообще говоря, будут отличаться при различных (независимых) попытках оценивания с одной и той же величиной объема выборки N .

Для оценки объёма цилиндра организуем цикл вызова датчика и получим последовательность случайных точек $\{(X_n, Y_n, Z_n)\}$, $n = 1, \dots, N$.

Полное число таких точек образуют объём выборки N . Вся выборка содержится внутри параллелепипеда и принадлежит мажоранте, при этом некоторая часть её принадлежит цилиндру. Преобразуем тройку чисел (X_n, Y_n, Z_n) в новую (u_n, v_n, w_n) по правилу

$$\begin{aligned} u_n &= (2X_n - 1)R, \\ v_n &= (2Y_n - 1)R, \\ w_n &= Z_n H. \end{aligned} \tag{7.65}$$

Каждая точка с координатами (u_n, v_n, w_n) находится внутри мажоранты. Условием выполнения благоприятного события, т.е. попадания этой точки внутрь цилиндра, является

$$(u_n^2 + v_n^2) \leq R^2. \tag{7.66}$$

Пусть для объёма выборки N объём подвыборки точек, отвечающих благоприятному условию принадлежать цилиндру, оказался в результате опыта равным L .

Создадим файл данных, в который будем выводить величины $\lg N$ и

Таблица 7.2 — Результаты вычислений оценки \hat{V} объема V цилиндра

Объём выборки N	16	4096	131072	1048576
Оценка объёма цилиндра \hat{V}_N	2,56	2,792	3,233	3,1456
Точный объём цилиндра V_{ideal}	3,14159	3,14159	3,14159	3,14159
Погрешность $\Delta_V(N)$ оценки	0,58	0,35	0,09	0,0041
Логарифм $\lg \delta_V(N)$	-1,451	-2,498	-3,569	-3,773

$\lg \Delta_V(N) = \lg (|V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|)$ (для абсолютной погрешности), а также основанные на них величины $\log_2 N$ и $\lg \delta_V(N) = \lg (|V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|/V_{\text{ideal}})$ (для относительной погрешности).

По данным, полученным в результате многократного выполнения программы, строится зависимость. На рис. 7.8 приведена вся совокупность экспериментальных данных (указана набором точек), из которого видно монотонное уменьшение относительной погрешности, т.е. улучшение точности оценок. Видно также, что набор точек хорошо мажорируется сверху прямой.

Проанализируем результаты, полученные на основании рис. 7.8. Поскольку относительная погрешность

$$\delta_V(N) = |V_N - \hat{V}_{\text{ideal}}|/V_{\text{ideal}} \quad (7.67)$$

зависит от объёма выборки N в соответствии с выражением

$$\delta_V(N) \approx \text{Const} / \sqrt{N}, \quad (7.68)$$

то (используем логарифмы по основанию 10)

$$\lg \delta_V(N) \approx \lg \text{Const} - \frac{1}{2} \lg N. \quad (7.69)$$

В соответствии с этим выражением тангенс угла наклона мажорирующей зависимости $\delta(N)$ в двойной логарифмической шкале должен равняться $-\frac{1}{2}$. Построим эту зависимость на основании полученных данных. Выберем два периферийных значения для объёма выборки: $N_8 = 2^8 = 256$ и $N_{18} = 2^{18} = 262144$. Для них усреднённые величины относительной погрешности составили $\lg \delta_V(N_8) = -0,730$ и $\lg \delta_V(N_{18}) = -2,424$.

Для тангенса угла наклона $\text{tg} \psi$ мажорирующей прямой из экспериментальных данных получим

$$\text{tg} \psi \approx \frac{\lg \delta_V(N_8) - \lg \delta_V(N_{18})}{(\log_2 N_8 - \log_2 N_{18}) \lg 2} \approx \frac{-0,73 + 2,424}{(8 - 18) 0,3010} = -0,563. \quad (7.70)$$

Найденный результат также хорошо согласуется с его теоретическим прототипом, равным $-\frac{1}{2}$, если принять во внимание меньшую величину $N_8 = 2^8 = 256$. Полученный результат обосновывает применение используемой методики вычисления искомых оценок.

Зададимся допустимой величиной ε погрешности результата и выберем, например, $\varepsilon = 10^{-2}$. Из рис. 7.8 видно, что выполнение условия $\delta_V(N) < \varepsilon = 10^{-2}$ гарантируется для объема выборки N , равного $N_{17} = 2^{17} = 131072$.

В результате расчётов получим для разброса искомой оценки объема цилиндра $\Delta(V_{N_{17}}) = 0,0035$.

Таким образом находим, что искомая оценка следующая

$$\hat{V}_{N_{17}} = 3,1451 \pm 0,0035, \quad (7.71)$$

при этом идеальное значение составляет

$$V_{\text{ideal}} = \pi R^2 H = 3,14159. \quad (7.72)$$

Сопоставление этих приведенных величин указывает на достаточную достигнутую точность. Найденные значения сведены в табл. 7.2.

Здесь отметим, что рассмотренная задача оценки носит модельный характер и в ней заранее известно точное значение V_{ideal} искомого объема цилиндра. На практике это точное значение, как правило, неизвестно. Поэтому вычисление $\lg \delta_V(N)$ осуществляют, например, путем сравнения очередной оценки \hat{V}_N со средневыборочной оценкой (при данном объеме выборки N).

Характеризуя метод Монте-Карло, можно сделать следующие выводы.

Преимущества применения метода Монте-Карло при численном интегрировании:

1. Метод свободен от каких-либо предположений о регулярности (гладкости) подинтегральной функции или степени её сложности;
2. Метод конструктивен для областей интегрирования сложной или причудливой формы, в том числе для областей, границы которых находятся по выполнению каких-либо заданных условий;
3. Метод конструктивен для нахождения интегралов произвольной кратности, в том числе и при большом числе измерений.

Некоторые недостатки метода:

1. Границы ошибок вычисления искомых величин не определены точно, они содержат некоторую случайность;
2. Статистическая погрешность получаемой оценки убывает медленно (с порядком убывания $N^{-1/2}$), а для её улучшения необходимо создавать специальные алгоритмы, зависящие от особенностей задачи;
3. С целью улучшения эффективности метода необходимо для каждого конкретного многократного интеграла специально создавать мажоранту.

Метод Монте-Карло применяется при решении достаточно широкого класса вычислительных задач. Среди них можно в дополнение к уже указанным отметить:

- генерацию случайных процессов и полей;
- нахождение решений дифференциальных уравнений;
- моделирование эволюции сложных систем, к которым затруднительно применять аналитические и другие методы.

7.13. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на четыре часа и содержит два задания.

З а д а н и е 1

Составьте программу генерирования нормально распределенных случайных чисел по двум методам:

- по аддитивному методу (7.21);
- по методу функциональных преобразований (7.23).

Задаваемыми параметрами служат объем выборки N , среднее значение m и среднеквадратическое отклонение σ .

Постройте гистограмму полученной выборки, выбрав надлежащим образом 12 подинтервалов области просмотра по аргументу.

Сравните среднее время, требуемое для получения выборки фиксированного объема $N = 10^3$ двумя различными методами – (7.21) и (7.23).

Варианты

- 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 д а н и е 2

Составьте программу вычисления определенных интегралов методом Монте-Карло. Исследуйте точность вычисления интегралов в зависимости от объема выборки N . Ограничьтесь при этом значениями $N = 250, 500, 1000, 2000, 4000, 8000, 1600$.

Варианты

- 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) $a = 1,0$; $b = 2,0$; $f(x) = 3x + \ln(x)$.

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать:

- 1) содержание задания;
- 2) использованные формулы;

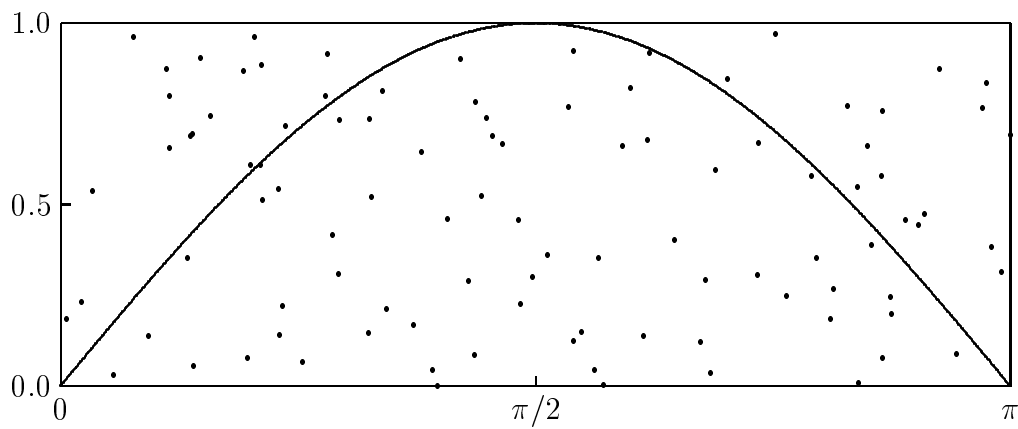


Рисунок 7.9 — К оценке площади под аркой синусоиды

- 3) текст программы;
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, выполненных в соответствии с заданием;
- 5) интерпретацию полученных результатов.

7.14. Задания для проверки

1. Раскройте суть метода Монте-Карло. Проанализируйте сходимость статистических оценок к истинному значению в зависимости от величины объема выборки.
2. Укажите преимущества и недостатки метода Монте-Карло.
3. Сравните способы нахождения значения определенных интегралов, основанные: а) на методе Монте-Карло; б) на методе прямоугольников.
4. Проверьте справедливость формул (7.22). Найдите среднее значение и дисперсию получающихся случайных величин.
5. Используя схему метода Монте-Карло, составьте программу вычисления площадей фигур, ограниченных заданными поверхностями G . Проверьте правильность вычислений на примере оценки площади фигуры S , ограниченной на плоскости xOy кривыми: $-1 \leq x \leq 1$, $y = x^3/4$, $y = x^2$, $y = (x + 4)/3$ (ответ: $S = 19/6$).
6. Используя схему метода Монте-Карло, составьте программу вычисления объемов тел, ограниченных заданными поверхностями G . Проверьте правильность вычислений на примере оценки объема тела V , ограниченного в пространстве поверхностями $z^2 = xy$, $x = 1$, $x = 0$, $y = 1$, $y = 0$ (ответ: $V = 1/2$).
7. Внутри заданного круга случайно выбираются точки A и B . Опишите алгоритм оценки среднего расстояния AB .
8. Внутри заданного треугольника с вершинами A , B , C случайно выбирается точка D . Опишите алгоритм оценки среднего расстояния AD .
9. Предложите развитие рассмотренных алгоритмов, позволяющее увеличить скорость сходимости случайной оценки к истинному значению.
10. *Задача Архимеда.* Пусть сфера описана цилиндром. Известно, что отношение ξ их объемов равно $2/3$. Пользуясь методом статистических испытаний, предложите вычислительную схему нахождения оценки $\hat{\xi}$ отношения ξ .

11. Предложите схему, основанную на методе Монте-Карло, для получения оценок длины заданных кривых на плоскости. Рассмотрите случай окружности, эллипса и участка параболы.

12. Предложите варианты рассмотренных алгоритмов, позволяющие получать случайную оценку решения обыкновенного дифференциального уравнения. Рассмотрите отдельно случаи задачи с начальными и граничными условиями.

13. Предложите схему, основанную на методе Монте-Карло, для получения оценок особых интегралов. Рассмотрите следующие случаи :

- особенность в одном или в обоих пределах интегрирования;
- особенность в подинтегральном выражении.

14. Используя схему метода Монте-Карло, составьте программу вычисления площади плоской фигуры, ограниченной осью абсцисс и аркой синусоиды на интервале $[0, \pi]$ (рис. 7.9). Проанализируйте величину объема выборки N , необходимого для достижения заданной точности δ вычислений.

8. Решение дифференциальных уравнений в частных производных

8.1. Основные теоретические положения

В общем случае *дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка* с двумя независимыми переменными x и y имеет вид

$$F(u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}) = 0, \quad (8.1)$$

где u — искомая функция, u_x, u_y — первые частные производные, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy} — вторые частные производные по аргументам x и y . В выражении (8.1) индексами у функции F указаны производные. Так, символ u_{xy} означает $\partial^2 u / \partial x \partial y$.

Решением уравнения (8.1) называется функция $u = u(x, y)$, обращающая это уравнение в тождество.

Уравнение (8.1) называется *линейным*, если оно первой степени относительно искомой функции $u(x, y)$ и всех её производных, т.е. оно может быть записано в виде

$$A(x, y)u_{xx} + 2B(x, y)u_{xy} + C(x, y)u_{yy} + a(x, y)u_x + 2b(x, y)u_y + c(x, y)u = f(x, y), \quad (8.2)$$

где коэффициенты A, B, C и a, b, c , а также функция f могут зависеть лишь от x и y . Если коэффициенты A, B, C и a, b, c не зависят от аргументов x и y , то (8.2) представляет собой линейное дифференциальное уравнение с постоянными коэффициентами.

Рассмотрим величину $D = AC - B^2$ — *дискриминант* уравнения. В зависимости от его знака уравнение (8.2) принадлежит к одному из следующих типов:

$D > 0$ — *эллиптический* тип;

$D = 0$ — *параболический* тип;

$D < 0$ — *гиперболический* тип

и, если D не сохраняет постоянный знак, — *смешанный* тип.

8.2. Параболические дифференциальные уравнения в частных производных

Применение численных методов при нахождении решений дифференциальных уравнений в частных производных характеризуется большим разнообразием. Далее будем рассматривать дифференциальные уравнения в частных производных параболического типа.

Дифференциальное уравнение в частных производных имеет в общем случае бесчисленное множество решений. Для нахождения конкретного решения, связанного с физическим, техническим или экономическим процессом, к уравнению нужно присоединить дополнительные условия. Эта дополнительная информация часто имеет вид *начального условия* и *краевых (граничных) условий*.

Условие, относящееся к исходному моменту времени, называется *начальным*, а условия, относящиеся к фиксированным значениям координат (обычно это координаты граничных точек), — *краевыми*.

Рассмотрим однородный тонкий стержень, расположенный вдоль оси Ox . Температура $T = T(x, t)$ точки с абсциссой x для каждого момента времени t удовлетворяет уравнению теплопроводности

$$T_t(x, t) + qT_{xx}(x, t) = f(x, t), \quad (8.3)$$

где q — постоянная, зависящая от свойств материала стержня; $f(x, t)$ — функция, связанная с распределением источников тепла.

Пусть в начальный момент времени $t = 0$ задано пространственное распределение температуры

$$T(x, 0) = T_0(x) \quad (8.4)$$

и законы изменения температуры на краях $x_{\min} = 0$ и $x_{\max} = L$:

$$\begin{aligned} T(0, t) &= \varphi(t), \\ T(L, t) &= \psi(t). \end{aligned} \quad (8.5)$$

Отыскание решения $T = T(x, t)$ уравнения (8.3), удовлетворяющего условиям (8.4)–(8.5), называется *задачей Коши*. В ней требуется найти распределение температуры $T = T(x, t)$ вдоль стержня в любой момент времени t .

8.3. Метод сеток решения параболического дифференциального уравнения

Наиболее распространенным методом решения параболического дифференциального уравнения в частных производных является *метод сеток*.

При построении числовых алгоритмов нахождения решений дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа необходимо принимать во внимание форму области, в которой поставлена задача.

Рассмотрим этот метод на примере простого уравнения

$$T_t(x, t) = T_{xx}(x, t) \quad (8.6)$$

с условиями (8.4) и (8.5). Для нахождения его численного решения используем пространственно-временную систему координат (x, t) .

В полуполосе $t > 0$, $0 \leq x \leq L$ построим *прямоугольную сетку* (рис. 8.1)

$$x = x_n = nh, \quad t = t_m = m\tau, \quad (8.7)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots, N$; $m = 0, 1, 2, \dots, M$; $h = L/N$ — шаг вдоль оси x ; $\tau = h^2/2$ — шаг вдоль оси t (рис. 8.1).

Для набора пространственно-временных узлов в прямоугольной сетке обозначим

$$T(x_n, t_m) = T_{n,m}. \quad (8.8)$$

Используем теперь следующую *конечно-разностную аппроксимацию производных*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} &\approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}); \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n+1,m} - T_{n,m}); \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}). \end{aligned} \quad (8.9)$$

Тогда, заменяя уравнение (8.6) конечно-разностным уравнением, найдем

$$\frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}) = \frac{1}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}).$$

Это дает

$$T_{n,m+1} = T_{n,m} + \frac{\tau}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}). \quad (8.10)$$

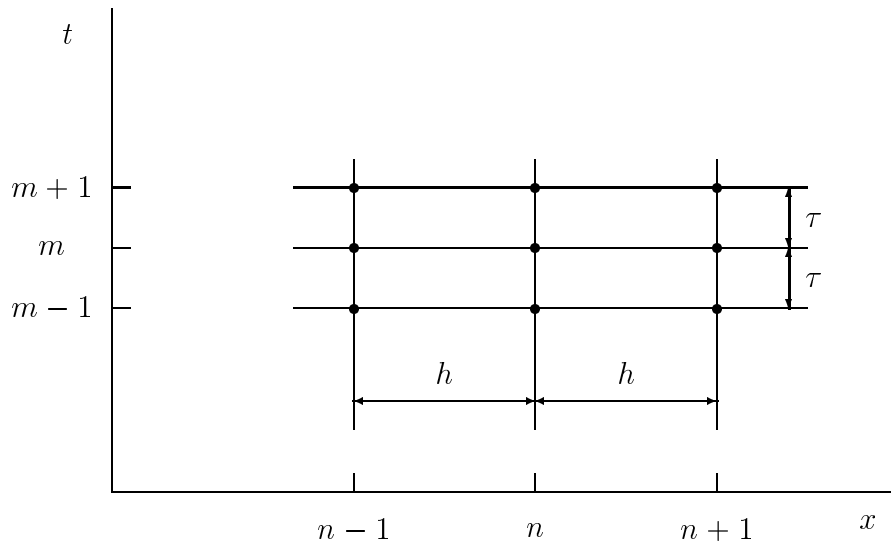


Рисунок 8.1 — Пример пространственно-временной сетки (h — шаг по пространственной переменной x ; τ — шаг по временной переменной t)

Из (8.10) видно, что если известны значения функции $T(x, t)$ в точках m -го слоя $t_m = m\tau$, то с помощью этой формулы можно *рекуррентно* вычислить значения $T(x, t)$ в точках следующего $(m+1)$ -го слоя $t_{m+1} = (m+1)\tau$.

Для начального слоя $t = 0$ значения функции $T(x, t)$ определяются из начального условия с заданной функцией $T_0(x)$:

$$T(x_n, 0) = T_0(x_n), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (8.11)$$

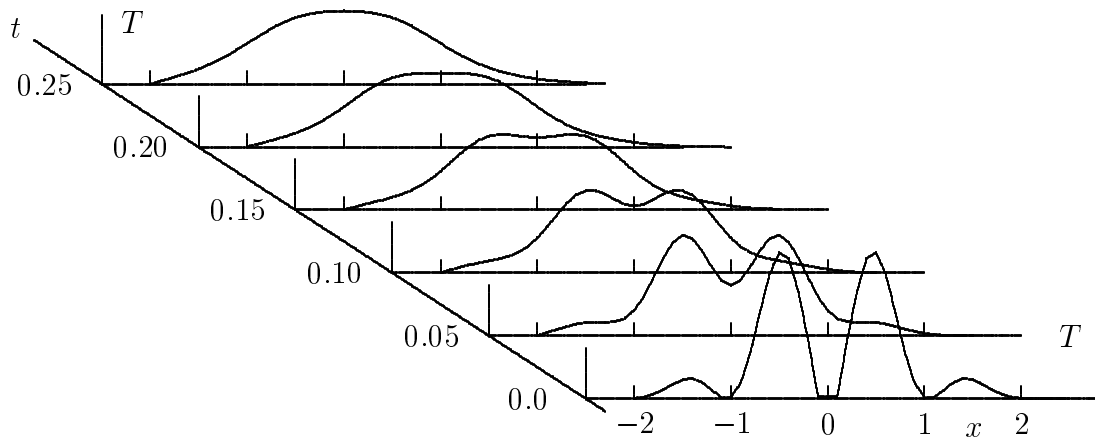


Рисунок 8.2 — Пример численного решения параболического дифференциального уравнения $\partial T/\partial t = 0,5 \partial^2 T/\partial x^2$ с начальным условием $U(x, 0) = 3 \sin^2(3x) \exp(-x^2)$. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$

Для значений функции $T(x, t)$ в крайних узлах $(0, t_m)$ используются граничные условия

$$T(0, t_m) = \varphi(t_m), \quad T(L, t_m) = \psi(t_m), \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (8.12)$$

Используя (8.10) и (8.12), по формуле (8.9) последовательно вычисляем $T(x_n, t_1)$ – значение искомой функции в узлах первой полосы; затем $T(x_n, t_2)$ и так далее до $T(x_n, t_M)$.

В результате получим значения двумерного массива $\{T\}$ искомой функции, определенные на всей аргументной сетке (8.7).

На рис. 8.2 показан пример решения параболического дифференциального уравнения. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$; $\tau = 0,001$.

8.4. Аппроксимационные шаблоны для первых и вторых производных

Применение конечно-разностных аппроксимаций для частных производных является наиболее распространенным подходом к численному интегрированию дифференциальных уравнений в частных производных. Частные производные заменяются соответствующими разностными соотношениями (центрированными и нецентрированными) по соответствующим независимым переменным.

Условимся, что горизонтальному направлению отвечает изменение переменной x , а вертикальному направлению — изменение другой переменной t . Положительным приращением по вертикальной (или горизонтальной) линии соответствует верхний (правый) конец, отрицательным – нижний (левый) конец.

Для наглядного представления конечно-разностных аппроксимаций вида (8.9) используют шаблоны, рисунки для которых приводятся ниже. В этих шаблонах в

центре кругов указываются коэффициенты используемых аппроксимаций. Центральному кругу отвечает узел сетки с координатами (n, m) .

Из простых элементов строятся более сложные вычислительные шаблоны для дифференциальных уравнений. Усложнение осуществляется суперпозицией соответствующих вычислительных шаблонов. Так получаются шаблоны для комбинаций различных частных производных высокого порядка.

Приведем распространенные шаблоны для частных производных по независимой переменной x (рис. 8.3 и 8.4).

Шаблон *первой* производной по x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n,m} - T_{n-1,m}) = \frac{1}{h} \times \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{+1} \text{---} \textcircled{0} \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{h} (T_{n+1,m} - T_{n,m}) = \frac{1}{h} \times \textcircled{0} \text{---} \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{+1} \\ \frac{\partial}{\partial x} T_{n,m} &\approx \frac{1}{2h} (T_{n+1,m} - T_{n-1,m}) = \frac{1}{2h} \times \textcircled{-1} \text{---} \textcircled{0} \text{---} \textcircled{+1} \end{aligned}$$

Рисунок 8.3 — Аппроксимационные шаблоны первой производной по x

Шаблон *второй* (центрированная аппроксимация) производной по x :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T_{n,m} \approx \frac{T_{n+1,m} - 2T_{n,m} + T_{n-1,m}}{h^2} \approx \frac{1}{h^2} \times \textcircled{+1} \text{---} \textcircled{-2} \text{---} \textcircled{+1}$$

Рисунок 8.4 — Аппроксимационный шаблон второй производной по x

Эти вычислительные шаблоны содержат только горизонтальные элементы, поскольку t является постоянной.

Приведенные аппроксимационные шаблоны трехточечные. На практике для повышения точности расчетов применяют шаблоны, использующие и большее число узлов сетки, например пять.

Аналогично получают шаблоны для независимой переменной t (в вертикальном направлении). Приведем шаблоны для частных производных по второй независимой переменной t (рис. 8.5 и 8.6).

Эти вычислительные шаблоны содержат только вертикальные элементы, поскольку переменная x здесь зафиксирована. Первые два шаблона для $\partial T_{n,m} / \partial t$ являются нецентрированными (нижний и верхний), последний шаблон является центрированным. Выбор из этих шаблонов определяется местом координаты t , в которой вычисляется производная.

Шаблоны *первой* производной по t :

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m} - T_{n,m-1}) = \frac{1}{\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-1} \end{array}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m}) = \frac{1}{\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-1} \\ | \\ \textcircled{0} \end{array}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{2\tau} (T_{n,m+1} - T_{n,m-1}) = \frac{1}{2\tau} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{0} \\ | \\ \textcircled{-1} \end{array}$$

Рисунок 8.5 — Аппроксимационные шаблоны первой производной по t

Шаблон *второй* производной по t :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} T_{n,m} \approx \frac{1}{\tau^2} (T_{n,m+1} - 2T_{n,m} + T_{n,m-1}) = \frac{1}{\tau^2} \times \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ | \\ \textcircled{-2} \\ | \\ \textcircled{+1} \end{array}$$

Рисунок 8.6 — Аппроксимационный шаблон второй производной по t (центрированная аппроксимация)

Шаблон *второй* смешанной производной по переменным x и t :

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial t} T_{n,m} \approx \frac{1}{4h\tau} (T_{n+1,m+1} - T_{n+1,m-1} - T_{n-1,m+1} + T_{n-1,m-1}) = \frac{1}{4h\tau} \times \begin{array}{ccc} & \textcircled{-1} & \textcircled{+1} \\ & / \quad \backslash & \\ & \textcircled{0} & \\ & \backslash \quad / & \\ \textcircled{+1} & & \textcircled{-1} \end{array}$$

Рисунок 8.7 — Аппроксимационный шаблон второй смешанной производной по x и t (центрированная аппроксимация); слагаемые с нулевыми коэффициентами, кроме центрального, опущены

На рис. 8.7 приведен также аппроксимационный шаблон для *смешанной* производной по обоим независимым переменным x и t .

Для построения более точных (с меньшей погрешностью аппроксимации) шаблонов необходимо использовать большее количество узлов. С целью свести к минимуму распространение ошибок пользуются как центрированными аппроксимациями, так и аппроксимациями, основанными на левых или правых разностях, особенно при учете граничных или начальных условий.

8.5. Устойчивость разностной схемы для решения параболического дифференциального уравнения

Вернемся еще раз к исходному параболическому уравнению

$$u_t - qu_{xx} = 0, \quad (8.13)$$

где q – постоянная.

Как показано выше, дифференциальные операторы $\frac{\partial}{\partial x}$ и $\frac{\partial}{\partial t}$ при построении числового алгоритма аппроксимируются конечно-разностными операторами. Замена дифференциальных операторов на их разностные аналоги вносит погрешности в численное решение уравнения. Поскольку существуют ошибки аппроксимации, связанные с шагами по времени и по пространству, изучим эффективность и устойчивость конечно-разностного метода решения этого уравнения.

Для анализа устойчивости введем *Фурье-моду* зависимой переменной ($i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица)

$$u(x, t) = U(t) \exp(imx) \quad (8.14)$$

и подставим эту функциональную форму в разностное уравнение (8.10)

$$u_{n,m+1} = u_{n,m} + \frac{q\tau}{h^2} (u_{n+1,m} - 2u_{n,m} + u_{n-1,m}). \quad (8.15)$$

Это дает

$$U_{m+1} \exp(imx_n) = U_m \exp(imx_n) + \frac{q\tau}{h^2} U_m [\exp(imx_{n+1}) - 2\exp(imx_n) + \exp(imx_{n-1})],$$

или, так как $x_n = nh$,

$$U_{m+1} = U_m \left(1 + 2 \frac{q\tau}{h^2} [\cos(mh) - 1] \right). \quad (8.16)$$

Уравнение (8.16) связывает амплитуду Фурье-мод на последовательных временных слоях. Фурье-моду соответствует множитель перехода для m -го слоя

$$g_m = 1 - 4q \frac{\tau}{h^2} \sin^2(mh/2). \quad (8.17)$$

Необходимым и достаточным условием *устойчивости* рассматриваемой схемы решения является условие $g_m < 1$, справедливое для всех мод. Из (8.17) имеем

$$\left| 1 - 4q \frac{\tau}{h^2} \sin^2(mh/2) \right| < 1.$$

Выбирая максимальное значение синуса, получим условие устойчивости разностного алгоритма в виде

$$\tau < \frac{h^2}{2q}. \quad (8.18)$$

Таким образом, чтобы обеспечить устойчивость численного алгоритма решения, необходимо выбирать шаг по времени меньше максимально допустимого шага (8.18).

Неравенства такого рода, гарантирующие устойчивость метода, называются *условием Куранта-Фридрихса-Леви*. В рамках этой схемы точность по временному шагу имеет порядок $O(\tau)$, а по пространственному – порядок $O(h^2)$.

8.6. Погрешность метода сеток

В параболическом дифференциальном уравнении в частных производных

$$\frac{\partial}{\partial t} U = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U \quad (8.19)$$

введем, как и ранее, сетку

$$\begin{aligned} x = x_n = nh, & \quad n = 0, 1, 2, \dots, N, \\ t = t_m = m\tau, & \quad m = 0, 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (8.20)$$

где $\tau = sh^2$, а параметр s — постоянная, значение которой определим ниже.

Величины h (шаг вдоль оси x) и τ (шаг вдоль оси t) различны. Обозначив $u_{n,m} = U(x_n, t_m)$ и заменив (8.19) конечно-разностным уравнением, получим

$$\frac{1}{sh^2} (u_{n,m+1} - u_{n,m}) = \frac{1}{h^2} (u_{n-1,m} - 2u_{n,m} + u_{n+1,m})$$

или

$$u_{n,m+1} = su_{n-1,m} + (1 - 2s)u_{n,m} + su_{n+1,m}. \quad (8.21)$$

Введем обозначение для дифференциального оператора

$$L[u] = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \frac{\partial}{\partial t} u \quad (8.22)$$

и для дифференциально-разностного оператора

$$L_h[u] = \frac{1}{h^2} (u_{n-1,m} - 2u_{n,m} + u_{n+1,m}) - (u_{n,m+1} - u_{n,m}), \quad (8.23)$$

соответствующего дифференциальному оператору $L[u]$.

Разность

$$R_h[u] = L_h[u] - L[u] \quad (8.24)$$

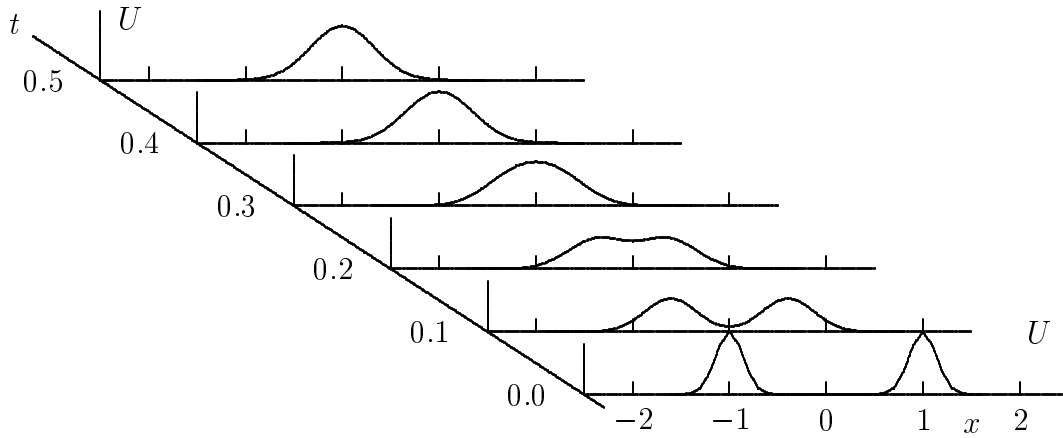


Рисунок 8.8 — Пример численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных $\partial U/\partial t = \nu \partial(xU)/\partial x + q \partial^2 U/\partial x^2$ с начальным условием $U(x, 0) = \exp[-0,5(x-1)^2/\sigma^2] + \exp[-0,5(x+1)^2/\sigma^2]$; параметры задачи: $\nu = 5,0$, $q = 0,5$, $\sigma = 0,15$. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$

называется *ошибкой аппроксимации*. Она есть та погрешность, которая возникает при замене оператора $L[u]$ оператором $L_h[u]$. В узлах сетки $L[u] = 0$ и $R_h[u] = L_h[u]$. Для определения этой погрешности учтем, что

$$\begin{aligned} u_{n+1,m} &= u(x_n + h, t_m); \\ u_{n-1,m} &= u(x_n - h, t_m); \\ u_{n,m+1} &= u(x_n, t_m + sh^2). \end{aligned} \tag{8.25}$$

Разложим $L_h[u]$ по формуле Тейлора в окрестности точки (x_n, t_m) :

$$L_h[u] = h^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{s}{2} \right) \frac{\partial^4}{\partial x^4} u_{n,m} + h^4 \left(\frac{1}{360} - \frac{s^2}{6} \right) \frac{\partial^6}{\partial x^6} u_{n,m} + O(h^6) + \dots$$

Выберем для параметра s значение $s = 1/6$. Тогда получим

$$L_h[u] = -\frac{h^4}{540} \frac{\partial^6}{\partial x^6} u_{n,m} + O(h^6). \tag{8.26}$$

Такой выбор параметра s для погрешности $R_h[u]$ приводит к оценке вида $R_h[u] = O(h^4)$, а при другом выборе числа s получим $R_h[u] = O(h^2)$.

Итерационная расчетная формула (8.21) при $s = 1/6$ принимает вид

$$u_{n,m+1} = \frac{1}{6} (u_{n-1,m} + 4u_{n,m} + u_{n+1,m}). \tag{8.27}$$

На рис. 8.8 показан пример решения параболического дифференциального уравнения. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$.

8.7. Разностная схема для решения уравнения Шредингера

Большое количество задач квантовой механики формулируются в терминах решения уравнения Шредингера (рис. 8.9).

В скалярном случае уравнение Шредингера для функции $\Psi(x, t)$ имеет вид

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = q \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi - V(x) \Psi, \quad (8.28)$$

где $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица; q – постоянная величина; $V(x)$ – заданная потенциальная функция.

Уравнение (8.28) отличается от уже рассмотренных параболических уравнений множителем – мнимой единицей. Обычно помимо решения $\Psi(x, t)$ при решении квантовомеханических задач еще строят зависимости для связанной с ней дополнительной функции $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$.

Для построения конечно-разностной схемы решения уравнения (8.28) учтём, что функция $\Psi(x, t)$ – комплекснозначная. Поэтому используем на сетке (8.20) *двухслойную аппроксимацию* для временной производной

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{n,m} \approx \frac{1}{2\tau} (\Psi_{n,m+2} - \Psi_{n,m}) \quad (8.29a)$$

и *однослойную аппроксимацию* для пространственной производной

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{n,m} \approx \frac{1}{h^2} (\Psi_{n+1,m} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n-1,m}). \quad (8.29b)$$

В результате получим алгоритм ($0 \leq n \leq N$, $0 \leq m \leq M$)

$$\Psi_{n,m+2} = \Psi_{n,m} + \frac{2i\tau q}{h^2} (\Psi_{n+1,m} - 2\Psi_{n,m} + \Psi_{n-1,m}) - 2i\tau V(x_n) \Psi_{n,m}, \quad (8.30)$$

в котором заданное начальное условие $\Psi(x, 0)$ нужно реализовать дважды для заполнения значений $\Psi_{n,0}$ и $\Psi_{n,1}$.

Условие устойчивости конечно-разностной схемы для решения уравнения Шредингера определим, представляя функцию $\Psi(x, t)$ в виде разложения по Фурье-модам. Для моды с номером k имеем $\Psi(x, t) = U_k(t) \exp(ikx)$, где $U_k(t)$ — её амплитуда. С целью исследовать устойчивость, опустим в (8.28) слагаемое $V(x)\Psi(x, t)$. Тогда конечно-разностный аналог уравнения (8.29) для k -й амплитуды имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2i\tau} \left[u_{k,m+1} \exp(i(m+1)x_k) - u_{k,m-1} \exp(i(m-1)x_k) \right] = \\ & = \frac{q}{h^2} u_{k,m} \left[\exp(imx_{k-1}) - 2 \exp(imx_k) + \exp(imx_{k+1}) \right]. \end{aligned}$$

Обозначим $\rho_m = u_{k,m} \exp(ix_k)$. Тогда после преобразований для этой новой амплитуды получим разностное уравнение

$$\rho_{m+1} - \rho_{m-1}^{-1} = -\frac{4iq\tau}{h^2} \sin^2(mh/2). \quad (8.31)$$

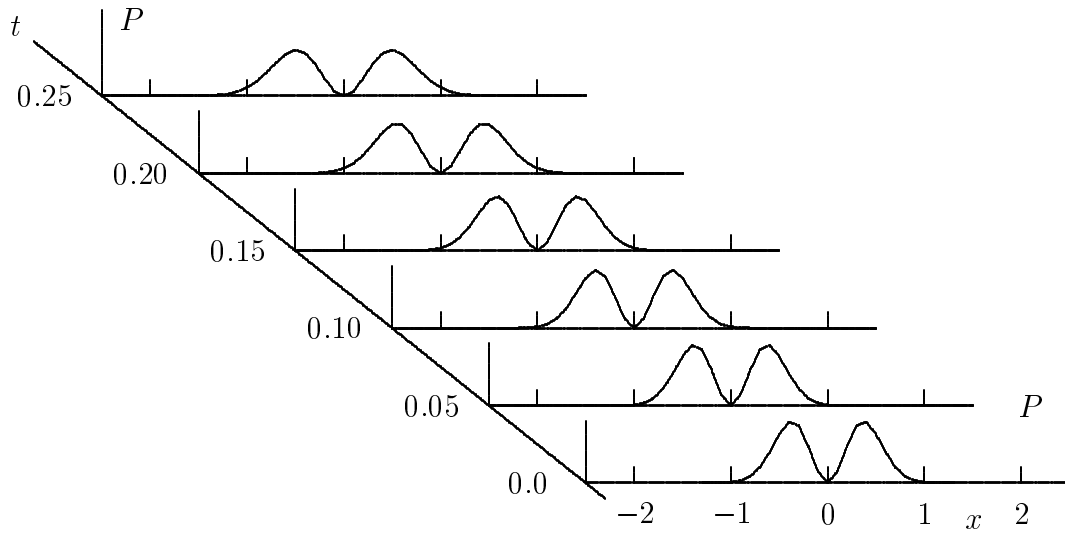


Рисунок 8.9 — Численный пример эволюции квадрата модуля $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ решения дифференциального уравнения Шредингера в частных производных $i^{-1} \partial \Psi / \partial t = 0,5 \partial^2 \Psi / \partial x^2 - x^2 \Psi$ в потенциале $V(x) = x^2$ с начальным условием $\Psi(x, 0) = \sin(2x) \exp(-0,5x^2)$. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$

Рассматривая худший случай, заменим в этом выражении $\sin^2(mh/2)$ на единицу. Тогда решение разностного уравнения

$$\rho_{m+1} - \rho_{m-1}^{-1} = -4iq\tau/h^2$$

будем искать в виде степенной функции $\rho = \lambda^m$, что дает характеристическое уравнение

$$\lambda^2 + \lambda \frac{4iq\tau}{h^2} - 1 = 0, \quad (8.32)$$

решение которого следующее :

$$\lambda_{1,2} = -2iq\tau/h^2 \pm \sqrt{-(2q\tau/h^2)^2 + 1}. \quad (8.33)$$

Условие стационарности $|\lambda_{1,2}|^2 = 1$ выполняется только, если $2q\tau/h^2 \leq 1$. Итак, для стационарности решения уравнения (8.28) с помощью аппроксимации (8.29) необходимо выполнить неравенство

$$\tau \leq \frac{h^2}{2q}, \quad (8.34)$$

связывающее временной и пространственный шаги.

Информационная трактовка полученного соотношения в том, что временное следствие не может произойти раньше, чем подействует пространственная причина.

На рис. 8.9 показан пример решения параболического дифференциального уравнения Шредингера. При построении алгоритма были выбраны шаги алгоритма: $h = 0,05$, $\tau = 0,001$.

8.8. Задание на лабораторную работу

Настоящая лабораторная работа рассчитана на четыре часа и содержит два задания.

З а д а н и е 1

Напишите программу для нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных. Воспользуйтесь конечно-разностным методом сеток.

С помощью программы найдите в полуполосе $0 \leq t \leq t_{\max}$, $0 \leq x \leq x_{\max}$ приближенное решение уравнения

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

с начальным условием $T(x, 0) = [(x - a)^2 + a^2]^{-1}$.

В программе должен быть использован алгоритм (8.9).

Исходные данные для программы:

x_0, x_{\max} – левая и правая границы пространственного слоя;

t_0, t_{\max} – исходный и конечный временные моменты;

N – число пространственных узлов;

a, q – параметры задачи;

$u(x_0, t) = \varphi(t)$ и $u(x_{\max}, t) = \psi(t)$ – граничные условия.

Результат работы программы – массив, содержащий значения искомой функции. Результаты оформите графически.

Вариант 1

$x_0 = 0,0$; $x_{\max} = 6,0$; $t_0 = 0,0$; $t_{\max} = 0,0$; $N = 15$;

$a = 1,0$; $2,0$; $3,0$; $q = 0,10$; $0,12$; $0,14$; $0,16$; $0,18$; $0,20$; $0,22$;

$\varphi(t) = 0,3$; $\psi(t) = 0,7$.

Вариант 2

$x_0 = 0,0$; $x_{\max} = 10,0$; $t_0 = 0,0$; $t_{\max} = 1,5$; $N = 15$;

$a = 3,0$; $5,0$; $7,0$; $q = 0,10$; $0,12$; $0,14$; $0,16$; $0,18$; $0,20$; $0,22$;

$\varphi(t) = 0,3$; $\psi(t) = 0,7$.

Вариант 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 д а н и е 2

Напишите программу нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных. Воспользуйтесь конечно-разностным методом сеток.

С помощью программы найдите в полуполосе $0 \leq t \leq t_{\max}$, $0 \leq x \leq x_{\max}$

приближенное решение уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t}U = \nu \frac{\partial}{\partial x}(xU) + q \frac{\partial^2}{\partial x^2}U$$

с начальным условием $U(x, 0) = \exp[-10(x - 10x_{\max})^2]$ и нулевыми граничными условиями.

В программе должен быть использован алгоритм (8.18).

Исходные данные для программы :

x_0, x_{\max} – левая и правая границы пространственного слоя;

t_0, t_{\max} – исходный и конечный временные моменты;

N – число пространственных узлов;

ν, q – параметры.

Результат работы программы – массив, содержащий значения искомой функции. Результаты оформите графически.

Вариант 1

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 2,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 1,0; N = 15;$

$\nu = 0,5; 1,0; 1,5; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Вариант 2

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 5,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 2,0; N = 15;$

$\nu = 1,0; 1,5; 2,0; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Вариант 3

$x_0 = 0,0; x_{\max} = 10,0; t_0 = 0,0; t_{\max} = 4,0; N = 15;$

$\nu = 1,5; 2,0; 2,5; q = 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22.$

Указания по оформлению работы

Отчет по выполненной работе должен включать :

- 1) содержание задания,
- 2) использованные формулы,
- 3) текст программы,
- 4) протокол выполнения численных экспериментов, содержащий таблицу исходных данных в узлах и результатов численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных, сведенных в таблицы и оформленных таблично,
- 5) интерпретацию полученных результатов.

8.9. Задания для проверки

1. Раскройте суть конечно-разностного метода нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных.

2. Постройте алгоритм решения уравнения (8.3) для случаев, когда коэффициент q является :

- а) функцией временной переменной;
- б) функцией пространственной переменной.

3. Пусть в граничных условиях (8.11) задано, что $T(0, t_{\max}) = \alpha$, $T(L, t_{\max}) = \beta$, где α и β – константы. Проанализируйте ход решения $T(x, t)$ уравнения (8.6) для случая больших t .

4. Постройте аппроксимационные шаблоны для следующих производных функции $f(x, y)$:

а) $\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, y)$; б) $\frac{\partial^4}{\partial x^4} f(x, y)$; в) $\frac{\partial^4}{\partial y^4} f(x, y)$;

г) $\frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} f(x, y)$; д) $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(x, y)$.

5. Для уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial t} = q \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

с параметром q , величина которого отлична от единицы, проанализируйте погрешность конечно-разностного метода сеток. Получите для этого уравнения итерационную расчетную формулу, аналогичную алгоритму (8.18).

6. Пусть функция $U = U(x, y, t)$ зависит от двух пространственных аргументов x и y , а также от временного аргумента t . Для уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial t} = q_1 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + q_2 \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$$

с начальным условием $U(x, y, 0) = [(x + a)(y + b)]^{-1}$ постройте конечно-разностный алгоритм решения, считая величины q_1 , q_2 , a и b заданными.

7. Для уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial U}{\partial t} = q \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + r x^2 U,$$

в котором $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица, q и r – заданные константы, с начальным условием $U(x, 0) = \exp[-4(x - 0, 5)^2]$ постройте конечно-разностный алгоритм нахождения решения.

8. Для уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left((0, 1 + \cos^2 x) \frac{\partial U}{\partial x} \right)$$

постройте устойчивую конечно-разностную схему второго порядка аппроксимации по t и h .

9. Пусть для дифференциального уравнения (8.13) дана разностная схема

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(U_{n,m+1} - U_{n,m}) &= \\ &= \frac{b}{h^2}(U_{n+1,m+1} - 2U_{n,m+1} + U_{n-1,m+1}) + \frac{1-b}{h^2}(U_{n+1,m} - 2U_{n,m} + U_{n-1,m}). \end{aligned}$$

Найдите, при каком значении параметра b порядок аппроксимации будет вторым по t и четвертым по h .

Приложения

П.10. Фонд зачетных заданий для самостоятельной работы

Задание № 1

Дана функция

$$f(x) = \sin\left(\frac{N+1}{2}x\right) - q \sin\left(\frac{N}{2}x\right), \quad 0 \leq x \leq 2\pi.$$

Для заданных значений параметров: целое N и $x \leq 1$, численно найдите все нули функции $f(x)$. Зафиксировав $N = 3$, постройте графики зависимостей найденных нулей от q в интервале $0,05 \leq q \leq 0,95$.

Задание № 2

Функция $f(x) = \ln(x^{1/2})$ задана на интервале $(4, 9)$ таблицей из N равноотстоящих узлов. Для числа узлов $N = 10, 15, 20$, найдите первую, вторую и третью производные этой таблично заданной функции, значения которых сравните с их аналитическими аналогами.

Задание № 3

Функция $f(\alpha, \beta)$ имеет следующее интегральное представление

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx.$$

С точностью 0,001 найдите значение $f(-1/2, -2)$.

Задание № 4

Для двух (3×3) -матриц A и B известно, что $AB = 0$ и $BA \neq 0$. Постройте алгоритм получения заданного количества N различных пар матриц с таким свойством.

Задание № 5

Численно исследуйте СЛАУ в зависимости от значения параметра λ

$$\begin{cases} (\lambda + 1)x_1 + x_2 + x_3 = \lambda^2 + 3\lambda, \\ x_1 + (\lambda + 1)x_2 + x_3 = \lambda^3 + 3\lambda, \\ x_1 + x_2 + (\lambda + 1)x_3 = \lambda^4 + 3\lambda. \end{cases}$$

Задание № 6

Для $n = 2, 3, 4$ найдите с точностью 0,001 значение интеграла

$$J_n = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2(nt)}{\sin^2(t)} dt.$$

Задание № 7

Найдите с точностью 0,001 значение двойного интеграла

$$J = \int_D \int (x^2 + y^2) dx dy,$$

если область D задана условиями $x \geq 0, y \geq 0, (x + y - 1) \leq 0$.

Задание № 8

С помощью формулы Гамильтона–Кэли найдите обратную матрицу A^{-1} , если

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

Задание № 9

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла двумя методами

$$J = \int_0^2 \sin(x^2)/x^2 dx.$$

Задание № 10

Найдите значения параметра q , при которых матрица A имеет ранг, равный 1, 2 и 3,

$$A = \begin{pmatrix} 1.7 & 0.8 & 0.9 \\ 0.8 & 0.7 & 0.3 \\ 1.5 & 1.5 & q \end{pmatrix}.$$

Задание № 11

Дано тело, имеющее форму тора. Радиус осевой окружности тора равен R_1 , радиус окружности, получающейся при рассечении тора, равен R_2 . Считая параметры R_1 и R_2 заданными, найдите объем тора: а) с помощью метода Монте–Карло; б) аналитически.

Задание № 12

Численно найдите все матрицы, коммутирующие с матрицей

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

Задание № 13

На интервале $(-2, 2)$ функция $f(x) = \arctg(x) - 1$ задана таблицей из N равноотстоящих узлов. Используя эту таблицу, постройте интерполяционный полином. Для случаев $N = 7, 9, 11$ найдите нуль найденного полинома и сравните его с нулем исходной функции.

Задание № 14

С помощью численных методов найдите решение уравнения

$$y' = (1 + y^2)^{1/2}(1 + x^2)^{-1/2}, \quad y_0 = 0, \quad 0 \leq x \leq 10.$$

Задание № 15

Даны две сферы радиусом R_1 и R_2 с центрами (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) соответственно. Полагая эти 8 величин заданными, найдите с помощью метода Монте–Карло объем их области перекрытия. Ответ сравните с результатом, найденным аналитически.

Задание № 16

Найдите значение интеграла

$$J = \int_1^{\infty} \frac{dx}{\operatorname{sh}(Ax)}$$

а) аналитически; б) численно с точностью 0,0001 для следующих значений параметра $A = 0.1, 1.0, 10$.

Задание № 17

Найдите численно все нули функции двумя методами

$$f(x) = x^3 + \alpha x^2 - \alpha^2 x - \alpha^3,$$

считая, что параметр α изменяется в интервале $1 \leq \alpha \leq 2$ с шагом 0,1.

Задание № 18

Найдите значение интеграла

$$J = \int_0^{\pi/4} \sin(x^2) dx$$

по формуле Чебышева и по формуле Гаусса. Результаты сравните.

Задание № 19

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла двумя методами:

$$J = \int_0^1 (1+t^2)(4+t^2)^{-1/2} dt.$$

Задание № 20

Дана матрица A такая, что

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналитически и численно найдите: а) матрицу A ; б) матрицу $\operatorname{ch}(\pi A)$; в) матрицу $\operatorname{sh}(\pi A)$.

Задание № 21

Для последовательности $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ известны начальные условия $u_1 = \alpha$, $u_2 = \beta$, а также рекуррентное соотношение

$$u_n = u_{n-1} + u_{n-2}, \quad n = 2, 3, \dots, N.$$

Найдите при данном n аналитическое выражение для u_n . При $\alpha = 1$, $\beta = 1$ и $\alpha = 0$, $\beta = 1$ результат проверьте численно для $N = 14$.

Задание № 22

Функция $f(\alpha, \beta)$ имеет следующее интегральное представление

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx.$$

С точностью 0,001 найдите значение $f(5, 1/5)$.

Задание № 23

Для функции $f(x) = x^4 - 2ax^2 + b$ укажите те интервалы значений параметров a и b , при которых $f(x)$ будет иметь 0, 2 или 4 вещественных корня. Результаты подтвердите численно.

Задание № 24

Найдите численно решение дифференциального уравнения

$$y''' + 3y'' + 4y' + 2y = \sin(2t), \quad 0 \leq t \leq 6\pi,$$

с условиями $y_0 = 0$, $y'_0 = 0$, $y''_0 = 0$. Численное решение сравните с его аналитическим аналогом.

Задание № 25

Для данной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1.7 & 0.8 & 0.9 \\ 0.8 & 0.7 & 0.3 \\ 1.5 & 1.5 & q \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3, 4, 5,$$

найдите матрицы $B = \ln(A)$ и $C = \exp(B)$.

Задание № 26

Решите численно систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} \sin(x + 1) - 1 = 1, \\ 2x + \cos(y) = 2. \end{cases}$$

Задание № 27

На интервале $[-2\pi, 2\pi]$ определите нули функции

$$f(x) = \operatorname{ctg}(x) + bx$$

двумя методами, если $-3 \leq b \leq 3$ с шагом $\Delta b = 0, 1$.

Задание № 28

На интервале $(0, 3)$ функция $f(x) = (1 + x^2)^{-1} - 1$ задана таблицей из N равноотстоящих узлов. Используя эту таблицу, постройте интерполяционный полином. Для случаев $N = 7, 9, 11$ найдите нуль найденного полинома и сравните его с нулем исходной функции.

Задание № 29

Найдите численно на интервале $[0, 4\pi]$ все нули функции

$$f(x) = A \cos(x) + \sin(x^2),$$

считая, что параметр A изменяется в интервале $[0; 2]$ с шагом 0,2.

Задание № 30

Двумя методами определите численно корни уравнения

$$x^3 - 3x^2 - 9x + k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, 10.$$

Задание № 31

Функция $f(x) = \exp(x^{1/2})$ задана на интервале $(4, 9)$ таблицей из N равноотстоящих узлов. Для числа узлов $N = 10, 15, 20$, найдите первую, вторую и третью производные этой таблично заданной функции, значения которых сравните с их аналитическими аналогами.

Задание № 32

Найдите с точностью 0,001 значение двойного интеграла

$$J = \iint_D \exp(-x^2 - y^2) dx dy,$$

если область D есть круг $(x^2 + y^2) \leq 4$.

Задание № 33

Дана матрица A такая, что

$$\exp(A) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналитически и численно найдите: а) матрицу A ; б) матрицу $\operatorname{ch}(A)$; в) матрицу $\operatorname{sh}(A)$.

Задание № 34

Для $N = 4$ и $N = 5$ вычислите определитель матрицы A , если известно, что $A_{nm} = \min(n, m)$, $1 \leq n, m \leq N$.

Задание № 35

С помощью численных методов найдите решение уравнения

$$y'' - 2y' + y = 2 \sin(x), \quad y_0 = 0, \quad y'_0 = 0, \quad 0 \leq x \leq 4.$$

Задание № 36

С помощью метода Монте–Карло найдите нули функции $f(x) = x^2 + x + \beta$, полагая, что $-1 \leq \beta \leq 1$ и $\Delta\beta = 0,1$.

Задание № 37

Найдите численно с точностью 0,0001 значения интегралов

$$J_1 = \int_0^{\infty} (1 + x^2)^{-1} dx, \quad J_2 = \int_0^{\infty} (1 + x^3)^{-1} (1 + x^2)^{-1} dx.$$

Результаты сравните.

Задание № 38

На окружности радиуса $R = 2$ выбраны наугад и зафиксированы две точки A и B . С помощью метода Монте–Карло оцените длину L хорды, соединяющей эти точки.

Задание № 39

Для $n = 2, 3, 4$ найдите с точностью 0,001 значение интеграла

$$J_n = \int_0^n (nx - x^2)^{1/2} dx.$$

Задание № 40

С точностью 0,0001 найдите значение интеграла

$$J = \int_0^{\infty} (1 + x^3)^{-1} dx,$$

которое сравните с его аналитическим аналогом.

Задание № 41

Найдите численно решение дифференциального уравнения

$$y'' + (1 - y^2)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq X_m,$$

где $X_m = 2, 4, 6, 8, 10$, с условиями $y_0 = 0$, $y'_0 = 1$. Постройте графические зависимости.

Задание № 42

Даны две 2×2 -матрицы A и B . Постройте алгоритм решения уравнения $AX + XA^T = B$. Алгоритм проверьте численно.

Задание № 43

Даны значения аргументов x_1, x_2, x_3, x_4 и соответствующие им значения функций y_1, y_2, y_3, y_4 . Через эти 4 узла проведена парабола $P_3(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$. Определите коэффициенты интерполяционного полинома $P_3(x)$: а) аналитически; б) численно, полагая координаты узлов заданными.

Задание № 44

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла

$$J = \int_0^1 (-\ln t)^{1/2} dt.$$

Задание № 45

Используя интерполяционный полином Лагранжа с числом узлов $N = 10$, найдите с точностью 0.0001 нуль функции $y(x) = \sin(x)$ на интервале $[2, 4]$.

Задание № 46

С помощью формулы Гамильтона–Кэли найдите обратную матрицу A^{-1} , если

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

Задание № 47

Решите численно систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} \sin(y - 0.5) - x = 1.2, \\ \cos(x - 2.0) + y = 0.0. \end{cases}$$

Задание № 48

Решите аналитически и численно систему дифференциальных уравнений ($0 \leq t \leq 50\pi$)

$$\begin{cases} dx/dt = -y, & x(0) = 1.0, \\ dy/dt = x, & y(0) = 1.0 \end{cases}.$$

Значения в начальной и конечной точках сравните.

Задание № 49

С точностью 0,001 найдите значение двойного интеграла

$$J = \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy \exp(-x^2 - y^2).$$

Задание № 50

На интервале $[-3\pi/2, 3\pi/2]$ найдите с точностью 0,0001 нули функции

$$f(x) = 0.03 \operatorname{tg}(x) - 10x.$$

Задание № 51

Найдите все нули функции $f(x) = x^3 - 5x + b$, полагая, что $0 \leq b \leq 2$ и $\Delta b = 0, 1$.

Задание № 52

Для данной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 2.9 & q \\ 2.4 & 1.0 & 1.4 \\ 1.4 & 1.4 & 3.4 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2,$$

найдите матрицы $B = \sin(A)$ и $C = \cos(B)$, спектры которых сравните.

Задание № 53

Численно исследуйте СЛАУ в зависимости от значения параметра λ

$$\begin{cases} \lambda x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + \lambda x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + x_2 + \lambda x_3 = 1. \end{cases}$$

Задание № 54

Тело движется по закону $d^2x/dt^2 = \alpha t + \beta$, $\alpha, \beta = \text{const}$.

Известно, что $x(0) = 0$ и $x(T) = L$, где T и L заданы. Определите соотношение, связывающее параметры α и β , выполнение которого обеспечивает при заданном начальном условии справедливость условия на финише. Полученный аналитический результат проверьте, численно решая уравнение движения тела.

Задание № 55

Найдите все нули следующей функции комплекснозначного аргумента

$$f(z) = (z - q)^2 z^* - (z^* - q)^2 z, \quad q = 0.25; 0.50; 0.75.$$

Задание № 56

Уравнение движения первой точки ("зайца"), следующее

$$dy/dx = 2x, \quad y(0) = 0, \quad 0 \leq x \leq 10.$$

Вторая точка ("волк") всегда имеет скорость, по модулю равную V , и стартует из места: а) $(10;0)$; б) $(5;0)$. В каждый момент времени вторая точка движется по направлению на первую. Считая параметр V заданным, получите численно графики движения обеих точек. Определите, при каких значениях скорости V вторая точка сможет догнать первую.

Задание № 57

Точку массой m при $t = 0$ на высоте h бросают вдоль вертикали с начальной скоростью v_0 . В момент $t = T$ точка оказывается на нулевой высоте. Определите, при какой связи между v_0 и T это возможно. Проверьте результат численно, описав движение точки дифференциальным уравнением.

Задание № 58

Найдите значение контурного интеграла

$$J = (2\pi i)^{-1} \oint (z - 3/4)^{-1} \sin(2\pi z) dz,$$

выбрав два различных контура, охватывающих точку $z = 3/4$.

Задание № 59

Для данной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 2.7 & 0.8 & 0.9 \\ 2.8 & 0.7 & 0.3 \\ 2.5 & 1.5 & q \end{pmatrix}$$

найдите значения q , при которых матрица A имеет ранг, равный 1, 2, 3.

Задание № 60

Для $N = 4$ и $N = 5$ вычислите определитель матрицы A , если известно, что $A_{nm} = |n - m|$, $1 \leq n, m \leq N$.

Задание № 61

Найдите численно значение интеграла

$$J = \int_1^{10} (1 + x^2)^{-1} dx$$

и решение дифференциального уравнения

$$dy/dx = (1 + x^2)^{-1}, \quad y(1) = 0, \quad 1 \leq x \leq 10.$$

Полученные значения J и $y(10)$ сравните.

Задание № 62

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла

$$J = \int_0^{\pi/3} (1 - \sin^4 x)^{1/2} dx.$$

Задание № 63

Функция $f(\alpha, \beta)$ имеет следующее интегральное представление

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1 - x^2)(1 + x^2)^{-1}(1 + x^4)^{-1/2} dx.$$

Покажите численно, что $f(2, 4) = f(1/2, 1/4)$.

Задание № 64

Найдите решение системы уравнений (при $A = 3, 4, 5, 6$)

$$\begin{cases} 2x^2 + 3y^2 - 6y - A = 0, \\ 3x^2 - 3y^2 + 4x - 2 = 0. \end{cases}$$

Задание № 65

Найдите с точностью 0,001 значение интеграла

$$J = \int_{\pi/3}^{\pi/2} \frac{1}{\sin^3 t} dt.$$

Задание № 66

Определите численно корни уравнения

$$\exp(-x) = q \arcsin(x), \quad q = 0.1, 0.2, \dots, 1.0.$$

Задание № 67

Функция $f(x) = 1/\operatorname{ch}(x)$ на интервале $[-5, 5]$ представлена массивом из $N = 51$ равноотстоящих узлов. С помощью численного дифференцирования определите координаты: а) экстремума; б) точек перегиба.

Задание № 68

На интервале $(2, 3)$ функция $f(x) = \ln(x - 1, 5)$ задана таблицей из N равноотстоящих узлов. Используя эту таблицу, постройте интерполяционный полином. Для случаев $N = 7, 9, 11$ найдите нуль найденного полинома и сравните его с нулем исходной функции.

Задание № 69

Решите численно систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} \sin(y) - 2x = 2, \\ \cos(x - 1) + y = 1, 5. \end{cases}$$

Задание № 70

Для данной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0.7 & 1.6 & 0.3 \\ 1.6 & -q & 0.8 \\ 0.8 & 0.3 & 1.6 \end{pmatrix}, \quad q = -1, -2, -3,$$

найдите матрицы $B = \operatorname{arcsh}(A)$ и $\operatorname{sh}(B)$. Спектры полученных матриц сравните.

Задание № 71

Определите численно корни уравнения

$$A \exp(-x^2) = \operatorname{ch}(x), \quad A = 10, 12, \dots, 20.$$

Задание № 72

Найдите с точностью 0,001 значение двойного интеграла

$$J = \int_D \int x(1 - x^2 - y^2)^{1/2} dx dy,$$

если область D есть круг $(x^2 + y^2) \leq 1$.

Задание № 73

Методом итераций тремя способами найдите на $[-\pi/2, \pi/2]$ нули функции

$$f(x) = x^2 - x - k \operatorname{tg}(x), \quad 1 \leq k \leq 2, \quad \Delta k = 0, 2.$$

Задание № 74

С помощью численных методов найдите решение уравнения

$$y'' - 2y' + y = 2\operatorname{sh}(x), \quad y_0 = 0, \quad y'_0 = 0, \quad 0 \leq x \leq 4.$$

Задание № 75

Даны две матрицы

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где $0 \leq \alpha \leq 1$, $\Delta\alpha = 0, 2$. Получив характеристический многочлен для этих матриц, найдите матрицы A^{-1} и B^{-1} . Результат проверьте численно и прямым вычислением.

Задание № 76

Двумя методами определите численно корни уравнения

$$\ln(x) + (x + 1)^3 + k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, 10.$$

Задание № 77

Функция $f(x) = \cos(x^{1/2})$ задана на интервале $(4, 9)$ таблицей из N равноотстоящих узлов. Для числа узлов $N = 10, 15, 20$, найдите первую, вторую и третью производные этой таблично заданной функции, значения которых сравните с их аналитическими аналогами.

Задание № 78

Для данной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 2.5 & 1.0 & 1.5 \\ q & 3.0 & 1.5 \\ 1.5 & 1.5 & 3.5 \end{pmatrix}, \quad q = 5, 6, 7,$$

найдите матрицы $B = \sin(A)$ и $C = \arcsin(B)$. Спектры полученных матриц сравните.

Задание № 79

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла двумя методами

$$J = \int_0^{\pi/3} (1 - \sin^2 x)^{-1/2} dx.$$

Задание № 80

Вычислите интеграл

$$J = (8/3) \int_{-1}^1 x^4 (1 - x^2)^{-1/2} dx$$

а) аналитически; б) численно.

Задание № 81

Найдите спектр следующей матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & q & 0 & 0 \\ q & 1 & q & 0 \\ 0 & q & 1 & q \\ 0 & 0 & q & 1 \end{pmatrix}, \quad q = 0, \frac{1}{4}, \frac{2}{4}, \frac{3}{4}, 1.$$

Задание № 82

Численно найдите все матрицы, коммутирующие с матрицей

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

Задание № 83

Решите численно систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} \cos(y - 1) + x = 1, 0, \\ \sin(x + 1) + 2y = 1, 6. \end{cases}$$

Задание № 84

Численно найдите значение интеграла

$$J(k) = \int_0^{\pi/2} (1 - k^2 \sin^2 x)^{-1/2} dx$$

для $0 \leq k \leq 0,9$ при $\Delta k = 0,1$.

Задание № 85

Для данной матрицы найдите значения параметра q , при которых она имеет ранг, равный 1, 2 и 3.

$$A = \begin{pmatrix} 6 & q & -1 & 2 \\ 7 & -1 & 1 & 5 \\ 8 & 10 & -6 & 1 \end{pmatrix}.$$

Задание № 86

Функция $y(x)$ имеет следующее интегральное представление

$$y(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt.$$

В аргументном интервале $[0,3]$ с шагом $\Delta x = 0.1$ постройте числовой алгоритм, позволяющий найти значения функции $y(x)$.

Задание № 87

О функции $y(x)$ известно, что

$$\text{а) } \int_{-\infty}^{\infty} y(x) dx = 1; \quad \text{б) } \sigma^2 dy/dx + xy = 0.$$

Для $\sigma = 1$ и $\sigma = 2$ аналитически и численно определите функцию $y(x)$ на интервале $[-5,5]$.

Задание № 88

На отрезке $[0,2]$ решите численно уравнение

$$y'' + 0.1y' + (1 + Ax/10)y = 0$$

с условиями $y(0) = 1, dy(0)/dx = 2$. Для $0 \leq A \leq 10, \Delta A = 0,5$ постройте зависимость $y(2)$ как функцию A .

Задание № 89

Вычислите интеграл

$$J(a, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

с точностью 0,001 для случаев: $a = 0$, $a = 1$ и $\sigma = 0.1$, $\sigma = 1$.

Задание № 90

Для данной матрицы найдите значения параметра q , при которых она имеет ранг, равный 1, 2 и 3,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & q & -1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 & 5 \\ 1 & 10 & -6 & 1 \end{pmatrix}.$$

Задание № 91

Численно найдите все матрицы, коммутирующие с матрицей

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

Задание № 92

Дан квадрат со стороной $L = 2$. Проведены четыре окружности радиусом $R = L$ каждая с центрами, расположенными в вершинах квадрата. Найдите площадь геометрического места точек, общего для всех четырех окружностей: а) аналитически; б) методом Монте-Карло.

Задание № 93

На интервале $[1,2]$ решите аналитически и численно систему

$$\begin{cases} dy/dx = (z - y), & y(1) = 1, \\ dz/dx = (z + y), & z(1) = 1. \end{cases}$$

Задание № 94

Даны две матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Найдите численно и аналитически: а) $\exp A$, $\sin(\pi A)$, $\cos(\pi A)$; б) то же для матрицы B .

Задание № 95

Для функции

$$f(x; q) = x^{x^q} - q, \quad 0 < q < 1,$$

известно, что на интервале $[0,1]$ она имеет вещественный нуль кратности 2. Используя это условие, найдите с точностью 0,0001 отвечающее ему значение параметра q .

Задание № 96

Дана матрица

$$A = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix}.$$

Для параметров $\varphi = \pi/6$ и $\varphi = \pi/4$ найдите A^{100} : а) с помощью характеристического многочлена; б) численно. Результаты сравните.

Задание № 97

Численно найдите все матрицы, коммутирующие с матрицей

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

Задание № 98

С помощью численного интегрирования и метода дихотомии решите уравнение

$$\int_0^x \exp(t) dt = qx, \quad q = 1, 2, 3, 4.$$

Задание № 99

С помощью формулы Гамильтона–Кэли найдите обратную матрицу A^{-1} , если

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

Задание № 100

Матрица размером (5×5) заполнена или нулями, или единицами. Численно найдите матрицу такого типа, определитель у которой максимален.

Задание № 101

Для значений параметра $x = 1, 2, 3, 4, 5$ вычислите двумя способами с точностью 0,0001 интеграл

$$J = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

Задание № 102

Функция $f(x) = \exp(-x^2)$ на интервале $[-5, 5]$ представлена массивом из $N = 21$ равноотстоящих узлов. С помощью численного дифференцирования определите координаты: а) экстремума; б) точек перегиба.

Задание № 103

Функция $f(\alpha, \beta)$ имеет следующее интегральное представление

$$f(\alpha, \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} (1-x^2)(1+x^2)^{-1}(1+x^4)^{-1/2} dx.$$

Численно проверьте, что $f(1, 2) = f(-2, -1)$.

Задание № 104

Численно исследуйте СЛАУ в зависимости от значения параметра λ

$$\begin{cases} (\lambda + 1)x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 + (\lambda + 1)x_2 + x_3 = \lambda, \\ x_1 + x_2 + (\lambda + 1)x_3 = \lambda^2. \end{cases}$$

Задание № 105

На интервале $[0, 5]$ функция $x(t)$ задана дифференциальным уравнением

$$\frac{d}{dt}x = (1+t)x + 1 - 3t^3 + t^2, \quad x(0) = 0.$$

Тремя различными численными методами найдите решение.

Задание № 106

С помощью формулы Гамильтона–Кэли найдите обратную матрицу A^{-1} , если

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

Задание № 107

Найдите численно решение дифференциального уравнения

$$Ay''' + y'' + 2y' + y = \exp(2t),$$

где $A = 1, 2$; $0 \leq t \leq 1$, с условиями $y_0 = 0.1$, $y'_0 = 0$, $y''_0 = 0$. Численное решение сравните с его аналитическим аналогом.

Задание № 108

Для $N = 4$ и $N = 5$ вычислите определитель матрицы A , если известно, что $A_{nm} = \max(n, m)$, $1 \leq n, m \leq N$.

Задание № 109

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла

$$J = \int_0^{\pi} e^{-x} \sin^2 x dx.$$

Задание № 110

Функция $f(x) = (1 + x^2)^{-1}$ на интервале $[-5, 5]$ представлена массивом из $N = 51$ равноотстоящих узлов. С помощью численного дифференцирования определите координаты: а) экстремума; б) точек перегиба.

Задание № 111

На интервале $[0, 2]$ численно найдите все действительные нули функции

$$f(x) = x^{0,9} - 0,9.$$

Задание № 112

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла

$$J = \int_0^1 \ln[\operatorname{tg}(x/\pi)] dx.$$

Задание № 113

Методом Монте–Карло найдите площадь фигуры, ограниченной кривыми $y = \exp(-x^2)$, $y = -\exp(-x^2)$, $x = \exp(-y^2)$, $x = -\exp(-y^2)$. Полученный результат сравните с его аналитическим аналогом.

Задание № 114

Тремя wybranными методами определите численно корни уравнения

$$2x + \ln(2x + 3) = A, \quad A = 0.1, 0.2, \dots, 1.0.$$

Задание № 115

Найдите с точностью 10^{-4} значение интеграла

$$J = \int_0^{\pi} e^{-x} \cos(\pi x/4) dx.$$

Задание № 116

Двумя методами определите численно корни уравнения

$$\exp(-x^2) = Ax/\operatorname{ch}(x), \quad A = 10, 12, \dots, 20.$$

Задание № 117

С помощью численных методов найдите решение уравнения

$$xy' + y = xy^3, \quad y_0 = 1, \quad 0 \leq x \leq 5.$$

Задание № 118

Найдите численно решение дифференциального уравнения

$$Ay'' + (1 - y^2)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

где $A = 2, 4, 6, 8, 10$, с условиями $y_0 = 0$, $y'_0 = 1$. Постройте графические зависимости.

Задание № 119

С помощью формулы Гамильтона–Кэли найдите обратную матрицу A^{-1} , если

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

Задание № 120

Дан куб со стороной L . Используя метод Монте–Карло, постройте алгоритм, позволяющий оценить длину главной диагонали куба.

Задание № 121

Найдите численно вещественные корни уравнения

$$x^{-1} + 1 - \exp(-x^{-1}) = A,$$

где $A = -0.9, -0.7, \dots, 0.8, 0.9$.

Задание № 122

Найдите численно решение дифференциального уравнения

$$Ay''' + y'' + 2y' + y = (1 + t^2)^{-1},$$

где $A = 1, 2$; $0 \leq t \leq 1$, с условиями $y_0'' = 0.1$, $y_0' = 0$, $y_0 = 0$. Численное решение сравните с его аналитическим аналогом.

Задание № 124

На интервале $(-2, 2)$ функция $f(x) = \exp(-x) - 2$ задана таблицей из N равноотстоящих узлов. Используя эту таблицу, постройте интерполяционный полином. Для случаев $N = 7, 9, 11$ найдите нуль найденного полинома и сравните его с нулем исходной функции.

Задание № 124

Функция $f(x) = \sin(x^{1/2})$ задана на интервале $(4, 9)$ таблицей из N равноотстоящих узлов. Для числа узлов $N = 10, 15, 20$, найдите первую, вторую и третью производные этой таблично заданной функции, значения которых сравните с их аналитическими аналогами.

Задание № 125

Найдите с точностью 0,001 значение двойного интеграла

$$J = \iint_D x \, dx \, dy,$$

если область D есть круг $(x^2 + y^2 - 2x) \leq 0$.

Задание № 126

Дан вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ и матрица A с элементами

$$A_{nm} = x_n x_m, \quad 1 \leq n, m \leq N.$$

Для $N = 6$ и выбранных трех произвольных векторов X численно определите $\text{rank}(A)$.

П.11. Фонд заданий для курсовой работы

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КУРСОВЫХ РАБОТ ПО ДИСЦИПЛИНЕ "ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ"

Настоящие методические указания включают сборник заданий для курсовых работ по дисциплине "Численные методы".

Цель данных методических указаний — выработать навыки по построению типичных алгоритмов решения основных задач численного анализа, реализации вычислительных заданий на ЭВМ и оформлению научного документа.

1 ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Отчет о курсовой работе является документом, в котором излагаются исчерпывающие сведения о выполненной работе. Материал, отбираемый для включения в отчет, должен быть обработан и систематизирован.

Общими требованиями к отчету являются :

- четкость построения;
- логическая последовательность изложения материала;
- краткость и четкость формулировок;
- конкретность результатов работы;
- доказательность выводов.

Форма представления и оформления документа в целом должны соответствовать принятым стандартам.

2. СТРУКТУРА ОТЧЕТА

Отчет о курсовой работе должен включать в указанной ниже последовательности :

- Титульный лист;
- Реферат (Аннотация);
- Задание;
- Содержание (Оглавление);
- Основная часть;
- Список литературы;
- Приложения.

Титульный лист должен быть исполнен по стандартной форме.

В Реферате (Аннотации) должны быть кратко изложены основные сведения о проведенной работе.

Основная часть отчета включает разделы:

- Введение;
- Аналитический обзор;
- Обоснование выбранного направления;
- Методика выполнения работы;
- Результаты работы и их обсуждение;
- Заключение (Выводы).

Раздел "Введение" должен быть посвящен краткой характеристике состояния проблемы, которой посвящена работа, а также цели работы.

В разделе "Аналитический обзор" необходимо систематизированно отразить состояние вопроса, которому посвящена данная работа.

В разделе "Обоснование выбранного направления" должно быть дано искомое обоснование выбранного направления с учетом конкретных условий проведения курсовой работы.

В разделе "Методика выполнения работы" необходимо подробно изложить использованные методы с обоснованием их выбора. Если в работе применялись общепринятые методы, то их описание излишне подробно излагать не следует. В этом разделе необходимы ссылки на соответствующие источники документальной информации. Вместе с тем, текст этого раздела должен показать уверенное владение необходимыми численными методами.

В разделе "Результаты работы" приводятся окончательные результаты (в цифровой и графической форме) и типичные промежуточные, дающие правильное представление о их качестве, точности и воспроизводимости. При обсуждении результатов необходимо провести сопоставление их с имеющимися известными данными.

"Заключение" должно содержать краткое изложение результатов работы и их оценку. В конце заключения следует указать, чем завершена работа: получением научных данных, разработкой научных методов и принципов исследования, получением количественных и качественных характеристик.

В "Список литературы" включают все использованные источники, которые следует располагать в порядке появления ссылок в тексте.

В "Приложения" следует включать вспомогательные материалы, которые при включении их в основную часть отчета загромождают текст. К вспомогательным материалам относятся:

- математические выкладки,
- таблицы и графики вспомогательных цифровых данных,
- распечатки числовых данных,
- листинги текстов программ.

3. СОДЕРЖАНИЕ ЗАДАНИЙ

Задание № 1

С помощью численных процедур нахождения нулей заданной функции и определения значения однократного интеграла найдите с точностью 0.0001 первые три нуля функции

$$f(z) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(t) \exp[z \cos(t)] dt.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 2

Постройте численный алгоритм, позволяющий находить заданную функцию от матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.3 & 0.6 \\ 0.9 & q & -1.2 \\ 1.0 & 0.6 & q \end{pmatrix}.$$

На основе алгоритма убедитесь в справедливости матричного тождества $\operatorname{tg}(2A) = 2\operatorname{tg}(A)[E - \operatorname{tg}(A)]$ при значениях параметра q в интервале $[0.2, 1.4]$ с шагом табулирования 0,1.

Задание № 3

Ортогональные многочлены Чебышева $T_n(x) = f(x)$ являются решениями обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$(1 - x^2)f''(x) - xf'(x) + n^2f(x) = 0.$$

Для $n = 1, 2, 3$ постройте численный алгоритм и найдите значения функции $f(x)$ на интервале $(0.0, 1.0)$ с шагом табулирования 0,02. Сравните найденные значения с результатом вычисления многочленов Чебышева с помощью явного выражения $T_n(x) = \cos[n \arccos(x)]$. Результаты оформите графически.

Задание № 4

Для заданной квадратной матрицы A известно, что она удовлетворяет уравнению $A = E + A^{-1}$, где E — единичная матрица.

Постройте численную процедуру, позволяющую находить заданное число N таких матриц, выбрав размерность K матрицы равной $K = 2, 3$ и $K = 4$.

Задание № 5

Для заданной матрицы B вычислите $g_1 = \exp \operatorname{Sp}[\ln(B)]$ и $g_2 = \det(B)$. Значения найденных величин сравните для матриц размерности $N = 2, 3$ и $N = 4$.

Задание № 6

Напишите программу нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных. Воспользуйтесь конечно-разностным методом сеток.

С помощью программы найдите в полуполосе $0 \leq t \leq t_{\max}$, $0 \leq x \leq x_{\max}$ решение уравнения

$$\frac{\partial T}{\partial t} = q \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

с начальным условием $T(x, 0) = [(x - a/2)^2 + a^2]^{-1}$.

Исходные данные для программы:

x_0, x_{\max} — левая и правая границы пространственного слоя;

t_0, t_{\max} — исходный и конечный временные моменты;

N — число пространственных узлов;

a, q — параметры задачи,

$T(x_0, t) = \varphi(t)$ и $T(x_{\max}, t) = \xi(t)$ — граничные условия.

Результат работы программы — массив, содержащий значения искомой функции. Результаты оформите графически.

Задание № 7

Постройте численный алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) размерности $N = 4$ и $N = 5$, основанный на трех реализациях метода Зейделя. Задавшись набором коэффициентов в СЛАУ, сравните численные решения по числу итераций, оказавшихся необходимыми для достижения заданной точности.

Задание № 8

Постройте численный алгоритм, позволяющий находить заданную функцию от заданной матрицы

$$A = \begin{pmatrix} q & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 1.0 \\ 0.5 & 1.0 & q \end{pmatrix}.$$

На основе построенного алгоритма проверьте справедливость матричного тождества $\sin^2 A + \cos^2 A = E$ при значениях параметра q в интервале $(5.0, 10.0)$ с шагом табулирования $0,25$.

Задание № 9

С точностью 0.001 найдите такие значения параметра α , что интеграл

$$J(\alpha) = \pi^{-1} \operatorname{ch}(\pi) \int_0^{\alpha} \frac{\cos(x)}{\operatorname{ch}(x/2)} dx$$

примет значения, равные $0.1n$, где $n = 1, 2, 3$ и 4 .

Задание № 10

Используя метод Монте–Карло, найдите объем области трехмерного евклидова пространства, ограниченного следующими поверхностями:

$$x^2 + y^2 = 16 \quad \text{и} \quad x^2 + z^2 = 16qz,$$

где $q = 1, 2, 3, 4$. Полученный результат сравните с его аналогом, найденным аналитически. Результаты оформите графически.

Задание № 11

Для уравнения Шредингера относительно функции $U(x, t)$

$$\frac{1}{i} \frac{\partial U}{\partial t} = U + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

(i — мнимая единица) с начальным условием $U(x, 0) = \exp(-4(x - 0.5)^2)$ постройте конечно–разностный алгоритм нахождения решения.

С помощью созданной на основе алгоритма программы найдите значения функции $P(x, t) = |U(x, t)|^2$. Результаты оформите графически.

Задание № 12

Ортогональные многочлены Чебышева $U_n(x) = f(x)$ являются решениями обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$(1 - x^2)f''(x) - xf'(x) + n^2f(x) = 0.$$

Для $n = 1, 2, 3$ постройте численный алгоритм и найдите значения функции $f(x)$ на интервале $(0.0, 1.0)$ с шагом табулирования $0,02$. Сравните найденные значения с результатом вычисления многочленов Чебышева с помощью явного выражения $U_n(x) = \sin[n \arccos(x)]$. Результаты оформите графически.

Задание № 13

Для заданной матрицы A размером N ($N = 4$ и $N = 8$) найдите обратную матрицу $B = A^{-1}$ двумя способами: а) методом Гаусса; б) на основе клеточного разбиения.

Пусть $C = AB$ и E — единичная матрица. С помощью критерия

$$J_N = \left(\sum_{n,m=1}^N (C_{nm} - E_{nm})^2 \right)^{1/2}$$

сравните оба указанных метода нахождения обратной матрицы.

Задание № 14

Пространственное тело ограничено снизу плоскостью $z = 0$, а сверху — поверхностью, задаваемой функцией $z = \exp(-x^2 - y^2)$. Это тело разрезано плоскостями: $x = -0.5$, $x = 0.0$, $x = 0.5$.

С помощью метода Монте–Карло оцените объем получившей пространственной фигуры. Результаты оформите графически.

Задание № 15

Предложите два метода, на основе которых исследуйте точность процедуры нахождения значения определенных интегралов на следующем примере

$$J(r) = \int_0^{\infty} \exp(-x^2) \cos(rx) dx,$$

где $0 \leq r \leq 10$ с шагом 0,5. Результаты оформите графически.

Задание № 16

Для полинома заданной степени N напишите численную процедуру определения по набору его комплексных нулей набор его коэффициентов. Задав численно набор нулей, степень и точность, найдите набор коэффициентов полинома.

Задание № 17

Логарифмическая производная гамма–функции задается выражением $\Psi(x) = \frac{d}{dx} \ln[\Gamma(x)]$, а в свою очередь гамма–функция $\Gamma(x)$ определяется интегральным представлением

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

Постройте численный алгоритм и найдите значения $\Gamma(x)$ в аргументном интервале (1.0,5.0) с шагом табулирования 0.25. После этого, с помощью алгоритма численного дифференцирования таблично заданной функции, найдите для тех же значений аргумента значения функции $\Psi(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 18

С помощью процедуры нахождения значения определенных интегралов найдите с точностью 0.001 значение интеграла

$$J = \iint_D (x^2 + y^2) \exp(2x^2 - 2y^2 - 2) dx dy,$$

где область интегрирования D определяется условиями

$$-1 \leq xy \leq 1, \quad (x^2 - y^2) \leq 1, \quad x \geq 0.$$

Задание № 19

Исследуйте точность алгоритма нахождения значений несобственных интегралов на следующем примере

$$J(r) = \int_0^{\infty} \exp(-x) \cos^2(rx) dx,$$

где $(r = 1, 2, \dots, 10)$. Результаты оформите графически.

Задание № 20

Для матрицы A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

найдите невырожденную матрицу T и диагональную матрицу B такие, что справедливо соотношение $B = T^{-1}AT$.

Задание № 21

Интегралы Френеля $C(x)$ и $S(x)$ определяются выражениями

$$C(x) = \int_0^x \cos(t^2) dt, \quad S(x) = \int_0^x \sin(t^2) dt.$$

Постройте численный алгоритм нахождения значений интегралов Френеля. Для аргументного интервала $(0.0, 15.0)$ с шагом табулирования 0.10 найдите значения указанных функций с точностью 0.0001. Постройте графики для интегралов Френеля, а также график их параметрической зависимости (спираль Корню).

Задание № 22

Многочлены Чебышева–Эрмита определяются формулами

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) (d/dx)^n \exp(-x^2), \quad n = 1, 2, \dots$$

Для выбранных n и m численно проверьте, что если $n \neq m$, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x) \exp(-x^2) dx = 0.$$

Задание № 23

Для $k = 1, 2, 3, \dots, 20$ определите корни уравнения $z^5 - 12z^2 + 14 = 0$, содержащиеся внутри окружности $|z| = 0,1k$.

Результаты оформите графически.

Задание № 24

Для полинома заданной степени N напишите численную процедуру определения по набору его комплексных коэффициентов набор его нулей. Задав численно набор коэффициентов, степень и точность, найдите набор нулей полинома для $N = 2, 3, 4, 5, 6$.

Задание № 25

Функция Бесселя $J_0(x)$ определяется выражением

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos[x \cos(t)] dt.$$

Постройте процедуры численного интегрирования и нахождения функции от заданной матрицы. С их помощью найдите значения элементов матрицы $J_0(A)$, где

$$A = \begin{pmatrix} -0.4 & 0.1 \\ 0.1 & 0.2 \end{pmatrix}.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 26

Для заданной матрицы A размерностью N вычислите $g_1 = \det[\exp(A)]$, $g_2 = \exp[\text{Sp}(A)]$.

Значения найденных величин сравните для $N = 2, 3$ и 4 .

Результаты оформите графически.

Задание № 27

Постройте численную процедуру нахождения решений системы обыкновенных дифференциальных уравнений. С её помощью исследуйте зависимость от величины

шага h точности решения системы дифференциальных уравнений на интервале $[0, 1]$

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} - 3 \frac{dy(x)}{dx} = \exp(5x),$$

где $y'_0 = 2$, $y_0 = q$, $q = 0, -1, -2, -3, -4$.

Значение величины $y(1)$ сравните с её аналогом, найденным аналитически. Результаты оформите графически.

Задание № 28

С помощью численных процедур нахождения нулей заданной функции и определения значения однократного интеграла найдите с точностью 0,0001 первые три нуля функции

$$f_n(x) = \int_0^{\pi} \cos[x \sin(t) - nt] dt$$

для $n = 0, 1, 2$ и 3 . Результаты оформите графически.

Задание № 29

Постройте численную процедуру нахождения решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений. С её помощью найдите на интервале $[0, 8]$ решение следующего дифференциального уравнения:

$$d^4y(x)/dx^4 = -16y(x),$$

где $y_0 = 0$, $y'_0 = 0$, $y''_0 = 0$, а также $y'''_0 = -1, 0$ и 1 .

Численное значение решения сравните с решением, полученным аналитически. Результаты оформите графически.

Задание № 30

Пусть функция $\eta = \eta(b)$ определяется как минимальный корень уравнения $b \exp(-x) = \sin(x)$, $x > 0$, найденный с точностью ε .

Исследуйте численно зависимость $\eta(b)$ в интервале $0 \leq b \leq 100$ для $\varepsilon = 0.010$, $\varepsilon = 0.005$, и $\varepsilon = 0.001$. Результаты оформите графически.

Задание № 31

С помощью численных процедур решения обыкновенных дифференциальных уравнений и нахождения нулей заданной функции найдите на интервале $[0.1, 0.5]$ решение уравнения

$$\frac{dy(x)}{dx} = \frac{y^2(x)}{1 + xq(x)}, \quad y(0.1) = 0.1,$$

где $q(x)$ — функция, значение которой равно числу действительных корней уравнения $\operatorname{tg}(50t) = 10t$ на интервале $[-x, x]$. Результаты оформите графически.

Задание № 32

Постройте числовой алгоритм, с помощью которого с точностью 0.0001 сравните значения следующих интегралов

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin^2(x)}{x^2} dx = \int_0^{\infty} \frac{\sin(x)}{x} dx.$$

Задание № 33

Для квадратной матрицы A размерности N напишите численную процедуру вычисления $\exp(A)$ двумя способами. Задав элементы матрицы A , вычислите дважды $\exp(A)$. Результаты сравните для случая $N = 2, 3$ и 4 .

Задание № 34

Докажите аналитически и проверьте численно (с точностью 0,001) следующее равенство

$$\int_0^{\infty} \exp(-\alpha t) J_0(\beta t) dt = (\alpha^2 + \beta^2)^{-1/2},$$

где

$$J_0(x) = \pi^{-1} \int_0^{\pi} \cos[x \sin(\varphi)] d\varphi$$

— функция Бесселя нулевого индекса.

Задание № 35

Определите с точностью 0.0001 все вещественные корни уравнения

$$2 \exp(2 - x^2)(x^6 - 3x^4 + 5x^2 - 1) - 2e - 5 = 0.$$

Задание № 36

Функция $y = y(x)$ определяется уравнением

$$x^y = \varepsilon y^x, \quad 0 < \varepsilon < 1.$$

Для выбранного значения ε и выбранного аргументного интервала и шага Δx в нем постройте таблицу значений функции $y(x)$ и её производной $y'(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 37

Функция $f(x)$ определяется выражением

$$f(x) = \int_0^{\infty} \frac{1}{1+t^2} \frac{1}{1+t^x} dt.$$

Постройте численный алгоритм вычисления значений функции $f(x)$. Для аргументного интервала $(-4.0, 4.0)$ с шагом табулирования 0.5 найдите значения функции $f(x)$ и её производной с точностью 0,0001. Результаты оформите графически.

Задание № 38

С помощью численных процедур решения обыкновенных дифференциальных уравнений и нахождения нулей заданной функции найдите на интервале $[0.1, 1.5]$ решение уравнения

$$dy(x)/dx = y(x)/[x + q(x)],$$

с начальным условием $y(0.1) = 0.1$, где $q(x)$ — функция, значение которой равно числу действительных корней уравнения $\operatorname{ctg}(5t) = 10t$ на интервале $[0, x]$. Результаты оформите графически.

Задание № 39

Функция $f(x)$ известна и задана на интервале $[\alpha, \beta]$. Задано количество N равноотстоящих узлов x , по значениям которых найдены соответствующие значения функций f .

Постройте численный алгоритм, позволяющий найти по этим значениям интерполяционный многочлен Лагранжа $P_N(x)$. Для $\alpha = 1$, $\beta = 2$ и $N = (5, 10, 15)$ изучите погрешность метода. Определите численно максимум погрешности на интервале $[\alpha, \beta]$, если: а) $f(x) = \exp(x)$, б) $f(x) = \sin(x)$, в) $f(x) = 1/x$. Результаты оформите графически.

Задание № 40

Для заданных матриц A , B и C размерностью N каждая найдите численно решение X следующего матричного уравнения: $AXB + X = C$. Исследуйте погрешность решения для $N = 2, 3, 4$.

Задание № 41

В выбранном аргументном интервале численно и аналитически найдите вторую производную $\varphi''(x)$ функции

$$\varphi(x) = h^{-2} \int_0^h \int_0^h f(x + \xi + \eta) d\xi d\eta,$$

для заданного параметра h и случаев $f(t) = \cos(t)$ и $f(t) = \sin(t)$.

Задание № 42

Численно найдите набор собственных чисел и собственных векторов следующей матрицы ($s = 0, 1, 2, 3, 4$)

$$Q = \begin{pmatrix} s & 1 & s \\ 1 & s & 1 \\ s & 1 & s \end{pmatrix}$$

двумя способами: а) определением нулей характеристического многочлена матрицы Q ; б) определением наибольшего по модулю собственного значения. Результаты сравните.

Задание № 43

Для $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ определите с достаточной точностью значения x_k , для которых будет справедливо $F(x_k) = 1 - 10^{-k}$, где

$$F(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-x}^x \exp(-0.5t^2) dt.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 44

Используя метод Монте–Карло, найдите объем области трехмерного евклидова пространства, ограниченного следующими поверхностями:

$$x^2 + y^2 = 4qy, \quad x^2 + z^2 = 4qz, \quad q = 1, 2, 3, 4.$$

Полученный результат сравните с его аналогом, найденным аналитически. Результаты оформите графически.

Задание № 45

Для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 5 & 4 & 2 \\ 4 & 5 & 1 \end{pmatrix}$$

численно проверьте, что каждое собственное число $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ этой матрицы лежит по крайней мере в одной из областей на z -плоскости

$$|z - A_{jj}| = \sum_{k=1}^3 |A_{jk}|, \quad j = 1, 2, 3.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 46

В точках $\lambda = 0, 1, 2$ найдите численно первые 6 производных функции

$$f(\lambda) = \exp(-\sqrt{1+2\lambda}).$$

Найденные значения сравните с их аналитическими аналогами.

Задание № 47

Пусть заданы матрицы A и B размерностью N каждая. Пусть теперь в СЛАУ $AX = B$ размерностью N каждый матричный элемент A_{nm} матрицы системы задан с абсолютной погрешностью α_{nm} .

Исследуйте влияние этих погрешностей на решение СЛАУ, найденное с помощью метода исключения Гаусса, для $N = 3$ и $N = 4$, рассмотрев при этом отдельно случаи, когда собственные числа матрицы системы кратны.

Задание № 48

Рассмотрите систему дифференциальных уравнений ($0 \leq t \leq 100$)

$$\begin{cases} dX/dt = 2X - bXY, \\ dY/dt = -Y + bXY. \end{cases}$$

Исследуйте заданную систему при $b = 0.1, 0.2, 0.5, 1.0$ и найдите такие начальные условия $X(0)$ и $Y(0)$, для которых: а) решение системы имеет периодический характер; б) решение системы имеет монотонный характер. Результаты оформите графически.

Задание № 49

Для матрицы A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} 1.5 & 6.6 & 1.9 & 0.0 \\ 1.0 & s & 0.3 & 0.1 \\ 2.8 & 2.2 & 4.3 & 0.8 \\ 4.6 & 4.8 & 3.7 & s \end{pmatrix}$$

с помощью созданного численного алгоритма убедитесь в справедливости теоремы Гамильтона–Кэли для случаев $s = 3, 4, 5, 6$ и 7 .

Задание № 50

С помощью процедуры нахождения значения определенных интегралов вычислите с точностью 0.001 при $r = -0.5, 0.0, 0.5$

$$J = \frac{2}{\pi\sqrt{1-r^2}} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2 - 2rxy + y^2}{2(1-r^2)}\right) dx dy.$$

Задание № 51

Полный эллиптический интеграл связан с функцией

$$f(x) = \int_0^{\pi/2} [1 - x^2 \sin^2(\varphi)]^{1/2} d\varphi.$$

Для интервала $0 \leq x \leq 1$ с шагом $\Delta x = 0,05$ численно проверьте, что

$$f''(x) + x^{-1}f'(x) + (1 - x^2)^{-1}f(x) = 0.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 52

Используя метод Монте–Карло, найдите объем области четырехмерного евклидова пространства, ограниченного следующими поверхностями:

$$0 \leq x_1 \leq 1, \quad 0 \leq x_2 \leq 1, \quad 0 \leq x_3 \leq 1, \quad 0 \leq (x_1 + x_2 + x_3 + x_4) \leq 1.$$

Полученный результат сравните с его аналогом, найденным аналитически. Результаты оформите графически.

Задание № 53

Численно найдите набор собственных чисел и собственных векторов следующей матрицы

$$Q = \begin{pmatrix} 3 & 1 & q \\ 3 & q & 2 \\ q & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad q = 1, 2, 3,$$

двумя способами: а) определением нулей характеристического полинома матрицы Q ; б) определением наибольшего по модулю собственного значения. Результаты сравните.

Задание № 54

С точностью 0.001 найдите такие значения параметра α , что функция

$$f(\alpha) = 2\alpha \exp(-\alpha^2) \int_0^{\alpha} \exp(t^2) dt$$

примет значения, равные n , где $n = 1, 2, \dots, 7, 8$. Результаты оформите графически.

Задание № 55

С точностью 0,001 определите, для каких значений параметра α интеграл

$$J(\alpha) = (15/\pi^2) \int_0^\alpha x^3 [\exp(x) - 1]^{-1} dx$$

примет значение, равное 0.1, 0.2, 0.3. Результаты оформите графически.

Задание № 56

Дана матрица A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} n\mu & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & n\mu & 0 & -\mu \\ \mu & 0 & n\mu & 0 \\ 0 & \mu & 0 & n\mu \end{pmatrix}.$$

Численно и аналитически определите её спектр для случаев $n = 0, 1, 2, 3$ и $\mu = 1, 2$.

Задание № 57

Для матрицы A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} 1.5 & 6.6 & 1.9 & 0.0 \\ 1.0 & 9.1 & 0.3 & 0.1 \\ 2.8 & 2.2 & 4.3 & 0.8 \\ 4.6 & 4.8 & 3.7 & q \end{pmatrix}$$

с помощью созданного численного алгоритма убедитесь в справедливости теоремы Гамильтона–Кэли для случаев $q = 3, 4, 5, 6$.

Задание № 58

Напишите программу нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных. Воспользуйтесь конечно-разностным методом сеток. С помощью программы найдите в полуполосе $0 \leq t \leq t_{\max}$, $-x_{\max} \leq x \leq x_{\max}$ решение уравнения

$$T_t = qT^3 + T_{xx}$$

с начальным условием $T(x, 0) = \exp(-\alpha x^2)$.

Исходные данные для программы:

x_{\max} — правая граница пространственного слоя;

t_0, t_{\max} — исходный и конечный временные моменты;

α, q — параметры задачи,

$T(x_0, t) = \varphi(t)$ и $T(x_{\max}, t) = \psi(t)$ — граничные условия.

Результат работы программы — массив, содержащий значения искомой функции. Результаты оформите графически.

Задание № 59

Для матрицы A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 1.0 & 2.8 & z \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 2.8 \\ 2.8 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ z & 2.8 & 1.0 & 1.0 \end{pmatrix}$$

с помощью созданного численного алгоритма, основанного на теореме Гамильтона–Кэли, найдите обратную матрицу для случаев $z = 3, 4, 5$.

Задание № 60

Непрерывная функция $y = y(x)$ определяется как решение уравнения

$$y - \varepsilon \sin(y) = x, \quad 0 < \varepsilon < 1.$$

Для выбранного значения ε и выбранного аргументного интервала и шага Δx в нем постройте таблицу значений функции $y(x)$ и её производной $y'(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 61

Пусть A — матрица с элементами ($n = 1, 2, \dots, N$)

$$A_{n,n} = 1, \quad A_{1,N} = A_{N,1} = q, \quad A_{n,n+1} = A_{n+1,n} = q,$$

остальные матричные элементы равны нулю.

Для случаев $N = 6$ и $q = \pm 0.5$ найдите спектр матрицы A . Найденные значения собственных чисел проверьте, сопоставив их произведение со значением определителя исходной матрицы.

Задание № 62

Функции $f(x)$ и $q(x)$ определяются на интервале $[0,1]$ уравнениями

$$\begin{cases} f'(x) = x^{-1/2}q(x), & f(0) = 0, \\ q'(x) = -x^{-1/2}q(x), & q(0) = 1. \end{cases}$$

С помощью численной процедуры нахождения решений системы обыкновенных дифференциальных уравнений найдите функции $f(x)$ и $q(x)$ в указанном интервале с шагом табулирования 0,05. Результаты оформите графически.

Задание № 63

Численно и аналитически исследуйте на интервале $(0, 10)$ решения дифференциального уравнения

$$d^4 z / dx^4 = \sin(x) - qx$$

при следующих начальных условиях: $z(0) = 0.0$, $z' = 0.0$, $z''(0) = 0.0$, $z'''(0) = 0.2$ и при следующих значениях параметра: $q = (0.0, 0.5, 1.0, 1.5)$. Результаты оформите графически.

Задание № 64

Функция $y = y(x)$ определяется уравнением

$$\ln(x^2 + y^2)^{1/2} = \eta \operatorname{arctg}(y/x), \quad 0 < \eta < 1.$$

Для выбранного значения η и выбранного аргументного интервала и шага Δx в нем постройте таблицу значений функции $y(x)$ и её производной $y'(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 65

Даны две кривые: парабола $y = \alpha x^2 + \beta$ и эллипс $x^2 + y^2 = 5$. Численно и аналитически найдите значения коэффициентов параболы, для которых: а) обе кривые не пересекаются; б) обе кривые пересекаются; в) обе кривые касаются. Результаты оформите графически.

Задание № 66

С помощью процедур нахождения решения обыкновенного дифференциального уравнения и вычисления значения определенного интеграла: а) найдите на интервале $[2, b]$ решение уравнения

$$y'(x) = x^3/(1 + x^4), \quad y(2) = 0;$$

б) значение интеграла

$$J = \int_2^b t^3(1 + t^4)^{-1} dt.$$

Найденные с точностью 0.0001 значения величин $y(b)$ и J сравните для случаев $b = 10, 20, 30, 40$.

Задание № 67

В выбранном аргументном интервале численно и аналитически найдите вторую производную $\varphi''(x)$ функции

$$\varphi(x) = \int_0^x (x + t) f(t) dt,$$

если $f(t) = \exp(-t)$, $f(t) = \exp(-t^2)$ и $f(t) = \exp(-t^3)$.

Задание № 68

Кривая Q задана параметрически при $0 \leq t \leq 2\pi$ выражениями

$$\begin{cases} x(t) = \alpha \cos^2(t) + \beta \cos(t), \\ y(t) = \alpha \cos(t) \sin(t) + \beta \sin(t). \end{cases}$$

Для случаев: 1) $\alpha = 2$, $\beta = 3$, $\gamma = -1$; 2) $\alpha = 3$, $\beta = 2$, $\gamma = 0.5$; с помощью численной процедуры нахождения нулей функции найдите все точки пересечения кривой Q с прямой $x = \gamma$. Результаты оформите графически.

Задание № 69

Функция $Y(x)$ задана дифференциальным уравнением

$$dY/dx = 2x - 2xY + Y/x, \quad Y(0) = 0,$$

а также интегральным представлением

$$Y(x) = 2x \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt.$$

На интервале $0 \leq x \leq 10$ найдите значения функции $Y(x)$ двумя указанными способами. Результаты сравните и оформите графически.

Задание № 70

Постройте числовой алгоритм, с помощью которого с точностью 0.0001 покажите справедливость следующего равенства

$$2\pi^{-1/2} \int_0^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(x^2)} dx = \sum_0^{\infty} (-1)^n (n+1)^{-1/2}.$$

Задание № 71

С точностью 0.0001 найдите такие значения параметра α , что интеграл

$$J(\alpha) = 4\pi^{-1/2} \int_0^{\alpha} x \exp(-x^2) dx$$

примет значения, равные $0.1n$, где $n = 1, 2, 3, 4$.

Задание № 72

Дана кубическая парабола: $y = \alpha x^3 + \beta x + 1$. Заданные коэффициенты параболы α и β могут принимать значения, отличающиеся на 10 % от номинальных. Задав

α и β численно, определите области возможных значений нулей этой параболы. Результаты оформите графически.

Задание № 73

Для функции $f(x) = (1 + k^2x^2)^{-1}$, где $k = 5$, и $k = 10$, постройте на интервале $(-1, 1)$ интерполяционный полином Лагранжа с числом узлов $10 \leq N \leq 20$. Значения найденного полинома сравните со значениями заданной функции $f(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 74

Функция $P(m)$ дискретного аргумента $m = 0, 1, 2, \dots, M$ равна

$$P(m) = C_M^m C_{N-M}^{n-m} / C_N^n,$$

где C_k^j — число сочетаний из k элементов по j .

Найдите при $k = 0, 1, 2, 3$ значения следующих сумм

$$S_k = \sum_{m=0}^L m^k P(m),$$

где $L = \min(n, M)$, для случаев: а) $N = 40$, $M = 10$, $n = 10$; б) $N = 40$, $M = 5$, $n = 10$. Результаты оформите графически.

Задание № 75

Интегральный синус $\text{Si}(x)$ и интегральный косинус $\text{Ci}(x)$ определяются следующими выражениями ($\gamma = 0.57721566$)

$$\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} dt, \quad \text{Ci}(x) = \int_0^x \frac{\cos(t) - 1}{t} dt + \ln(x) + \gamma.$$

Постройте численный алгоритм вычисления функций $\text{Si}(x)$ и $\text{Ci}(x)$. В аргументном интервале $(0.5, 20.0)$ с шагом табулирования 0.5 и с точностью 0.0001 найдите значения указанных функций. С помощью алгоритма численного дифференцирования найдите значения их первой и второй производных. Результаты оформите графически.

Задание № 76

Функция $f(x)$ определена выражением

$$f(x) = qx^M - x + 1,$$

где $M = 3; 4$ и $q = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$. В аргументном интервале $[-5, 5]$ с постоянным шагом табулирования $h = 0.1$ найдите массивы значений аргумента и функции.

Пользуясь численной процедурой вычисления значений интерполяционного многочлена Лагранжа, определите все действительные нули функции $f(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 77

Для матрицы A со следующими элементами

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 3.7 & 3.7 & z \\ 3.7 & 2.2 & 2.5 & 3.7 \\ 3.7 & 2.5 & 2.2 & 3.7 \\ z & 3.7 & 3.7 & 1.0 \end{pmatrix}.$$

с помощью созданного численного алгоритма, основанного на теореме Гамильтона–Кэли, найдите обратную матрицу для случаев $z = 3, 4$.

Задание № 78

Постройте численную процедуру решения системы двух нелинейных уравнений с помощью метода Ньютона. Для следующей системы

$$\begin{cases} \sin(x + y) - qx = -0.2, \\ (x + 3)^2 + (y - 1)^2 = 1.3, \end{cases}$$

где $q = 0.0, 0.1$ и 0.2 , решение получите с пятью верными знаками. Результаты оформите графически.

Задание № 79

С помощью численной процедуры нахождения нуля заданной функции двумя методами определите с точностью 0.0001 корни уравнения

$$x^4 n^{-2} - 3x^3 + n^2 = 0,$$

где $n = 1, 2, 3, \dots, 20$. Результаты оформите графически.

Задание № 80

Для случаев $q = 10^{-k}$, $k = 6, 7, 8$ найдите спектр матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & q \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Задание № 81

С помощью процедуры нахождения значения определенных интегралов вычислите с точностью 0.001 при $r = -0.5, 0.0, 0.5$

$$J = \frac{2}{\pi\sqrt{1-r^2}} \iint_D \exp\left(-\frac{x^2 - 2rxy + y^2}{2(1-r^2)}\right) dx dy,$$

где область интегрирования D определяется условием $xy < 0$.

Задание № 82

С помощью процедур нахождения решения обыкновенного дифференциального уравнения и вычисления значения определенного интеграла:

а) найдите на интервале $[0, b]$ решение уравнения

$$y'(x) = (x-1)/(x+1), \quad y(0) = 1;$$

б) найдите значение интеграла

$$J = \int_0^b (t-1)(t+1)^{-1} dt.$$

Найденные с точностью 0.0001 значения величин $y(b)$ и J сравните для случаев $b = 10, 20, 30, 40$.

Задание № 83

Для случаев $q = 10^{-k}$, $k = 6, 7, 8$, найдите собственные векторы матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & q \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Задание № 84

Гамма-функция Эйлера задана своим интегральным представлением

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} \exp(-t) t^{x-1} dt.$$

С помощью численного алгоритма нахождения значений однократного интеграла в аргументном интервале (1.0,5.0) с шагом табулирования 0.1 и точностью $\varepsilon = 0.0001$ найдите значения гамма-функции. Для значений аргумента $x = (1, 2, \dots, 6, 7)$ проверьте с точностью ε справедливость тождества $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 85

В выбранном аргументном интервале численно и аналитически найдите вторую производную $\varphi''(x)$ функции

$$\varphi(x) = \int_0^x (x+t)f(t) dt,$$

если $f(t) = (1 + t^{1/2})$, $f(t) = (1 + t^{3/2})$ и $f(t) = (1 + t^{5/2})$.

Задание № 86

С помощью численных процедур нахождения нулей заданной функции и определения значения однократного интеграла найдите с точностью 0,0001 первые четыре нуля функции

$$f(x) = \int_0^{\pi/2} t \sin[x \sin(t)] dt - \int_0^{\infty} \exp[-x \operatorname{ch}(t)] dt.$$

Задание № 87

Пусть дана матрица A размером (N, N) с элементами

$$A_{mn} = q^{-|m-n|}.$$

На основе метода Гаусса решения СЛАУ постройте процедуру обращения матрицы A при $q = 2, 3, 4$ и $N = 5, 6$. Найденное решение для обратной матрицы проверьте, перемножив её с исходной матрицей.

Задание № 88

Интеграл вероятности $\operatorname{erf}(x)$ определяется выражением

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt.$$

Постройте численный алгоритм определения значений функции $\operatorname{erf}(x)$. В аргументном интервале $(-5.0, 5.0)$ с шагом табулирования 0.25 и точностью 0.001 найдите значения интеграла вероятности. С помощью алгоритма численного дифференцирования таблично заданной функции найдите массивы значений первой и второй производных функции — интеграла вероятности $\operatorname{erf}(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 89

Для заданных матриц A , B и C размерностью N каждая найдите численно решение X следующего матричного уравнения

$$AX + XB = C.$$

Исследуйте погрешность решения для $N = 2, 3, 4$.

Задание № 90

Определите, для каких значений параметра α интеграл

$$J(\alpha) = \int_0^{\infty} x^2 [1 - x \exp(-\alpha x)]^{-1} dx$$

примет значение, равное 1, 2, 3, ..., 9 с точностью 0,0001.

Задание № 91

С точностью 0.0001 найдите такие значения параметра α , для которых интеграл

$$J(\alpha) = \frac{1}{\pi^4} \int_0^{\alpha} x^3 [\exp(x) - 1]^{-1} dx$$

примет значения, равные $0.1n$, где $n = 1, 2, 3, 4$. Результаты оформите графически.

Задание № 92

С точностью 0.0001 найдите такие значения параметра α , что интеграл

$$J(\alpha) = \frac{6}{\alpha^2} \int_0^{\alpha} x [1 - \exp(-x)]^{-1} dx.$$

примет значения, равные $3 + 0.1n$, где $n = 1, 2, 3, 4$. Результаты оформите графически.

Задание № 93

Функция $f_{\nu}(t)$ имеет вид

$$f(t) = [2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2)]^{-1} t^{\nu/2-1} \exp(-t/2), \quad t \geq 0. \quad (40)$$

Для $\nu = 3, 4, 5$ и $p = 0.90, 0.95, 0.99$ определите с точностью 0,0001 значения u , для которых $\int_0^u f(t) dt = p$. Результаты оформите графически.

Задание № 94

Для выбранных векторов X, Y размерности $N = 3, 4$ определим матрицу A и скаляр μ следующим образом

$$A_{nm} = X_n Y_m, \quad \mu = \sum_{n=1}^N X_n Y_n.$$

Численно выполните спектральный анализ матрицы $B = E + \mu A$.

Задание № 95

Функция $y(x)$ задана интегральным представлением

$$y(x) = \beta^{-2} \int_0^x t \exp(-t^3/\beta) dt.$$

Найдите аргументы x_n , $n = 1, \dots, 10$, в которых функция $y(x)$ принимает значения, равные $y(x) = 0, 1/n$. Результаты оформите графически.

Задание № 96

С помощью численных процедур найдите двумя способами решение дифференциального уравнения

$$2y'y'' + (y')^2 = 1, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

при условиях $y_0 = 0$ и $y'_0 = 1$. Результаты оформите графически.

Задание № 97

Численно и аналитически исследуйте решения дифференциального уравнения

$$dz/dx = \sin(z) - qx$$

на интервале $(0, 10)$ при следующих начальных условиях: $z(0) = 0.1, 0.3, \dots, 0.9, 1.1$ и значениях параметра: $q = 0.0; 0.5; 1.0$. Результаты оформите графически.

Задание № 98

С помощью численных процедур найдите двумя способами значение интеграла с точностью 0.0001

$$J(\alpha) = \int_0^\pi \ln(1 - 2\alpha \cos x + \alpha^2) dx,$$

если $\alpha = 0.3$, $\alpha = 0.6$ и $\alpha = 1.2$, $\alpha = 1.5$.

Задание № 99

Ортогональные многочлены Эрмита $H_n(x) = f(x)$ являются решениями дифференциального уравнения

$$f''(x) - 2xf'(x) + 2nf(x) = 0.$$

Для $n = 0, 1, 2, 3$ постройте численный алгоритм расчета многочленов Эрмита. В аргументном интервале $(0.0, 5.0)$ с шагом табулирования 0.1 найдите значения

указанных функций. Проверьте справедливость соотношения

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

Результаты оформите графически.

Задание № 100

Напишите программу нахождения численного решения параболического дифференциального уравнения в частных производных. Воспользуйтесь конечно-разностным методом сеток. С помощью программы найдите в полуполосе $-2 \leq x \leq 2$, $0 \leq t \leq 10$, решение уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t}U = \beta \frac{\partial}{\partial x}(xU) + q \frac{\partial^2}{\partial x^2}U - 3x^2U$$

с начальным условием $U(x, 0) = \exp(-5x^2)$ и нулевыми граничными условиями. Результаты оформите графически.

Задание № 101

Пусть A — матрица с элементами

$$A_{n,n} = 1, \quad A_{n,n+1} = A_{n+1,n} = q, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

остальные матричные элементы равны нулю.

Для случаев $N = 6$ и $q = \pm 0.5$ найдите спектр матрицы A . Найденные значения собственных чисел проверьте, сопоставив их произведение со значением определителя исходной матрицы.

Задание № 102

Функция $f(x)$ задана интегральным представлением

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}x} \int_{-\alpha}^{\alpha} \exp(-t^2/2x^2) dt, \quad x > 0.$$

Для $\alpha = 0.2n$, где $n = 1, 2, \dots, 10$, найдите значения аргумента x , доставляющего максимум функции $f(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 103

Аналитически и численно найдите с точностью 0.0001 объем V тела, определенного неравенствами

$$0 \leq z \leq \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{a} + \frac{y^2}{b} \right), \quad \left(\frac{x^2}{b} + \frac{y^2}{b} \right) \leq 1,$$

если $a = 1, b = 1, c = 1$ и $a = 2, b = 2, c = 2$.

Задание № 104

С точностью 0.001 найдите такие значения параметра α , для которых интеграл

$$J(\alpha) = \frac{2}{\ln(4)} \int_0^{\alpha} x^{-1} [\exp(-x^2) - \exp(-4x^2)] dx$$

примет значения, равные $0.1n$, где $n = 1, 2, 3, 4$.

Задание № 105

Постройте алгоритм и найдите численно решение дифференциального уравнения

$$y'' + (2/x)y' + y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

с начальными условиями: $y'(0) = q; y(0) = 0$, причем параметр q принимает значения: $q = 0,0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$. Результаты оформите графически.

Задание № 106

С помощью численных процедур найдите двумя способами решение дифференциального уравнения

$$y^3 + (y')^3 - yy' = 0, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

при условии $y_0 = 10^k, k = -2, -3, -4$. Результаты оформите графически.

Задание № 107

С точностью 0.001 найдите такие значения аргумента x , для которых функция

$$f(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(t^2) dt$$

примет значения, равные 0.1, 0.2, 0.3 и 0.4.

Задание № 108

Задана таблица из N пар значений (x, y) . Постройте численную процедуру, позволяющую находить значения интерполяционного полинома Лагранжа. Известно, что абсцисса последнего узла случайна и равномерно распределена в интервале (a, b) . Найдите значения интерполяционного полинома, усредненного по случайным значениям указанной абсциссы.

Задание № 109

С помощью процедуры нахождения значения определенных интегралов вычислите с точностью 0.001 при $r = -0.9, \dots, 0.9$ с шагом $\Delta r = 0,1$

$$J = \frac{2}{\pi\sqrt{1-r^2}} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2 - 2rxy + y^2}{2(1-r^2)}\right) dx dy.$$

Задание № 110

Докажите аналитически и проверьте численно (с точностью 0,0001) следующее равенство

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^4}} \times \int_0^1 \frac{y^2 dy}{\sqrt{1-y^4}} = \pi/4.$$

Задание № 111

Задана таблица из N пар значений (x, y) . Постройте численную процедуру, позволяющую находить коэффициенты соответствующего интерполяционного полинома Лагранжа.

Задание № 112

С точностью 0,001 определите, для каких значений параметра α интеграл

$$J(\alpha) = \int_0^\infty x [1 - x \exp(-\alpha x)]^{-1} dx$$

примет значение, равное 0.1, 0.2, ..., 0.9. Результаты оформите графически.

Задание № 113

Функция $f(x, q)$ определяется выражением $f(x, q) = qx - \sin(x)$. Параметр q изменяется в интервале (0.01, 1.0).

Укажите последовательность значений параметра q , для которых происходит изменение числа положительных нулей функции $f(x, q)$. Для $q = 0.1$ определите все значения положительных нулей функции $f(x, 0.1)$ с точностью 0.001. Результаты оформите графически.

Задание № 114

Для функции $U(x, t)$ рассматривается уравнение в частных производных

$$U_t = U + xU_x + 3U_{xx}$$

с начальным условием

$$U(x, 0) = \exp[-(x - 1)^2].$$

Выбрав прямоугольную область значений аргументов x и t , постройте конечно-разностный алгоритм решения уравнения. На основе этого алгоритма с помощью созданной программы найдите значения функции $U(x, t)$ в области, включающей максимум функции. Изучите асимптотические свойства функции $U(x, t)$. Результаты оформите графически.

Задание № 115

Функция $y = y(x)$ определяется уравнением

$$y = 2\varepsilon \operatorname{arctg}(y/x).$$

Для выбранного значения $0 < \varepsilon < 1$ и выбранного аргументного интервала и шага Δx в нем постройте таблицу значений функции $y(x)$ и её производной $y'(x)$. Результаты оформите графически.

Задание № 116

Двумя построенными числовыми процедурами найдите значения интеграла от функции $f(x) = \operatorname{ctg}(x)$ в интервале $(0.01, 1.0)$. Исследуйте погрешность численного алгоритма и её зависимость от числа узлов в квадратурной формуле. Результаты оформите графически.

Задание № 117

Двумя методами найдите нули функции

$$f(x) = \sin(\alpha x^2 + \beta)$$

для значений параметров: $\alpha = 0, 1n$; $n = -5, \dots, 5$; $\beta = (-3, -2, \dots, 2, 3)$. Результаты оформите графически.

Задание № 118

С помощью численных процедур нахождения нулей заданной функции и определения значения однократного интеграла найдите первые три нуля функции

$$f_n(x) = \int_0^\pi \cos[x \sin(t) - nt] dt$$

с точностью 0.0001 для $n = 1, 2, 3$. Результаты оформите графически.

Задание № 119

Пусть X есть матрица, образованная из собственных векторов заданной матрицы A размерностью $N = 3$ и $N = 4$. Докажите аналитически и проверьте численно, что $Y = (X^T)^{-1}$ есть матрица, образованная из собственных векторов матрицы A^T .

Задание № 120

Функция $J(a, b)$ имеет интегральное представление ($0 \leq a \leq b$)

$$J(a, b) = \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{a^2 \cos^2 x + b^2 \sin^2 x}}.$$

Найдите значения функции $J(1, 3)$ и $J(3, 1)$. Аналитически и численно (с точностью 0,0001) покажите, что

$$J(a, b) = J(\sqrt{ab}, (a+b)/2),$$

выбрав при этом значения параметров a и b .

Задание № 121

Функция $J(a, b)$ имеет интегральное представление ($0 \leq a \leq b$)

$$J(a, b) = \int_a^b \frac{1-x^2}{(1+x^2)\sqrt{1+x^4}} dx.$$

Найдите значения функции $J(1, 1)$ и $J(2, 2)$. Аналитически и численно (с точностью 0,0001) покажите, что $J(a, b) = J(1/a, 1/b)$, выбрав при этом значения параметров a и b .

Задание № 122

С помощью численных процедур найдите двумя способами решение дифференциального уравнения

$$y'' - 2y' + y = 2\operatorname{sh} x + 2x, \quad 0 \leq x \leq 5,$$

при условиях $y_0 = 0$ и $y'_0 = 0$. Результаты оформите графически.

Задание № 123

На интервале $[0, 10]$ найдите с точностью 0.0001 максимумы функции

$$f(x) = \sin^6(x) \exp(qx),$$

где $q = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Результаты оформите графически.

Задание № 124

Пространственное тело является общей частью двух сфер

$$(z - 3)^2 + x^2 + y^2 = 16 \quad \text{и} \quad (z + 3)^2 + x^2 + y^2 = 16.$$

С помощью метода Монте–Карло оцените объем получившей пространственной фигуры. Результаты оформите графически.

Задание № 125

Функция Хольцмарка $f(\beta)$ задана интегральным представлением

$$f(\beta) = \frac{2}{\pi\beta} \int_0^{\infty} \exp[-(t/\beta)^{3/2}] t \sin t \, dt$$

Для $\alpha = 0.05n$, где $n = 1, 2, \dots, 20$, найдите значения таких аргументов β , что $f(\beta) = \alpha$. Результаты оформите графически.

Задание № 126

Пространственное тело ограничено поверхностями, задаваемыми функциями

$$z = -x^2 - y^2 + 3 \quad \text{и} \quad z = x^2 + y^2 - 3.$$

С помощью метода Монте–Карло оцените объем получившей пространственной фигуры. Результаты оформите графически.

Задание № 127

Функция $f(x)$ выражается через полный эллиптический интеграл:

$$f(x) = \int_0^{\pi/2} [1 - x^2 \sin^2 \varphi]^{-1/2} d\varphi.$$

Для интервала $0 \leq x \leq 1$ с шагом $\Delta x = 0,05$ численно проверьте, что

$$x(1 - x^2)f''(x) + (1 - 3x^2)f'(x) - xf(x) = 0.$$

Результаты оформите графически.

Задание № 128

Аналитически и численно найдите с точностью 0.0001 значение интеграла

$$J = \int \int \int_D (x^2 + y^2 + z^2) dx dy dz$$

по области D , определяемой неравенствами

$$x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad z \geq 0, \quad \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} \right) \leq 1,$$

если $a = 1, b = 1, c = 1$ и $a = 2, b = 2, c = 2$. Результаты оформите графически.

Список литературы

У Ч Е Б 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.: Высшая школа, 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*. — Киев: Выща школа, 1989.
5. Фурунжиев Р.И., Бабушкин Ф.М., Варавко В.В. *Применение математических методов и ЭВМ*. — Минск: Высшая школа, 1989.
6. Ланцош К. *Практические методы прикладного анализа*. — М.: Госиздат физ.-мат. литературы, 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.: Высшая школа, 1976.
11. Шуп Т. *Решение инженерных задач на ЭВМ*. — М.: Мир, 1982.
12. Вентцель Е.С. *Теория вероятностей*. — М.: Наука, 1964.
13. Бусленко Н.П., Шрейдер Ю.А. *Метод статистических испытаний и его реализация на цифровых вычислительных машинах*. — М.: Госиздат физ.-мат. литературы, 1961.
14. Попов Б.А., Теслер Г.С. *Вычисление функций на ЭВМ*. — К.: Наукова думка, 1984.

С П Р А В О Ч Н И К И

15. Корн Г., Корн Т. *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. — М.: Наука, 1987.
16. Абрамович М., Стиган И. *Справочник по специальным функциям*. — М.: Наука, 1979.
17. Дьяконов В.П. *Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ*. — М.: Наука, 1989.
18. Ямке Е., Эмде Ф., Леш Ф. *Специальные функции*. — М.: Наука, 1968.

19. Маделунг Э. *Математический аппарат физики*. — М.: Физматгиз, 1960.
20. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. — М.: Физматгиз, 1962.
21. Камке Э. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*. — М.: Наука, 1965.
22. Фильчаков В.В. *Численные и графические методы прикладной математики: Справочник*. — К.: Наукова думка, 1986.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

23. Беллман Р. *Введение в теорию матриц*. — М.: Наука, 1969.
24. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. *Матрицы и вычисления*. — М.: Наука, 1984.
25. Анго А. *Математика для электро- и радиоинженеров*. — М.: Наука, 1965.
26. Крылов В.И. *Приближенное вычисление интегралов*. — М.: Физматгиз, 1959.
27. Мишина А.П., Проскуряков И.Г. *Высшая алгебра*. — М.: Наука, 1965.
28. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. *Вычислительные методы линейной алгебры*. — М.: Физматгиз, 1963.
29. Никольский С.М. *Квадратурные формулы*. — М.: Физматгиз, 1958.
30. Банди Б. *Методы оптимизации*. — М.: Радио и связь, 1984.
31. Волков Е.А. *Численные методы*. — М.: Наука, 1982.
32. Самарский А.А. *Введение в численные методы*. — М.: Наука, 1982.
33. Копченова Н.В., Марон И.А. *Вычислительная математика в примерах и задачах*. — М.: Наука, 1972.
34. Ермаков С.М. *Метод Монте-Карло и смежные вопросы*. — М.: Наука, 1971.
35. Борович Э.И. *Определители и матрицы*. — М.: Наука, 1984.
36. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. *Курс статистического моделирования*. — М.: Наука, 1976.
37. Харин Ю.С. *Практикум на ЭВМ по математической статистике*. — Минск: Изд. Белорусского университета, 1987.
38. Поттер Д. *Вычислительные методы в физике*. — М.: Мир, 1975.
39. Амелькин В.В. *Дифференциальные уравнения в приложениях*. — М.: Наука, 1987.
40. Оппенгейм А.М., Шефер Р.В. *Цифровая обработка сигналов*. — М.: Связь, 1979.
41. Прэтт У. *Цифровая обработка изображений*. — М.: Мир, 1982.