Міністерство освіти і науки України
Прикарпатський університет ім. В.Стефаника

Л.С.Возняк, С.В.Шарин

Чисельні методи

Методичний посібник
для студентів природничих спеціальностей

Івано-Франківськ
"Плай"
2001

УДК 519.6
ББК 22.19я73
В64

Рекомендовано Вченою радою Прикарпатського університету імені Василя Стефаника як методичний посібник для вищих закладів освіти (Протокол № 8 від 20 лютого 2001 р.)

Рецензенти: *Б.В.Василишин*, канд. фіз.-мат. наук, професор
Г.Я.Ширмовський, канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри прикладної математики Івано-Франківського технічного університету нафти і газу

Л.С.Возняк, С.В.Шарин
В64 Чисельні методи: Методичний посібник для студентів природничих спеціальностей. –Івано-Франківськ: “Плай”, 2001, –64 с.

В посібнику розглядаються чисельні методи математики, які вивчаються на природничих спеціальностях Прикарпатського університету. Основна увага приділяється тим аспектам теоретичного матеріалу, які часто викликають у студентів труднощі в їх осмисленні.

Адресується студентам природничих спеціальностей та всім тим, хто цікавиться чисельними методами в природознавстві.

Вступ

Розширення можливостей прикладної математики обумовило математизацію різних розділів науки: хімії, біології, економіки, геології, психології, медицини, техніки тощо. Дослідження реальних фізичних процесів та явищ полягає у побудові відповідних математичних моделей і розробці методів їх дослідження. У зв'язку з цим студентам природничих спеціальностей вищих закладів освіти читають курси, пов'язані із чисельними методами математики.

У результаті вивчення курсів "Математичні методи в біології" та "Методи обчислень" студенти повинні знати чисельні методи та вміти їх використовувати при розв'язуванні наукових та науково-технічних задач із таких галузей як хімія, фізика, біологія. Досвід роботи на фізико-математичному та природничому факультетах Прикарпатського університету показує, що при вивченні цих курсів найбільші труднощі у студентів виникають при побудові та дослідженні математичних моделей в природничих науках, вивченні та реалізації чисельних методів їх розв'язання.

В посібнику викладено курс лекцій у відповідності до програми із математичних методів для природничих спеціальностей. Весь матеріал розбито на сім тем. Кожна тема розрахована на 4 аудиторних години (дві лекції), і, таким чином, на весь курс відводиться 14 лекцій. До кожної теми подано контрольні запитання та завдання для самоконтролю. Основну увагу в лекціях звернено на роз'яснення принципових моментів та аспектів теоретичного матеріалу, які часто викликають у студентів труднощі в їх осмисленні. Складні доведення в посібнику не подаються, оскільки їх розглядають під час аудиторних занять та на консультаціях із самостійного опрацювання дисципліни за рекомендованою літературою. Вивчення чисельних методів базується на розв'язуванні практичних задач, тому теоретичний матеріал супроводжується прикладами, що полегшує його розуміння.

Тема 1. Основи теорії похибок

Література : **[1]**, гл. I, §§1, 3–6; **[4]**, гл. I, §§1–3; **[5]**, гл. 1, §§1–4; **[6]**, гл. I, §§1.1–1.9; **[7]**, розд. I, §§1–3, 5 .

1. Поняття наближеного числа. Вихідними даними більшості теоретичних чи прикладних задач є *числа.* Над ними в процесі розв'язання виконують різні арифметичні операції, які призводять до появи нових чисел, а відтак до отримання числового результату.

За допомогою числа виражають кількісну характеристику деякої величини. Наприклад, якщо відомо, що маса деякого тіла рівна 10 кг, то маса тіла – це величина, а 10 – це число, яке є значенням цієї величини. У тих випадках, коли неможливо визначити точне числове значення величини, або, коли воно практично неприйнятне чи незручне для подальших обчислень, його замінюють наближеним значенням. Таким чином, *наближеним числом* називається число, яке відрізняється від точного і замінює його у обчисленнях. Наприклад, уявімо собі, що деякий бібліоман вирішив розпродати свою бібліотеку. Ціна кожної книжки залежить від кількості сторінок з того розрахунку, що 100 сторінок коштують 2 грн. 30 коп. Скільки ж коштуватиме книжка, в якій 248 сторінок? Неважко порахувати, що ціна такої книжки 5 грн. 70,4 коп. Зрозуміло, що з практичних міркувань зайвих чотири десятих копійки доведеться відкинути, і вважати, що ця книжка коштує 5 грн. 70 коп. У такому випадку 5 грн. 70,4 коп. – це точне значення величини (ціни книжки), проте на практиці ми користуємося близьким до нього (наближеним) числом 5 грн. 70 коп.

Інші приклади. Коли ми говоримо "24 години в добі", "368 сторінок в книзі", "5 поверхів в будівлі", "2001 рік", то маємо на увазі, що числа 24, 368, 5, 2001 – точні. А от у фразах "висота гори 2061 м", "температура тіла 36,6°C", "тривалість експерименту 21 хв.", "у словнику 25000 слів" числа 2061, 36,6, 21, 25000 – наближені. В перших трьох випадках похибки зумовлені неточністю вимірювальних приладів, в останньому випадку кількість слів вказується лише приблизно.

Одне і те ж число може бути як точним, так і наближеним. Це залежить від конкретної величини, значення якої виражається числом. Наприклад, якщо число 5 виражає кількість пальців на руці людини, то воно точне, якщо ж 5 – це додатний корінь квадратного рівняння $x^2 - 4x - 5{,}0006 = 0$, то це число наближене. Таким чином поняття точного чи наближеного числа суттєво пов'язане з тою величиною, значення якої виражається числом.

При розв'язуванні реальних фізичних задач ми отримуємо, як правило, результати, що є наближеними числами. Похибки результатів зумовлюються такими причинами:

- математична модель складена недосконало і лише наближено відображає реальні явища;
- вхідні дані є неточними числами, що зумовлюється обмеженою точністю різноманітних вимірювальних приладів (термометр, секундомір тощо), які використовуються в експериментах;
- метод розв'язування задачі часто є наближеним, тобто таким, який може дати точний розв'язок тільки теоретично;
- при обчисленнях вдаються до округлень, які зумовлюють появу похибок, що нагромаджуються в процесі обчислень.

Похибки, що породжуються вищезгаданими причинами, відповідно називаються: *похибка математичної моделі, неусувна похибка, похибка методу* та *похибка заокруглення.*

2. Класифікація похибок наближених чисел. Нехай x – точне значення деякої величини, a – наближене значення числа x. Тоді кажуть, що x *наближено рівне числу* a і записують $x \approx a$.

Якщо відомо, що $x > a$, то a називають *наближеним значенням числа x з недостачею*; якщо ж $x < a$, то a називають *наближеним значенням числа x з надлишком.*

Абсолютна похибка. Зауважимо, що наближених значень точного числа існує, як правило, безмежно багато. Достатньо лише замість a вибрати будь-яке інше число, що близьке до x.

Наближене число, задане тільки своїм значенням, практичного змісту не має, оскільки невідомим залишається ступінь довіри до нього. Наближена рівність $x \approx a$ має точний зміст тільки тоді, коли відома похибка, з якою обчислене x.

Щоб охарактеризувати ступінь точності даного наближення, користуються поняттям похибки. *Похибкою* наближення a точного числа x називається різниця $x - a$.

Абсолютною похибкою наближення a називається модуль його похибки, тобто $\Delta = |x - a|$. Абсолютна похибка, як правило, не має практичного значення, оскільки в більшості випадків точне число x, і, як наслідок, величина Δ, залишаються невідомими. Тому доцільно ввести інше поняття, яке є оцінкою невідомої абсолютної похибки.

Граничною абсолютною похибкою наближення a називається число $\Delta_a > 0$, яке задовольняє нерівність $\Delta = |x - a| \leq \Delta_a$. Розкривши знак модуля, останню нерівність перепишемо наступним чином

$$a - \Delta_a \leq x \leq a + \Delta_a\,. \tag{1}$$

Звідси маємо, що $a - \Delta_a$ є наближеним значенням числа x з недостачею, а $a + \Delta_a$ – наближеним значенням x з надлишком. Подвійну нерівність (1) часто записують у вигляді символічної рівності

$$x = a \pm \Delta_a\,, \tag{2}$$

яку читають так: “число a є наближеним значенням величини x з точністю Δ_a”.

З означення граничної абсолютної похибки випливає, що чисел Δ_a, які задовольняють нерівність $\Delta = |x - a| \leq \Delta_a$, є безмежна кількість. На практиці намагаються вибрати якнайменше серед чисел Δ_a, щоб досягти точності, яка вимагається в умові задачі.

Оскільки гранична абсолютна похибка використовується для характеристики порядку точності наближеного значення числа, то обчислювати її з великою кількістю значущих цифр немає сенсу (означення значущих цифр див. далі). Тому на практиці обмежуються однією-двома значущими цифрами. При цьому слід мати на увазі, що заокруглення треба проводити лише в сторону збільшення, інакше в результаті можна отримати число, що буде менше, ніж абсолютна похибка наближення.

Зауважимо, що гранична абсолютна похибка є розмірною величиною, або іменованим числом. Її розмірність така ж, як і в самого наближення.

Відносна похибка. Гранична абсолютна похибка як характеристика точності наближеного значення числа має свої недоліки.

Будучи числом іменованим, вона придатна для порівняння точності вимірювань тільки однорідних величин і зовсім незастосовна для порівняльної оцінки величин різної розмірності. Крім того, значення граничної абсолютної похибки не дає інформації про якість того чи іншого вимірювання. Наприклад, нехай при вимірюванні ширини зошита і довжини стола учнівською лінійкою були отримані такі результати: $l_1 = 15{,}3 \pm 0{,}1$ см і $l_2 = 109{,}6 \pm 0{,}1$ см. В обох випадках гранична абсолютна похибка дорівнює 0,1 см. Проте друге вимірювання проведено більш якісно, ніж перше. Справа в тім, що при оцінці якості вимірювання має значення не стільки сама абсолютна похибка, як частка цієї похибки, що припадає на одиницю досліджуваної величини. Цілком природно вважати, що вимірювання є тим якісніше, чим менша ця частка.

Відносною похибкою наближення називається відношення абсолютної похибки до модуля точного значення величини x і виражається формулою $\delta = \frac{\Delta}{|x|}$.

Оскільки точне значення величини нам, як правило, невідоме, то його замінюють наближеним значенням, і тоді вважають, що $\delta = \frac{\Delta}{|a|}$.

Граничною відносною похибкою наближення називається число $\delta_a > 0$, для якого виконується нерівність $\delta_a \geq \delta$.

Граничну відносну похибку можна представити у вигляді відношення граничної абсолютної похибки до модуля наближеного значення $\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|}$. Звідси випливає співвідношення $\Delta_a = |a| \cdot \delta_a$. Зауважимо, що граничну відносну похибку прийнято виражати у відсотках, тому часто зустрічається формула $\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|} \cdot 100$.

3. Десятковий запис наближених чисел. Форма запису (2) наближеного числа не завжди зручна. Доцільно встановити такий спосіб запису, який дозволив би за десятковим записом числа визначити граничну абсолютну похибку наближення.

Форми запису наближених чисел. Кожне число a, записане в десятковій системі числення, можна представити в наступному вигляді $a = a_0 \cdot 10^p$. Наприклад, $12345 = 12{,}345 \cdot 10^3 = 123{,}45 \cdot 10^2 = 123450 \cdot 10^{-1}$. Бачимо, що представлення числа в такому вигляді не є єдиним. Звичайний запис числа називають *природною* або *фіксованою* формою, а запис у вигляді $a = a_0 \cdot 10^p$ – *плаваючою* формою, або *формою з плаваючою комою.*

Якщо для множника a_0 виконується нерівність $|a_0| < 1$, то отримують, так звану, *нормальну* форму запису. В цьому випадку множник a_0 називається *мантисою*, а показник степеня p – *порядком* числа a. Зауважимо, що запис числа в нормальній формі теж не є єдиним. Наприклад, число 12,3 в нормальній формі запишеться $0{,}123 \cdot 10^2 = 0{,}0123 \cdot 10^3$. Нормальна форма запису числа, в мантисі якої першою після коми є відмінна від нуля цифра, називається *нормалізованою.* Представлення числа у цій формі єдине.

На практиці найчастіше використовують іншу форму запису числа. Якщо множник a_0 задовольняє подвійну нерівність $1 \leq |a_0| < 10$, то отримують, так звану, *стандартну* форму запису. Представлення числа в цій формі теж єдине. Наприклад, $123 = 1{,}23 \cdot 10^2$.

Значущі цифри. Правильні значущі цифри. Насамперед введемо деякі ключові поняття теорії наближених обчислень.

Значущими цифрами наближеного числа називають всі його цифри, починаючи з першої зліва ненульової цифри, причому крайні справа нулі є значущими тільки в тому випадку, коли відомо, що одиниць відповідного розряду в даному числі немає.

Наприклад, в наближених числах **19**,**5**; 0,0**213**; 0,**205**; 0,00**796**; 0,**800** по три значущі цифри (вони виділені). В останньому випадку вважається, що крайні справа нулі означають відсутність одиниць відповідних розрядів.

В числі 250 ± 5 є дві значущі цифри 2 і 5. Останній нуль не є значущим, бо він замінює невідому цифру одиниць.

Значуща цифра α в десятковому записі наближеного значення числа називається *правильною в широкому сенсі (розумінні)*, якщо абсолютна похибка наближення не перевищує одиниці того розряду, якому належить цифра α.

Наприклад, нехай $x = 1{,}743 \pm 0{,}01$. Одиниця розряду, якому належить цифра 3 є 0,001 і $0{,}001 < 0{,}01$, тому 3 не є правильною цифрою в широкому сенсі. Для цифри 4: одиниця розряду 0,01 і $0{,}01 \leq 0{,}01$, тому 4 правильна цифра в широкому сенсі. Легко бачити, що 1 і 7 теж будуть правильними цифрами.

Значуща цифра α в десятковому записі наближеного значення числа називається *правильною в строгому сенсі (розумінні)*, якщо абсолютна похибка наближення не перевищує половини одиниці того розряду, якому належить цифра α.

Нехай $x = 4{,}79 \pm 0{,}03$. Перевіримо на правильність цифру 9: половина одиниці розряду $\frac{1}{2} \cdot 0{,}01 = 0{,}005$ і $0{,}005 < 0{,}03$, тому цифра 9 не є правильною в строгому сенсі. Для цифри 7: $\frac{1}{2} \cdot 0{,}1 = 0{,}05$ і $0{,}05 > 0{,}03$, тому 7 – правильна в строгому сенсі. Зрозуміло, що 4 теж правильна.

Цифри в записі наближеного числа, які не є правильними, називаються *сумнівними*, і на письмі підкреслюються, наприклад, $3{,}9\underline{45}$.

Очевидними є наступні твердження:

- всі значущі цифри наближеного числа, що стоять зліва від правильної є правильними;

- всі значущі цифри наближеного числа, що стоять справа від сумнівної є сумнівними.

Термін "правильна цифра" не слід сприймати буквально, оскільки правильна цифра може і не співпадати з цифрою відповідного роз-
ряду точного значення числа. Нехай $x = 3{,}142 \pm 0{,}0001$ – наближене значення числа $\pi = 3{,}1415\ldots$, всі цифри числа 3,142 є правильними в строгому сенсі, проте цифра 2 не співпадає з відповідною цифрою точного числа.

Якщо наближене число закінчується правильними значущими нулями, які стоять після коми, то ці нулі відкидати не треба. Наприклад, якщо $a = 7{,}1$ і відомо, що $\Delta_a = 0{,}0005$, то слід писати $a = 7{,}100$; якщо $a = 123$ і $\Delta_a = 0{,}005$, то $a = 123{,}00$. Зрозуміло, що в записі точних чисел ці нулі можна опустити.

Складніша справа з цілими числами. Зрозуміло, що опускати нулі в цілих числах не можна. Як тоді відрізнити, які нулі є правильні, а які сумнівні? Поступають наступним чином: цілі числа, які закінчуються сумнівними нулями, записують у формі з плаваючою комою, причому в мантисі залишають лише правильні цифри. Наприклад, нехай $x = 74132 \pm 50$, тобто $x \approx 74100$. Але оскільки два останні нулі є сумнівними цифрами, то слід писати $x \approx 7.41 \cdot 10^4$, тобто в цьому числі є 3 правильні значущі цифри.

Заокруглення чисел. Ця операція зводиться до заміни точного числа наближеним або наближеного числа іншим наближеним, менш точним. При заокругленні частина значущих цифр відкидається, або при необхідності замінюється нулями.

Якщо результат заокруглення позначити через a_1, то абсолютна величина різниці $|a - a_1|$ називається похибкою заокруглення. Число a_1 вибирають так, щоб ця похибка була найменшою.

Сформулюємо правила, яких слід дотримуватись при заокругленні чисел (*правила заокруглення з доповненням*).

Якщо перша зліва із цифр, які відкидаються (або замінюються нулями),

а) більша, ніж 5, то остання із залишених цифр збільшується на одиницю;

б) дорівнює 5 і за нею *стоять* відмінні від нуля цифри, то остання із залишених цифр збільшується на одиницю;

в) дорівнює 5 і за нею *не стоять* відмінні від нуля цифри, то остання із залишених цифр збільшується на одиницю, якщо вона непарна, і залишається без змін, якщо вона парна;

г) менша, ніж 5, то остання із залишених цифр не змінюється.

Правило в) називається правилом парної цифри. Застосування цього правила до одного числа не призводить до збільшення точності обчислень. Проте при багаторазових заокругленнях надлишкові числа зустрічаються приблизно так само часто, як числа з недостачею. Тому має місце взаємна компенсація похибок і результат виявляється більш точним.

При застосуванні вище розглянутих правил заокруглення абсолютна похибка заокруглення не перевищує половини одиниці того розряду, якому належить остання залишена цифра.

Приклади (в дужках вказано правило, яке використовувалось при заокругленні): $37{,}83 \approx 37{,}8$ (г); $4{,}652 \approx 4{,}7$ (б); $578 \approx 580$ (а); $34{,}75 \approx 34{,}8$ (в); $34{,}85 \approx 34{,}8$ (в).

4. Оцінка похибок значень функцій. Однією з основних операцій в обчислювальній роботі є обчислення значення деякої величини за формулою. Оскільки вхідні дані – це, як правило, наближені числа, то і результат буде числом наближеним. Необхідно вміти оцінювати похибку результату, якщо відомі похибки вхідних даних. Може бути і навпаки: потрібно вияснити, які повинні бути похибки вхідних даних, щоб похибка отриманого результату була допустимою (тобто не більшою, ніж задана). Тому розглянемо оцінки похибок результатів обчислень значень функцій.

Нехай задано диференційовану функцію f, що залежить від n змінних; $x_1, x_2, \ldots, x_n$ – точні значення, $a_1, a_2, \ldots, a_n$ – наближені значення змінних, а $\Delta_i = |x_i - a_i|$, $i = \overline{1,n}$ – їх абсолютні похибки. Тоді абсолютна похибка значення функції в точці $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ – це її приріст $\Delta f = |f(x_1, x_2, \ldots, x_n) - f(a_1, a_2, \ldots, a_n)|$. Оскільки на практиці числа Δ_i значно менші, ніж абсолютні значення змінних x_i, $i = \overline{1,n}$, то приріст функції можна замінити її диференціалом

$$\Delta f \approx |df(a_1, a_2, \ldots, a_n)| = \left| \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \Delta_i \right| \le \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \Delta_i \right| .$$

Ця нерівність підсилюється після заміни абсолютних похибок Δ_i граничними абсолютними похибками Δ_{x_i}, тобто $\Delta f \le \sum\limits_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \Delta_{x_i}$.

Це означає, що граничну абсолютну похибку функції f можна визначити за формулою

$$\Delta_f = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \Delta_{x_i} . \tag{3}$$

З формули (3) легко отримати оцінку граничної відносної похибки функції:

$$\delta_f = \frac{\Delta_f}{|f|} = \sum_{i=1}^{n} \frac{|f'_{x_i}|}{|f|} \cdot \Delta_{x_i} = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial \ln f}{\partial x_i} \right| \cdot \Delta_{x_i} .$$

Для того, щоб виразити δ_f через граничні відносні похибки значень аргументів, помножимо і поділимо останню рівність на $|x_i|$. Тоді

$$\delta_f = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial \ln f}{\partial x_i} \right| \cdot |x_i| \cdot \delta_{x_i} . \tag{4}$$

Формули (3) і (4) мають загальний характер. З них можна отримати не тільки всі формули для обчислення граничних абсолютних та відносних похибок елементарних функцій, але і формули для визначення граничних похибок результатів арифметичних дій.

Для прикладу розглянемо випадки алгебраїчної суми і множення. Нехай $f(x,y) = x + y$, $g(x,y) = x - y$. Тоді з формули (3) отримаємо

$$\Delta_f = \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \Delta_x + \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \Delta_y = \Delta_x + \Delta_y, \quad \Delta_g = \left| \frac{\partial g}{\partial x} \right| \Delta_x + \left| \frac{\partial g}{\partial y} \right| \Delta_y = \Delta_x + \Delta_y .$$

Нехай $f(x,y) = x \cdot y$. Тоді за формулою (4)

$$\delta_f = \left| \frac{\partial \ln f}{\partial x} \right| \cdot |x| \cdot \delta_x + \left| \frac{\partial \ln f}{\partial y} \right| \cdot |y| \cdot \delta_y = \left| \frac{f'_x}{f} \right| \cdot |x| \cdot \delta_x + \left| \frac{f'_y}{f} \right| \cdot |y| \cdot \delta_y =$$
$$\left| \frac{y}{xy} \cdot x \right| \cdot \delta_x + \left| \frac{x}{xy} \cdot y \right| \cdot \delta_y = \delta_x + \delta_y .$$

Аналогічно можна вивести формули для похибок результатів інших арифметичних дій. Для зручності всі формули зведені в загальну таблицю.

Таблиця 1

Операція	Δ	δ	Операція	Δ	δ
$x+y$	$\Delta_x+\Delta_y$	$\frac{\lvert x\rvert}{\lvert x+y\rvert}\delta_x+\frac{\lvert y\rvert}{\lvert x+y\rvert}\delta_y$	x/y	$\frac{x\Delta_y+y\Delta_x}{y^2}$	$\delta_x+\delta_y$
$x-y$	$\Delta_x+\Delta_y$	$\frac{\lvert x\rvert}{\lvert x-y\rvert}\delta_x+\frac{\lvert y\rvert}{\lvert x-y\rvert}\delta_y$	x^n	$nx^{n-1}\Delta_x$	$n\delta_x$
$x\cdot y$	$x\Delta_y+y\Delta_x$	$\delta_x+\delta_y$	$\sqrt[n]{x}$	$\frac{\sqrt[n]{x}}{nx}\Delta_x$	$\frac{\delta_x}{n}$

Користуючись цими формулами розв'яжемо декілька прикладів.

1. Нехай $a = 27{,}35 \pm 0{,}02$, $b = 33{,}87 \pm 0{,}03$. Тоді $S = a + b = 61{,}22 \pm 0{,}05$, де $61{,}22 = 27{,}35 + 33{,}87$, $0{,}05 = 0{,}02 + 0{,}03$.
2. Нехай $a = 181{,}17 \pm 0{,}02$, $b = 53{,}74 \pm 0{,}01$, $c = 165{,}61 \pm 0{,}02$. Тоді $S = 400{,}52 \pm 0{,}05$, де $400{,}52 = 181{,}17 + 53{,}74 + 165{,}61$, $0{,}05 = 0{,}02 + 0{,}01 + 0{,}02$.
3. Нехай $a = 58{,}9 \pm 0{,}2$, $b = 27{,}3 \pm 0{,}1$. Тоді $R = a - b = 31{,}6 \pm 0{,}3$, де $31{,}6 = 58{,}9 - 27{,}3$; $0{,}3 = 0{,}2 + 0{,}1$.
4. Нехай $a = 6{,}81 \pm 0{,}01$, $b = 7{,}43 \pm 0{,}01$. Тоді $D = a \cdot b = 50{,}6 \pm 0{,}1$, де $50{,}6 \approx 6{,}81 \cdot 7{,}43$; $0{,}1 \approx 6{,}81 \cdot 0{,}01 + 7{,}43 \cdot 0{,}01$.
5. Нехай $a = 4{,}21 \pm 0{,}01$, $b = 2{,}84 \pm 0{,}01$. Тоді $K = a/b = 1{,}48 \pm 0{,}01$, де $1{,}48 \approx 4{,}21/2{,}84$, $0{,}01 \approx (4{,}21 \cdot 0{,}01 + 2{,}84 \cdot 0{,}01)/2{,}84^2$.
6. Нехай $a = 1{,}2 \pm 0{,}1$. Тоді $S = a^3 = 1{,}728 \pm 0{,}432$, де $1{,}728 = 1{,}2^3$, $0{,}423 = 3 \cdot 1{,}2^2 \cdot 0{,}1$.
7. Нехай $a = 8{,}3 \pm 0{,}2$. Тоді $R = \sqrt{a} = 2{,}88 \pm 0{,}04$, де $2{,}88 \approx \sqrt{8{,}3}$, $0{,}04 \approx \frac{\sqrt{8{,}3}}{2 \cdot 8{,}3} \cdot 0{,}2$.

5. Основні задачі теорії наближених обчислень. У теорії наближених обчислень виділяють дві задачі, які відповідно називаються *прямою* та *оберненою* задачами теорії похибок.

Пряма задача. Суть задачі: вказано дії, які слід виконати над наближеними числами, і задано граничні похибки вхідних даних. Потрібно оцінити похибку результату.

Розв'язування прямої задачі розглянемо на прикладі.

Нехай дано $a = 7{,}4 \pm 0{,}05$ і $b = 4{,}3 \pm 0{,}02$. Потрібно знайти значення результату S і його похибку, де S визначається за формулою

$$S = \frac{2ab}{\sqrt{a^2 + b}}\,.$$

Скористаємося формулою (3). У нашому випадку вона матиме вигляд $\Delta_S = \left|\frac{\partial S}{\partial a}\right| \cdot \Delta_a + \left|\frac{\partial S}{\partial b}\right| \cdot \Delta_b$. Оскільки частинні похідні від функції S рівні $\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{2b^2}{(a^2+b)^{3/2}}$, $\frac{\partial S}{\partial b} = \frac{2a^3+ab}{(a^2+b)^{3/2}}$, то

$$\Delta_S = \frac{2b^2\Delta_a + (2a^3+ab)\Delta_b}{(a^2+b)^{3/2}} =$$

$$= \frac{2\cdot 4{,}3^2\cdot 0{,}05 + (2\cdot 7{,}4^3 + 7{,}4\cdot 4{,}3)\cdot 0{,}02}{(7{,}4^2+4{,}3)^{3/2}} \approx 0{,}04\,.$$

Таким чином, результат S треба після обчислень заокруглити до другого знаку після коми. Підставивши значення $a \approx 7{,}4$ і $b \approx 4{,}3$ у формулу, отримаємо $S \approx 8{,}2810127 \approx 8{,}28$. Отже, $S = 8{,}28 \pm 0{,}04$.

Обернена задача. Суть задачі: вказано дії, які слід виконати над наближеними числами, і задано максимально допустиму похибку результату. Потрібно встановити, якими повинні бути похибки вхідних даних, щоб отриманий результат мав заданий ступінь точності.

Зауважимо, що ця задача, взагалі кажучи, має безліч розв'язків і тому є математично невизначеною. Для однозначності необхідно задати деякі додаткові умови. Детальніше на цьому зупинимось далі.

Розв'язання оберненої задачі теж розглянемо на прикладі. Нехай відомі грубі наближення параметрів $a \approx 3{,}6$, $b \approx 0{,}17$ і $c \approx 1{,}2$. Які повинні бути похибки цих параметрів, щоб похибка величини $x = \frac{a^2+b}{\pi c}$ не перевищувала $0{,}05$?

Зауважимо, що для обчислення величини x візьмемо наближене значення 3,14 точного числа π, тому вважатимемо, що x залежить від чотирьох параметрів. З формули (3) отримаємо

$$\Delta_x = \frac{2a}{\pi c}\Delta_a + \frac{1}{\pi c}\Delta_b + \frac{a^2+b}{\pi c^2}\Delta_c + \frac{a^2+b}{\pi^2 c}\Delta_\pi\,.$$

Після підстановки в цю рівність відомих величин (Δ_x, a, b, c, π) отримаємо $0{,}05 = \frac{2\cdot 3{,}6}{3{,}14\cdot 1{,}2}\Delta_a + \frac{1}{3{,}14\cdot 1{,}2}\Delta_b + \frac{3{,}6^2+0{,}17}{3{,}14\cdot 1{,}2^2}\Delta_c + \frac{3{,}6^2+0{,}17}{3{,}14^2\cdot 1{,}2}\Delta_\pi$, або після підрахунків

$$0{,}05 = 1{,}91\Delta_a + 0{,}27\Delta_b + 2{,}9\Delta_c + 1{,}11\Delta_\pi\,. \tag{5}$$

Останнє рівняння є рівнянням з чотирма невідомими. Воно має безліч розв'язків. Щоб задача набула однозначності, накладають додаткові умови.

Умова однакового впливу. Вважається, що всі частинні диференціали функції однаково впливають на одержання похибки. Математично це означає $\frac{\partial f}{\partial x_1}\Delta_{x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_2}\Delta_{x_2} = \dots = \frac{\partial f}{\partial x_n}\Delta_{x_n}$. Тоді, використавши формулу (3), отримаємо n рівностей $\Delta_f = n\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|\Delta_{x_i}$, звідки маємо $\Delta_{x_i} = \dfrac{\Delta_f}{n\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|}$, $i = \overline{1,n}$.

Умова рівності граничних абсолютних похибок. Ця умова виражається рівністю $\Delta_{x_1} = \dots = \Delta_{x_n}$. Тоді $\Delta_f = \Delta_{x_j}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|$, звідки маємо $\Delta_{x_j} = \dfrac{\Delta_f}{\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|}$, $j = \overline{1,n}$.

Умова рівності граничних відносних похибок. Цю умову задають співвідношенням $\frac{\Delta_{x_1}}{|x_1|} = \frac{\Delta_{x_2}}{|x_2|} = \dots \frac{\Delta_{x_n}}{|x_n|} = k$. Звідси маємо $\Delta_{x_i} = k|x_i|$, $i = \overline{1,n}$. Підставивши останні рівності у формулу (3), отримаємо $\Delta_f = \sum\limits_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|\Delta_{x_j} = k\sum\limits_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|\cdot|x_j|$. Звідси $k = \dfrac{\Delta_f}{\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|\cdot|x_j|}$, а, отже, $\Delta_{x_i} = \dfrac{\Delta_f\cdot|x_i|}{\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|\cdot|x_j|}$

Таким чином, граничні абсолютні похибки аргументів у кожному з розглянутих випадків визначаються однозначно.

Якщо в умові задачі є параметр (чи параметри), який не пов'язаний із іншими вхідними даними (наприклад, наближення числа π), то похибку такого параметру вибирають довільно, виходячи з умов задачі (наприклад, число π можна взяти з такою точністю $\pi = 3{,}14 \pm 0{,}004$). До решти параметрів застосовують одне з вище наведених правил.

Повернемося до розв'язання останнього прикладу. Скористаємось умовою рівності граничних абсолютних похибок. Після припущень $\Delta_\pi = 0{,}004$, $\Delta_a = \Delta_b = \Delta_c = \Delta$ рівняння (5) набере наступного вигляду $0{,}05 = 5{,}08\Delta + 0{,}004$, звідки $\Delta = 0{,}01$.

Отже, якщо число π взяти з точністю $0{,}004$, а параметри a, b і c обчислити з точністю $0{,}01$, то абсолютна похибка величини x не перевищуватиме $0{,}05$.

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Дайте означення наближеного числа.
(2) Назвіть причини виникнення похибок.
(3) Як класифікуються похибки ? Дайте їх означення.
(4) Які цифри називаються значущими, правильними значущими ? Наведіть приклади.
(5) Що таке заокруглення чисел ? Які є правила заокруглень ? Наведіть приклади.
(6) Використовуючи формули (3) та (4), виведіть формули для обчислення похибок арифметичних дій.
(7) Наведіть приклади розв'язання прямої та оберненої задач теорії похибок.
(8) Які умови накладаються на вихідні дані для того, щоб обернена задача набула однозначності ?

Тема 2. Чисельні методи розв'язування рівнянь з однією змінною

Література : **[1]**, гл. VII, §1, 2; **[2]**, гл. 1, §§1.1–1.6; **[3]**, розд. 2, §§2.1–2.8; **[4]**, гл. VII, §§21–23; **[5]**, гл. 7, §§1, 2, 4; **[6]**, гл. III, §§3.1–3.8; **[7]**, розд. V, §§18–22 .

1. Постановка задачі. Кожне рівняння з однією змінною можна записати в загальному вигляді так

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Нехай всюди далі функція $f(x)$ визначена і неперервна на деякому проміжку $(a,\, b)$. Рівняння (1) можна переписати наступним чином

$$\phi(x) = \psi(x), \tag{2}$$

якщо $f(x)$ представити у вигляді $f(x) = \phi(x) - \psi(x)$. Надалі будемо вважати, що рівняння з однією змінною записане у вигляді (1).

Якщо в рівнянні (1) функція $f(x)$ – алгебраїчний многочлен, то рівняння називається *алгебраїчним.* Якщо функція $f(x)$ містить тригонометричні, показникові, логарифмічні функції чи їх композиції, то рівняння називають *трансцендентним.*

Число ξ називається *коренем* рівняння (1), якщо при підстановці замість x числа ξ рівняння перетворюється в тотожність. Корінь рівняння (1) ще називають *нулем* функції $f(x)$.

Розв'язати рівняння означає знайти множину всіх його коренів, як дійсних, так і комплексних. Основною задачею, що розглядається в цій темі, є задача знаходження дійсних коренів рівняння виду (1). Зауважимо, що знайти точні значення коренів рівняння можна лише для певних класів рівнянь: алгебраїчних рівнянь не вище четвертого степеня (лінійне, квадратне, кубічне, біквадратне), окремих класів алгебраїчних рівнянь вищих степенів та деяких класів трансцендентних рівнянь.

Отже, універсального методу знаходження точних коренів будь-якого рівняння з однією змінною не існує. Крім того, при розв'язуванні практичних задач часто дістають рівняння з коефіцієнтами, які є наближеними числами. В таких випадках постановка задачі про знаходження точних коренів взагалі втрачає сенс. Тому важливого значення набувають методи наближеного обчислення коренів. Задача знаходження коренів рівняння (1) вважається розв'язаною, якщо корені обчислені із наперед заданою точністю.

Критерії досягнення потрібної точності. Фразу *"корінь обчислено із наперед заданою точністю"* треба розуміти так. Нехай ξ – точний корінь рівняння, а $\bar{x}$ – його наближення з точністю ε. Це означає, що $|\xi - \bar{x}| \le \varepsilon$.

Якщо встановлено, що шуканий корінь належить проміжку $[\,a,\, b\,]$, причому $b - a \le \varepsilon$, то числа a і b – наближені значення кореня ξ з точністю ε з недостачею і надлишком відповідно. Зауважимо, що будь-яке число з відрізка $[\,a,\, b\,]$, можна взяти за наближене значення кореня ξ з точністю ε. Як правило, беруть середнє арифметичне чисел a і b, тобто $\xi \approx \dfrac{a+b}{2}$.

Переконатися в тому, що потрібна точність при обчисленні кореня вже досягнута, можна й іншими способами. Зокрема, нехай рівняння задано у вигляді (1). Якщо на деякому проміжку $[\alpha,\, \beta]$ функція $f(x)$ диференційована і в деякій точці $\bar{x} \in [\alpha,\, \beta]$ виконується умова

$$\frac{|f(\bar{x})|}{\min\limits_{x \in [\alpha,\, \beta]} |f'(x)|} \le \varepsilon,$$

то вважають, що $\bar{x}$ – наближене значення кореня ξ з точністю ε.

Мінімум модуля похідної функції f на відрізку $[\alpha,\, \beta]$ можна знайти, використовуючи наступне твердження.

Твердження. *Якщо в інтервалі* $(\alpha,\,\beta)$ *перша і друга похідні функції* $f(x)$ *мають однакові знаки, то мінімум модуля похідної досягається в точці* α.

Якщо в інтервалі $(\alpha,\,\beta)$ *знаки першої і другої похідних функції* $f(x)$ *різні, то мінімум модуля похідної досягається в точці* β.

Або в символічному записі:

$$\forall x \in (\alpha,\,\beta) \quad f'(x)f''(x) > 0 \Longrightarrow \min_{x\in(\alpha,\,\beta)} |f'(x)| = |f'(\alpha)|$$
$$\forall x \in (\alpha,\,\beta) \quad f'(x)f''(x) < 0 \Longrightarrow \min_{x\in(\alpha,\,\beta)} |f'(x)| = |f'(\beta)|$$

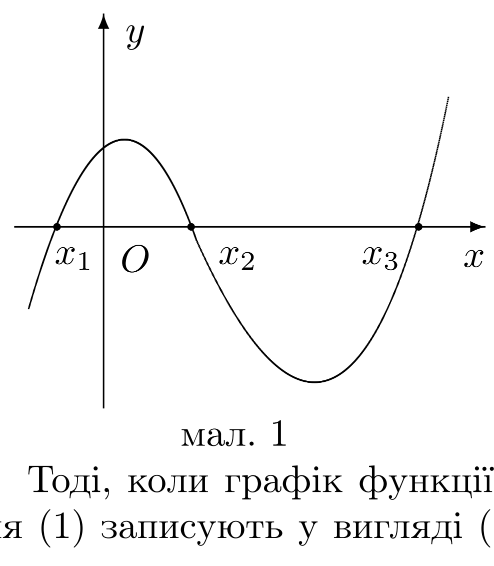
Зауважимо, що у випадку коли $m = \min\limits_{x\in[\alpha,\,\beta]} |f'(x)| = 0$ потрібно змінити один з кінців проміжку $(\alpha,\,\beta)$ так, щоб $m \neq 0$.

Процес розв'язування рівняння з однією змінною складається з двох етапів: *відокремлення коренів* та *уточнення коренів*.

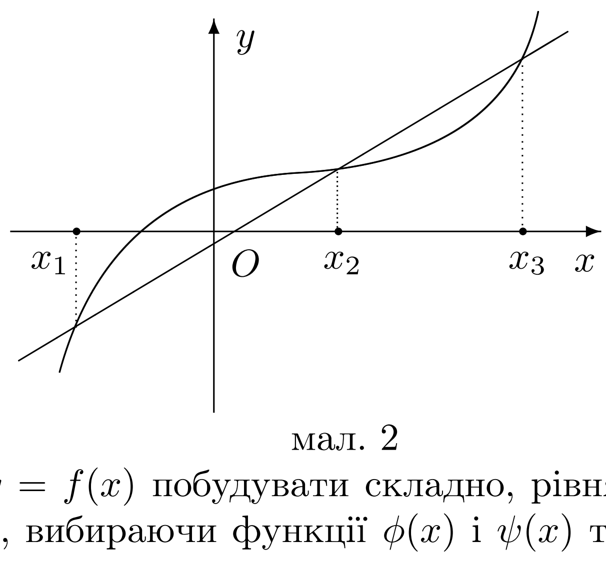
На першому етапі потрібно знайти відрізки, на кожному з яких міститься тільки один корінь рівняння. Другий етап полягає у наближеному обчисленні кожного з коренів із заданою точністю.

2. Відокремлення коренів. Корінь вважається *відокремленим* на відрізку, якщо на ньому рівняння не має інших коренів. Є два способи відокремлення коренів: *графічний* та *аналітичний*.

Графічний метод. Якщо рівняння записане у вигляді (1), то для відокремлення коренів будують графік функції $y = f(x)$. Абсциси точок перетину графіка з віссю Ox є коренями рівняння, оскільки в цих точках $y = 0$ (мал. 1).



мал. 1



мал. 2

Тоді, коли графік функції $y = f(x)$ побудувати складно, рівняння (1) записують у вигляді (2), вибираючи функції $\phi(x)$ і $\psi(x)$ так, щоб їх графіки будувалися без особливих ускладнень. Абсциси точок перетину графіків цих двох функцій є коренями рівняння (мал. 2).

Для графічного методу характерна невисока точність, тому припущення про відокремлені корені, як правило, перевіряють аналітичним методом.

Аналітичний метод. Цей метод базується на деяких властивостях неперервних функцій, що вивчаються в курсі вищої математики. Сформулюємо без доведення відповідні теореми.

Теорема 1 (існування кореня)**.** *Якщо функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[\,a,\,b\,]$ і приймає на кінцях цього відрізка значення різних знаків, тобто $f(a)f(b) < 0$, то всередині відрізка $[\,a,\,b\,]$ існує принаймні один корінь рівняння $f(x) = 0$.*

Зауважимо, що при виконанні умов теореми 1 може виявитись, що на відрізку є кілька коренів. Таку ситуацію зображено на мал.1.

Теорема 2 (існування та єдиності кореня)**.** *Якщо функція $f(x)$ неперервна і монотонна на відрізку $[\,a,\,b\,]$ і приймає на кінцях цього відрізка значення різних знаків, тобто $f(a)f(b) < 0$, то всередині відрізка $[\,a,\,b\,]$ рівняння* (1) *має корінь, причому єдиний.*

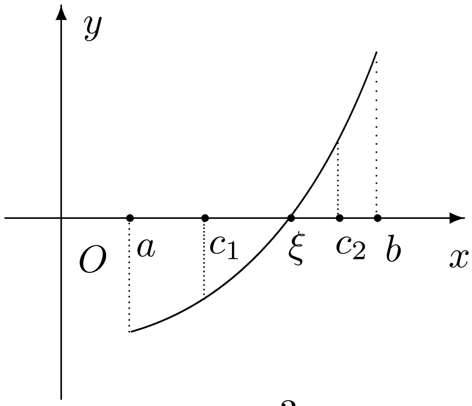
Неперервна функція називається *монотонною* на проміжку $[\,a,\,b\,]$, якщо вона або тільки зростає, або тільки спадає на ньому.

Теорема 3 (існування та єдиності кореня)**.** *Якщо функція $f(x)$ неперервна і диференційована на відрізку $[\,a,\,b\,]$ і приймає на кінцях цього відрізка значення різних знаків, тобто $f(a)f(b) < 0$, а похідна $f'(x)$ зберігає знак всередині відрізка $[\,a,\,b\,]$, то рівняння* (1) *має на проміжку $[\,a,\,b\,]$ корінь, причому єдиний.*

Для того, щоб довести, що похідна зберігає знак всередині відрізка $[\,a,\,b\,]$, потрібно показати, що $[\,a,\,b\,]$ повністю міститься в одному з проміжків знакосталості функції $y = f'(x)$.

3. Уточнення коренів. Розглянемо другий етап наближеного розв'язання рівнянь – уточнення коренів різними методами.

Метод проб. Нехай корінь ξ рівняння $f(x) = 0$ відокремлений на проміжку $[\,a,\,b\,]$, функція $f(x)$ неперервна на цьому відрізку і на його кінцях приймає значення різних знаків. Потрібно знайти наближене значення кореня ξ з точністю ε.

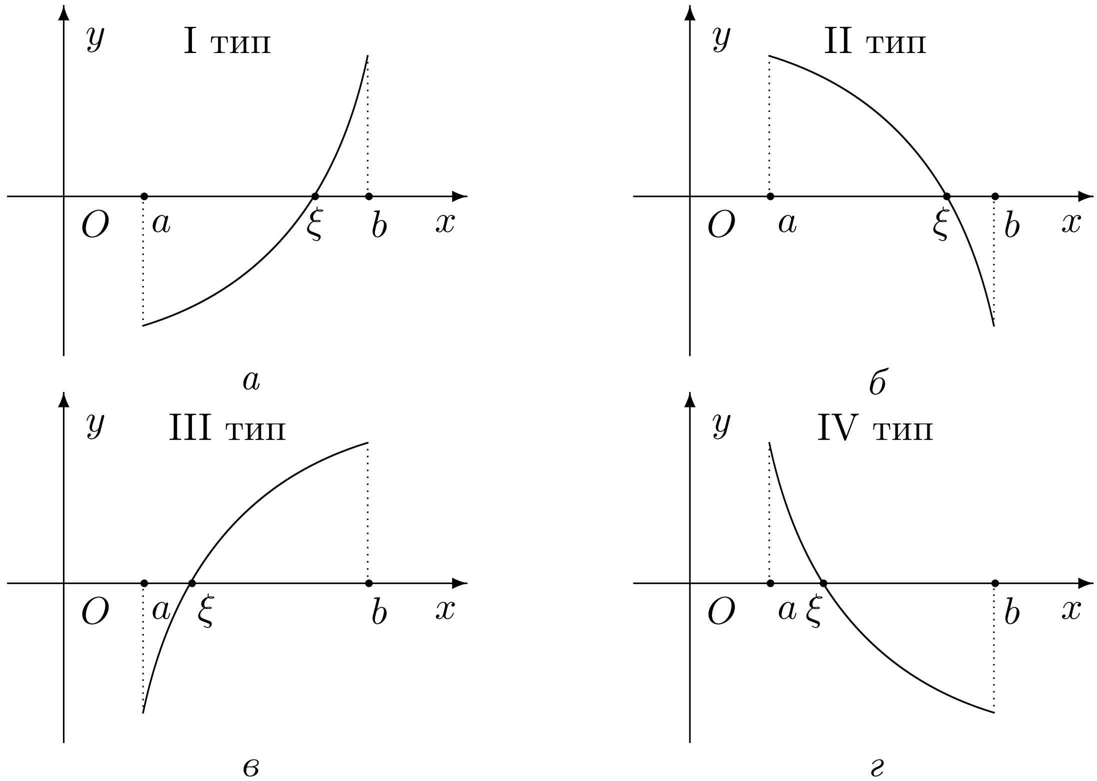


мал. 3

На відрізку $[a, b]$ довільно виберемо точку c_1, яка розділить його на два відрізки $[a, c_1]$ і $[c_1, b]$. Якщо $f(c_1) = 0$, то точка c_1 є коренем рівняння. Але такий випадок малоймовірний, тому опишемо наступний крок методу. Із цих двох відрізків виберемо той, на кінцях якого функція приймає значення різних знаків. У нашому випадку – це відрізок $[c_1, b]$ (див. мал. 3). Потім на цьому звуженому проміжку знову довільним чином візьмемо точку c_2 і виберемо відрізок $[c_1, c_2]$, оскільки $f(c_1) \cdot f(c_2) < 0$. Цей процес продовжуватимемо до тих пір, поки довжина відрізка, на якому знаходиться корінь, не стане меншою за 2ε. Корінь ξ отримаємо як середнє арифметичне кінців знайденого відрізка; при цьому похибка не перевищуватиме ε.

Описаний вище метод проб часто застосовують у вигляді так званого *методу поділу проміжку навпіл.* Як і раніше, на відрізку $[a, b]$ візмемо точку c_1, але не довільно, а так, щоб вона була серединою відрізка $[a, b]$, тобто $c_1 = \frac{a+b}{2}$. Тоді отримаємо два рівних відрізка $[a, c_1]$ і $[c_1, b]$, довжина кожного з яких дорівнює $\frac{b-a}{2}$. Якщо $f(c_1) = 0$, що малоймовірно, то c_1 – точний корінь рівняння $f(x) = 0$. Якщо ж $f(c_1) \neq 0$, то з двох утворених відрізків вибираємо той, на кінцях якого функція $f(x)$ приймає значення різних знаків і позначимо його $[a_1, b_1]$. Потім відрізок $[a_1, b_1]$ ділимо навпіл і проводимо ті ж міркування. Процес поділу відрізка проводимо до тих пір, поки не буде отримано відрізок $[a_n, b_n]$ такий, що $b_n - a_n \leq 2\varepsilon$. За наближене значення кореня беруть $\xi \approx \frac{a_n+b_n}{2}$, при цьому похибка не перевищуватиме $\frac{b-a}{2^{n+1}} \leq \varepsilon$.

Чотири типи розміщення дуги кривої. Нехай на відрізку $[a, b]$ корінь відокремлено. Крім того, перша та друга похідні функції $f(x)$ не змінюють на $[a, b]$ знак.



мал. 4

Для подальших викладок нам буде зручно дати наступну аналітичну характеристику розміщення дуги кривої:

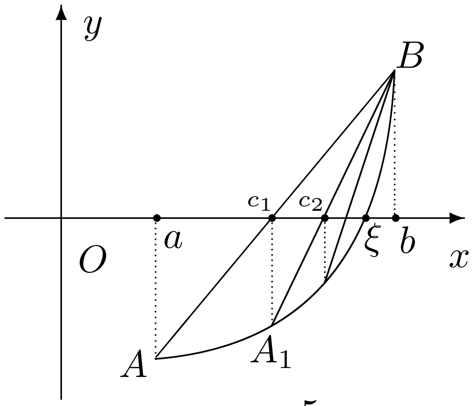
I тип	$f'(x) > 0,$	$f''(x) > 0;$	(мал. 4, *а*)
II тип	$f'(x) < 0,$	$f''(x) < 0;$	(мал. 4, *б*)
III тип	$f'(x) > 0,$	$f''(x) < 0;$	(мал. 4, *в*)
IV тип	$f'(x) < 0,$	$f''(x) > 0.$	(мал. 4, *г*)

З малюнка 4 видно, що для I і II типів розміщення дуги кривої виконується умова $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, а для III і IV типів – умова $f'(x) \cdot f''(x) < 0$.

Нехай всюди далі корінь рівняння $f(x) = 0$ відокремлений на проміжку $[a, b]$, а функція $f(x)$ двічі неперервно диференційована на (a, b), причому похідні $f'(x)$ і $f''(x)$ не дорівнюють нулю і зберігають знак на цьому проміжку. Це припущення назвемо умовою (A).

Метод хорд. Ідея цього методу полягає в тому, що на досить малому відрізку дуга кривої замінюється хордою і абсцису точки перетину хорди з віссю Ox приймають за наближене значення кореня рівняння $f(x) = 0$.

Нехай для функції $f(x)$ виконується умова (A). Подальші мірку-



мал. 5

вання проводитимемо на прикладі I типу розміщення дуги кривої. Графік функції $y = f(x)$ проходить через точки $A(a,\, f(a))$ і $B(b,\, f(b))$ (мал. 5). Абсциса ξ точки перетину графіка з віссю Ox є коренем рівняння, її треба знайти. Знайдемо близьку до ξ точку перетину хорди AB з віссю Ox. Позначимо через c_1 абсцису цієї точки. Рівняння хорди запишеться наступним чином $\frac{x-a}{b-a} = \frac{y-f(a)}{f(b)-f(a)}$. Підставивши в останнє рівняння $x = c_1$ і $y = 0$ (координати точки перетину хорди з віссю Ox), отримаємо $\frac{c_1-a}{b-a} = -\frac{f(a)}{f(b)-f(a)}$, звідки отримуємо $c_1 = a - \frac{b-a}{f(b)-f(a)} \cdot f(a)$.

Тепер корінь ξ знаходиться всередині відрізка $[c_1,\, b]$. Якщо значення c_1 не можна вважати наближеним значенням кореня, то його уточнюють, проводячи хорду через точки $A_1(c_1,\, f(c_1))$ і $B(b,\, f(b))$. Абсцису c_2 точки перетину хорди A_1B з віссю Ox знаходимо за формулою $c_2 = c_1 - \frac{b-c_1}{f(b)-f(c_1)} \cdot f(c_1)$. Потім при потребі шукатимемо значення c_3, відтак c_4 і т.д. Кожне наступне значення шукатиметься через попереднє за формулою

$$c_{n+1} = c_n - \frac{b-c_n}{f(b)-f(c_n)} \cdot f(c_n)\,, \tag{3}$$

яка називається в цьому випадку загальною *формулою методу хорд*. Числа $c_1, c_2, c_3, \ldots, c_n, \ldots$ є наближеними значеннями кореня ξ. Описаний процес продовжують до тих пір, поки не буде отримано наближений корінь з заданою точністю.

Ми розглянули I тип розміщення дуги кривої. Процес обчислення наближених значень кореня проводився шляхом послідовної побудови хорд, правим кінцем яких була одна і та ж точка B – правий кінець відрізка, а лівий кінець змінювався. Для II типу розміщення дуги кривої (мал. 4, *б*) міркування повністю повторюються і залишається вірною формула (3).

Аналогічно розглядають III та IV типи розміщення дуги кривої (мал. 4, *в, г*). Процес отримання наближених значень кореня проводять шляхом послідовної побудови хорд, лівим кінцем яких є точка A, а правий кінець змінюється. В цьому випадку *формула методу* *хорд* матиме дещо інший вигляд

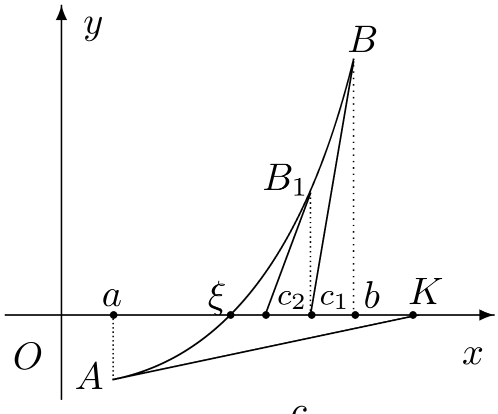
$$c_{n+1} = c_n - \frac{c_n - a}{f(c_n) - f(a)} \cdot f(c_n)\,. \tag{4}$$

Можна сформулювати дві прості ознаки того, коли слід застосовувати формулу (3), а коли (4):

- в методі хорд нерухомим є той кінець відрізка $[\,a,\, b\,]$, для якого знак функції співпадає зі знаком другої похідної;
- якщо в інтервалі $(a,\, b)$ знаки першої і другої похідної функції $f(x)$ співпадають, тобто для всіх $x \in (a,\, b)$ справедлива нерівність $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, то нерухомим в методі хорд є правий кінець відрізка $[\,a,\, b]$; якщо знаки $f'(x)$ і $f''(x)$ різні, тобто виконується $f'(x) \cdot f''(x) < 0$, то нерухомим є лівий кінець.

Метод дотичних (метод Ньютона). Нехай для функції $f(x)$ виконується умова (А).

Геометричний зміст методу дотичних полягає в тому, що дуга кривої $y = f(x)$ замінюється дотичною до цієї кривої, проведеною до одного з кінців відрізка $[\,a,\, b\,]$. Наближене значення кореня знаходять як абсцису точки перетину цієї дотичної з віссю Ox.



мал. 6

Міркування проводитимемо на прикладі I типу розміщення дуги кривої. Проведемо дотичну до графіка фукнкції $y = f(x)$ в точці $B(b, f(b))$ (мал. 6) і знайдемо абсцису точки перетину дотичної з віссю Ox. Позначимо її через c_1, і назвемо першим наближенням кореня. Відомо, що рівняння дотичної в точці $B(b, f(b))$ має вигляд $y - f(b) = f'(b)(x - b)$. Для знаходження точки перетину цієї прямої з віссю Ox потрібно підставити в рівняння дотичної $x = c_1$, $y = 0$. Отримаємо $-f(b) = f'(b)(c_1 - b)$, звідки $c_1 = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$. Тепер корінь ξ знаходиться на відрізку $[\,a,\, c_1]$. Застосовуючи знову метод Ньютона, проведемо дотичну в точці $B_1(c_1, f(c_1))$ і отримаємо $c_2 = c_1 - \frac{f(c_1)}{f'(c_1)}$.

Якщо друге наближення кореня c_2 не є шуканим наближенням, то його уточнюють, застосовуючи метод дотичних до відрізка $[\,a,\, c_2\,]$ і знаходячи таким чином точку c_3 – третє наближення кореня. Процес продовжують до тих пір, поки не буде знайдено наближене значення кореня з потрібною точністю.

Загальна *формула методу дотичних* має вигляд

$$c_{n+1} = c_n - \frac{f(c_n)}{f'(c_n)}\,. \tag{5}$$

Якщо розглянути інші типи розміщення дуги кривої, то можна показати, що формула (5) залишається справедливою і в цих випадках. Єдина відмінність – це вибір точки, до якої проводиться перша дотична.

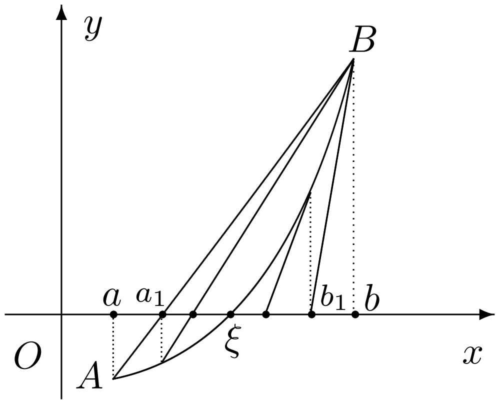
Щоб визначити, до якого з кінців відрізка $[\,a,\, b\,]$ проводити першу дотичну, треба скористатися одним з наступних правил:

- в методі Ньютона першу дотичну проводять до того кінця відрізка $[\,a,\, b\,]$, для якого знак функції співпадає зі знаком другої похідної;
- якщо в інтервалі $(a,\, b)$ знаки першої і другої похідної функції $f(x)$ співпадають, тобто для всіх $x \in (a,\, b)$ справедлива нерівність $f'(x) \cdot f''(x) > 0$, то першу дотичну в методі Ньютона слід проводити в правому кінці відрізка $[\,a,\, b\,]$; якщо знаки похідних $f'(x)$ і $f''(x)$ різні, тобто для всіх $x \in (a,\, b)$ виконується $f'(x) \cdot f''(x) < 0$, то перша дотична проводиться в лівому кінці.

Зауважимо, що коли початкову точку вибрати невдало, то точка перетину дотичної з віссю Ox може не належати відрізку $[\,a,\, b\,]$. Пряма AK на мал. 6 зображає такий випадок.

Комбінований метод хорд і дотичних. Комбінуючи вище розглянуті методи, отримують новий метод знаходження дійсних коренів рівняння $f(x) = 0$, перевагою якого є те, що послідовні наближення лежать по різні боки від шуканого кореня, і тому можна слідкувати в процесі обчислень за досягнутою точністю. Крім того, цей метод збігається значно швидше, ніж два попередні.

Суть комбінованого методу полягає в наступному. До одного з кінців відрізка $[\,a,\, b\,]$ застосовуємо метод хорд, а до іншого – метод дотичних, враховуючи тип розміщення дуги кривої. Зазначимо, що у всіх чотирьох випадках справедлива наступна властивість: якщо формула методу хорд дає наближене значення кореня з недостачею,



мал. 7

то формула методу дотичних – з надлишком, і навпаки. При цьому шуканий корінь ξ знаходиться між цими значеннями. Геометричну ілюстрацію комбінованого методу у випадку першого типу розміщення дуги кривої подано на мал. 7.

Метод ітерацій (метод послідовних наближень). Цей метод є одним із найефективніших і зручно реалізовуваних на ЕОМ методів наближеного розв’язування рівнянь. Його застосовують також для знаходження розв’язків диференціальних, інтегральних та інтегро-диференціальних рівнянь. Суть методу полягає в наступному. Рівняння $f(x) = 0$ замінюють еквівалентним йому рівнянням виду $x = \phi(x)$, де $\phi(x)$ неперервна функція. Далі вибирають деяке початкове наближення кореня x_0 і будують числову послідовність $\{x_n\}$, де кожне наступне значення x_n знаходять через попереднє за *формулою методу ітерацій* $x_n = \phi(x_{n-1})$, $n = 1, 2, \ldots$ Процес побудови послідовності $\{x_n\}$ називається *методом ітерацій* або *методом послідовних наближень*. Легко бачити, що коли послідовність $\{x_n\}$ збіжна, тобто $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = c$, то c є коренем рівняння $x = \phi(x)$, а значить і рівняння $f(x) = 0$. Дійсно, перейшовши до границі у формулі методу ітерацій і врахувавши неперервність функції $\phi(x)$, маємо $c = \lim\limits_{n\to\infty} x_n = \lim\limits_{n\to\infty} \phi(x_{n-1}) = \phi(\lim\limits_{n\to\infty} x_{n-1}) = \phi(c)$. Таким чином, за допомогою методу ітерацій граничне значення c можна знайти з довільним ступенем точності.

Достатні умови збіжності методу та оцінку наближень сформульовано в наступній теоремі, доведення якої подано, наприклад, в [1].

Теорема 4. *Нехай функція $\phi(x)$ визначена і диференційована на проміжку $[\,a,\, b\,]$ і $|\phi'(x)| \le q < 1$. Всі послідовні наближення x_n, які одержуються за рекурентним співвідношенням $x_n = \phi(x_{n-1})$, не виходять за межі $(\,a,\, b\,)$. Тоді послідовність $\{x_n\}$ збіжна, границя цієї послідовності – єдиний корінь рівняння на $(\,a,\, b\,)$ і справедлива наступна оцінка наближень $|c - x_n| < \frac{q^n}{1-q}|x_1 - x_0|$.*

Зазначимо, що у випадку $q \le 1/2$ для оцінки одержаних наближень часто використовують таку нерівність $|x_n - c| \le |x_n - x_{n-1}|$.

Для того, щоб використати метод ітерацій, необхідно представити рівняння $f(x) = 0$ у вигляді $x = \phi(x)$, причому так, щоб $|\phi'(x)| < 1$. Покажемо універсальний спосіб такого представлення

$$f(x) = 0 \Rightarrow x = x - \lambda f(x), (\lambda > 0) \Rightarrow x = \phi(x), \text{ де } \phi(x) = x - \lambda f(x).$$

Легко бачити, що коли $0 < m \leq f'(x) \leq M$, то взявши $\lambda = 1/M$, матимемо $|\phi'(x)| \leq \left|1 - \dfrac{f'(x)}{M}\right| \leq \left|1 - \dfrac{m}{M}\right| = q < 1$.

Зауважимо, що коли $f'(x) < 0$, то рівняння $f(x) = 0$ замінюють на $g(x) = 0$, де $g(x) = -f(x)$, і тоді умова $g'(x) > 0$ виконуватиметься.

Отже, при $\lambda = 1/M$ функція $\phi(x) = x - \lambda f(x)$ задовольняє умови теореми 4.

Геометричну інтерпретацію цього методу за браком місця не подаємо. Крім того, цей матеріал є легко доступним (дивись, наприклад, посібники [1], [3], [5], [6])

Насамкінець наведемо таблицю, з якої легко можна визначити, яку точку слід вибирати за нульове наближення кореня в методі хорд та дотичних.

Таблиця 2

Умова	Метод		Умова	Метод	
	хорд	дотичних		хорд	дотичних
$f(a) \cdot f''(a) > 0$	$c_0 = b$	$c_0 = a$	$f'(x) \cdot f''(x) > 0$	$c_0 = a$	$c_0 = b$
$f(b) \cdot f''(b) > 0$	$c_0 = a$	$c_0 = b$	$f'(x) \cdot f''(x) < 0$	$c_0 = b$	$c_0 = a$

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Як ви розумієте фразу “корінь обчислено із наперед заданою точністю”?

(2) Що означає термін “відокремити корені рівняння”?

(3) Які ви знаєте методи уточнення коренів?

(4) Сформулюйте теореми, на яких грунтується аналітичний метод відокремлення коренів.

(5) В чому суть методу проб, хорд, дотичних, ітерацій? Запишіть розрахункові формули для кожного з цих методів.

(6) Дайте геометричну ілюстрацію методу хорд, дотичних та ітерацій.

(7) Сформулюйте достатні умови збіжності методу ітерацій.

Тема 3. Методи розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь

Література : **[1]**, гл. VI, §§1, 3; **[2]**, гл. 2, §§2.1, 2.2, 2.4, 2.5; **[3]**, розд. 3, §§3.1, 3.2, 3.5; **[4]**, гл. III, §8; **[5]**, гл. 6, §§1, 2, 9; **[6]**, гл. II, §§2.8, 2.11, 2.15–2.17; **[7]**, розд. III, §§11, 13 .

1. Постановка задачі. У процесі вивчення різних питань економіки, природознавства, техніки тощо доводиться розв'язувати системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Зокрема, до таких систем зводиться чисельне розв'язування лінійних диференціальних та інтегральних рівнянь, за допомогою яких описують реальні процеси.

Розглянемо систему n лінійних рівнянь з n змінними:

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

Систему (1) можна записати компактніше $\sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i$, $i = \overline{1,n}$.

Розв'язком системи (1) називається така впорядкована сукупність чисел $c_1, c_2, \ldots, c_n$, яка, будучи підставленою в (1) замість змінних $x_1, x_2, \ldots, x_n$, перетворює всі рівняння в числові тотожності.

Методи розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь можна розбити на дві групи: точні й наближені.

Метод називається *точним*, якщо він дає змогу знайти точний розв'язок системи (1) за допомогою скінченної кількості арифметичних операцій. При цьому припускається, що всі обчислення виконуються точно, а коефіцієнти системи і вільні члени – точні числа. Проте, в процесі практичних обчислень майже завжди доводиться вдаватися до заокруглення чисел, а при наявності ірраціональних коефіцієнтів і вільних членів виникає необхідність заміни їх на раціональні числа. Тому розв'язки, які знайдені за допомогою точних методів, часто є наближеними числами з певними похибками. До точних належать *метод Гауса*, *метод квадратних коренів*, *правило Крамера* та інші.

Метод називається *наближеним* (або *ітераційним*), якщо він дає змогу знайти наближений розв'язок системи (1) із наперед заданою точністю шляхом виконання скінченної кількості арифметичних операцій (навіть, якщо обчислення проводитимуться без заокруглень, а коефіцієнти і вільні члени системи будуть точними числами). Точний розв'язок системи (1) за допомогою ітераційного методу можна знайти тільки теоретично як границю збіжної числової послідовності. Розв'язок системи, знайдений за допомогою якого-небудь наближеного методу, крім похибок заокруглення, як правило, містить похибки самого методу. До наближених належать *метод ітерацій*, *метод Зейделя* та інші.

В прикладних задачах коефіцієнти і вільні члени рівнянь задають, як правило, наближено. Це призводить до появи додаткових, так званих неусувних похибок, які слід враховувати в процесі обчислень і при остаточному заокругленні результату.

2. Метод Гауса. Цей метод ще називають *методом послідовного виключення змінних*. Серед різних його модифікацій ми зупинимося на *схемі єдиного ділення*. За цією схемою розв'язок системи знаходять за два етапи. Спочатку вихідну систему рівнянь зводять до рівносильної їй системи трикутної форми (*прямий хід* методу Гауса). На другому етапі знаходять значення невідомих величин, користуючись "трикутною" системою (*зворотній хід* методу Гауса).

Прямий хід. Не обмежуючи загальності, розглянемо систему трьох лінійних рівнянь з трьома невідомими.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = a_{14}, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = a_{24}, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = a_{34}. \end{cases} \tag{2}$$

Надалі всі коефіцієнти системи (2), включаючи і вільні члени a_{i4}, називатимемо просто коефіцієнтами.

Вважаємо, що $a_{11} \neq 0$. Якщо це не так, то перестановкою рівнянь завжди можна досягти виконання цієї умови.

Поділимо коефіцієнти першого рівняння системи (2) на число a_{11}. Отримаємо

$$x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 = \alpha_{14}. \tag{3}$$

В останньому рівнянні коефіцієнти обчислюються за формулами

$$\alpha_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}}, \qquad j = 2, 3, 4.$$

Виключимо тепер змінну x_1 з другого рівняння системи (2). Для цього помножимо (3) на коефіцієнт біля x_1 у другому рівнянні, взятий з протилежним знаком, тобто на $-a_{21}$. Відтак додамо обидва рівняння почленно. Для того, щоб виключити змінну x_1 з третього рівняння системи (2) виконаємо аналогічні дії: рівняння (3) помножимо на $-a_{31}$ і почленно додамо до третього. В результаті отримаємо наступні два рівняння, які розглянемо як нову систему

$$\begin{cases} \alpha_{22}x_2 + \alpha_{23}x_3 = \alpha_{24}, \\ \alpha_{32}x_2 + \alpha_{33}x_3 = \alpha_{34}, \end{cases} \tag{4}$$

де коефіцієнти обчислюються за формулами

$$\alpha_{ij} = a_{ij} - a_{i1}\alpha_{1j}, \qquad i = 2,3, \quad j = 2,3,4.$$

Таким чином, ми отримали систему рівнянь (4), у якій є на одне рівняння і на одну змінну менше, ніж в системі (2). Далі поступаємо аналогічно. Вважаємо, що $\alpha_{22} \neq 0$ (якщо це не так, то переставимо рівняння системи (4) місцями). Поділимо коефіцієнти першого рівняння на число α_{22}. Отримаємо

$$x_2 + \beta_{23}x_3 = \beta_{24}, \qquad \text{де} \quad \beta_{2j} = \frac{\alpha_{2j}}{\alpha_{22}}, \qquad j = 3,4. \tag{5}$$

З другого рівняння системи (4) виключимо змінну x_2 описаним вище способом. Отримаємо рівняння

$$\beta_{33}x_3 = \beta_{34}, \qquad \text{де} \quad \beta_{3j} = \alpha_{3j} - \alpha_{32}\beta_{2j}, \qquad j = 3,4.$$

Після ділення цього рівняння на β_{33} визначимо

$$x_3 = \gamma_{34}, \qquad \text{де} \quad \gamma_{34} = \frac{\beta_{34}}{\beta_{33}}. \tag{6}$$

Об'єднуючи рівняння (3), (5), (6), отримаємо систему рівнянь трикутної форми

$$\begin{cases} x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 = \alpha_{14}, \\ \qquad\qquad x_2 + \beta_{23}x_3 = \beta_{24}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad x_3 = \gamma_{34}, \end{cases} \tag{7}$$

яка еквівалентна системі (2).

Зауважимо, якщо визначник системи (2) рівний нулю, то система (7) може мати вигляд

$$\begin{cases} x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 = \alpha_{14}, \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = \beta_{24}, \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = \beta_{24}, \end{cases} \quad \text{або} \quad \begin{cases} x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 = \alpha_{14}, \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = \beta_{24}, \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = \gamma_{34}. \end{cases}$$

У першому випадку система матиме безліч розв'язків, у другому – жодного. Тому з остаточного вигляду системи (7) можна сказати скільки розв'язків має система (2).

Зворотній хід. Цей етап полягає у знайденні значень невідомих величин з системи рівнянь (7), і називається зворотнім ходом тому, що спочатку з останнього рівняння отримують значення змінної x_3, потім цю величину підставляють у друге рівняння системи (7) і знаходять x_2, а відтак після підстановки x_2 і x_3 в перше рівняння отримують x_1. Розв'язок знаходять за формулами

$$\begin{cases} x_3 = \gamma_{34}, \\ x_2 = \beta_{24} - \beta_{23}x_3, \\ x_1 = \alpha_{14} - \alpha_{12}x_2 - \alpha_{13}x_3. \end{cases} \tag{8}$$

Оскільки системи рівнянь (2) і (7) еквівалентні, то розв'язок (8) системи (7) буде розв'язком системи (2).

Організація та контроль обчислень. Описані вище перетворення системи лінійних алгебраїчних рівнянь фактично є перетвореннями її коефіцієнтів (див. відповідні формули). Тому немає потреби виписувати цілу систему, достатньо записати матрицю коефіцієнтів та стовпчик вільних членів і над ними виконати перетворення. Всі записи доцільно розмістити в окремій таблиці (див. табл. 3). При розв'язуванні задач за допомогою чисельних методів необхідно вміти здійснювати перевірку правильності отриманих результатів (заключний контроль обчислень). Якщо кількість обчислень велика, то бажано вміти перевіряти правильність проміжних результатів (поточний контроль обчислень).

Схема єдиного ділення дозволяє проводити і поточний, і заключний контроль обчислень. Щоб вчасно виявити і виправити обчислювальні помилки, у таблицю 3 введено, крім природніх стовпчиків з коефіцієнтами і вільним членом системи (1), два додаткових – під спільною назвою "Контроль": "контрольна сума" і "рядкова сума".

На першому кроці елементи обох стовпчиків обчислюються однаково – це сума коефіцієнтів відповідного рядка розширеної матриці.

У процесі зведення вихідної системи до трикутної форми над елементами стовпчика "контрольна сума" виконують ті ж перетворення, що й над коефіцієнтами системи. Для цього можна скористатися відповідними формулами, підставивши на місце другого індекса у відповідних коефіцієнтах цифру 5.

Елементи стовпчика "рядкова сума" завжди обчислюються однаково – це сума коефіцієнтів відповідного рядка таблиці, не включаючи контрольної суми.

Таблиця 3

Кроки	Номер рівняння	Коефіцієнти при змінних			Вільний член	Контроль	
		x_1	x_2	x_3		Контрольна сума	Рядкова сума
1	1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{15}	$\sum_{j=1}^{4} a_{1j}$
	2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}	a_{25}	$\sum_{j=1}^{4} a_{2j}$
	3	a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}	a_{35}	$\sum_{j=1}^{4} a_{3j}$
2	1	1	α_{12}	α_{13}	α_{14}	α_{15}	$\sum_{j=2}^{4} \alpha_{1j} + 1$
	2	0	α_{22}	α_{23}	α_{24}	α_{25}	$\sum_{j=2}^{4} \alpha_{2j}$
	3	0	α_{32}	α_{33}	α_{34}	α_{35}	$\sum_{j=2}^{4} \alpha_{3j}$
3	2	0	1	β_{23}	β_{24}	β_{25}	$\sum_{j=3}^{4} \beta_{2j} + 1$
	3	0	0	β_{33}	β_{34}	β_{35}	$\sum_{j=3}^{4} \beta_{3j}$
4	3	0	0	1	γ_{34}	γ_{35}	$\gamma_{34} + 1$

Поточний контроль обчислень полягає у порівнянні елементів останніх двох стовпчиків. Якщо значення збігаються або відрізняються на відносно малу величину, то обчислення виконано правильно і можна переходити до обробки наступного рядка. Якщо ці величини значно відрізняються, то при обчисленні даного рядка допущено помилку.

На зворотньому ході після знаходження розв'язку x_1, x_2, x_3 системи (2) роблять наступне. У формули (8) замість коефіцієнтів γ_{34}, β_{24}, α_{14} підставляють коефіцієнти γ_{35}, β_{25}, α_{15} відповідно і знаходять числа $\bar{x}_1$, $\bar{x}_2$, $\bar{x}_3$. Ці числа (в межах заданої точності) повинні задовольняти рівність $\bar{x}_i = x_i + 1$, $i = 1, 2, 3$. Саме в цьому і полягає суть заключного контролю.

Можна також знайдений розв'язок x_1, x_2, x_3 підставити в систему (2) і безпосередньо переконатися, чи задовольняються всі рівності (знову ж таки в межах заданої точності).

Уточнення розв'язку. Через можливі заокруглення під час обчислень значення лівих частин рівнянь системи (2), взагалі кажучи, не збігатимуться зі значеннями їх правих частин. Значення різниць між вільними членами вихідної системи лінійних рівнянь і результатами підстановки в ці рівняння обчислених значень змінних називаються *нев'язками.*

Нехай x_1^0, x_2^0, x_3^0 – розв'язок системи (2), знайдений за методом Гауса. В такому разі нев'язки обчислюються за формулами

$$\begin{aligned}\delta_1 &= a_{14} - (a_{11}x_1^0 + a_{12}x_2^0 + a_{13}x_3^0),\\ \delta_2 &= a_{24} - (a_{21}x_1^0 + a_{22}x_2^0 + a_{23}x_3^0),\\ \delta_3 &= a_{34} - (a_{31}x_1^0 + a_{32}x_2^0 + a_{33}x_3^0).\end{aligned} \tag{9}$$

Якщо всі нев'язки малі, то вважають, що розв'язок системи (2) знайдено з потрібною точністю, в іншому випадку його потрібно уточнити. Розв'язок шукають у вигляді $x_1 = x_1^0 + \varepsilon_1$, $x_2 = x_2^0 + \varepsilon_2$, $x_3 = x_3^0 + \varepsilon_3$, де ε_1, ε_2, ε_3 – шукані похибки розв'язку. Підставимо ці рівності у вихідну систему (2). Тепер, якщо врахувати формули (9), для знаходження чисел ε_i, $i = 1, 2, 3$ отримаємо систему

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\varepsilon_j = \delta_i, \qquad i = 1, 2, 3. \tag{10}$$

Остання система рівнянь відрізняється від системи (2) лише стовпчиком вільних членів. Для її розв'язання за схемою єдиного ділення в таблицю 3 достатньо вписати справа стовпець вільних членів системи (10), елементами якого будуть нев'язки (9). Далі над числами з цього стовпця потрібно виконати ті ж перетворення, що й над вільними членами системи (2). Решта таблиці залишається без змін.

3. Метод простої ітерації. Нехай задано систему рівнянь (1). Подамо цю систему у вигляді еквівалентної їй системи

$$\begin{cases} x_1 = \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \cdots + \alpha_{1n}x_n + \beta_1,\\ x_2 = \alpha_{21}x_1 + \alpha_{22}x_2 + \cdots + \alpha_{2n}x_n + \beta_2,\\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\ x_n = \alpha_{n1}x_1 + \alpha_{n2}x_2 + \cdots + \alpha_{nn}x_n + \beta_n, \end{cases} \tag{11}$$

або у вигляді матричного рівняння $\bar{x} = \alpha\bar{x} + \bar{\beta}$.

Суть цього наближеного методу полягає в тому, що, починаючи з деякого початкового наближення, на кожному кроці обчислювального процесу це наближення розв'язку поліпшують, дістаючи при цьому нове (точніше) наближення. Цей процес продовжують доти, поки розв'язок не буде знайдено з потрібною точністю.

Останню систему рівнянь будемо розв'язувати методом послідовних наближень. За початкове наближення розв'язку візьмемо деякий вектор $\bar{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ де x_1^0, x_2^0, …, x_n^0 – довільні числа. Тоді послідовно знаходимо перше наближення $\bar{x}^1 = \alpha\bar{x}^0 + \bar{\beta}$, друге наближення $\bar{x}^2 = \alpha\bar{x}^1 + \bar{\beta}$ і т.д. Взагалі, якщо вже побудовано k-те наближення, то наступне будуємо за формулою $\bar{x}^{k+1} = \alpha\bar{x}^k + \bar{\beta}$, або в розгорнутому вигляді

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \alpha_{11}x_1^k + \alpha_{12}x_2^k + \cdots + \alpha_{1n}x_n^k + \beta_1, \\ x_2^{k+1} = \alpha_{21}x_1^k + \alpha_{22}x_2^k + \cdots + \alpha_{2n}x_n^k + \beta_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ x_n^{k+1} = \alpha_{n1}x_1^k + \alpha_{n2}x_2^k + \cdots + \alpha_{nn}x_n^k + \beta_n. \end{cases} \tag{12}$$

Якщо кожна з числових послідовностей $\{x_i^k\}_{k\in\mathbb{N}}$, $i = \overline{1,n}$ має границю x_i^*, тобто $x_i^* = \lim\limits_{k\to\infty} x_i^k$, $(i = \overline{1,n})$, то сукупність значень $(x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*)$ є розв'язком системи (11), а, отже, і системи (1).

Таким чином, формула (12) визначає метод простої ітерації. Його алгоритм простий і зручний для обчислень на ЕОМ. Достатні умови збіжності методу простої ітерації сформульовано в наступній теоремі.

Теорема 1. *Якщо матриця системи* (11) *задовольняє хоч одну з умов*

- *сума абсолютних значень коефіцієнтів кожного рядка матриці менша за одиницю, тобто* $l_0 = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |\alpha_{ij}| < 1$;
- *сума абсолютних значень коефіцієнтів кожного стовпчика матриці менша за одиницю, тобто* $l_1 = \max\limits_{1\le j\le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |\alpha_{ij}| < 1$;
- *сума квадратів всіх коефіцієнтів матриці менша за одиницю, тобто* $l^2 = \sum\limits_{i=1}^{n} \sum\limits_{j=1}^{n} \alpha_{ij}^2 < 1$,

то система рівнянь (11) *має єдиний розв'язок. Цей розв'язок є границею послідовності* $\{\bar{x}^k\}_{k\in\mathbb{N}}$, *побудованої за методом простої ітерації* (12), *виходячи з будь-якого початкового наближення* $\bar{x}^0$.

Доведення цієї теореми дивись, наприклад, в посібниках [1], [5].

На практиці часто за початкове наближення беруть стовпчик вільних членів. Алгоритм розв'язування системи (11) методом ітерацій можна записати наступним чином:

1. Обчислення величини $l_0 = \max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |\alpha_{ij}|$.
2. Перевірка умови $l_0 < 1$. Якщо ця умова не виконується, то метод застосовувати не варто, в протилежному випадку переходимо до пункту 3.
3. Обчислення допустимої похибки $\varepsilon_1 = \dfrac{1-l_0}{l_0}\varepsilon$, де ε – точність, з якою потрібно знайти розв'язок.
4. Вибір початкового наближення $\bar{x}^0$.
5. Обчислення наступного наближення $\bar{x}^{k+1}$ через знайдене на попередньому кроці значення $\bar{x}^k$.
6. Перевірка умови $\max\limits_{1\le i\le n} |x_i^{k+1} - x_i^k| < \varepsilon_1$. Якщо ця умова виконується, то процес ітерацій завершується і вектор $\bar{x}^{k+1}$ вважають наближеним значенням розв'язку. В іншому випадку переходять до пункту 5.

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Дайте означення точних і наближених методів розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

(2) В чому суть прямого та зворотнього ходів методу Гауса?

(3) Зобразіть у вигляді таблиці схему єдиного ділення.

(4) Чому виникає необхідність уточнення розв'язку, одержаного методом Гауса? Яким способом уточнюється розв'язок?

(5) В чому суть методу простої ітерації для систем лінійних алгебраїчних рівнянь?

(6) Які достатні умови збіжності методу простої ітерації для систем лінійних алгебраїчних рівнянь?

Тема 4. Інтерполювання функцій

Література : **[1]**, гл. II, §§1–3, 10, 11; **[2]**, гл. 4, §§4.1–4.3, 4.5; **[3]**, розд. 5, §§5.1–5.6; **[4]**, гл. IV, §§10–13; **[5]**, гл. 2, §§1–6; **[6]**, гл. IV, §§4.1, 4.3–4.10, 4.12; **[7]**, розд. VI, §§23–27 .

1. Постановка задачі. При розв'язуванні багатьох задач науково-технічного характеру доводиться використовувати таблично чи графічно задані функції. Крім того, бувають випадки, коли аналітичний вираз функції $f(x)$ відомий, проте є занадто складним і незручним для обчислень. У таких випадках вихідну функцію замінюють на більш просту, яка в деякому сенсі близька до даної. Інтерполювання – це один із способів знаходження таких функцій.

В загальному вигляді задача інтерполювання формулюється наступним чином. Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично, тобто в $n+1$ різних точках $x_0, x_1, \ldots, x_n$відомі значення функції $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1), \ldots,\ y_n = f(x_n)$. Потрібно підібрати функцію $\phi(x)$, що задовольняє наступні умови:

- в точках $x_0, x_1, \ldots, x_n$значення функції $\phi(x)$ співпадають зі значеннями даної функції $y_i = f(x_i) = \phi(x_i)$, $i = \overline{1, n}$;
- в інших точках з області визначення виконується наближена рівність $f(x) \approx \phi(x)$.

Функція $\phi(x)$ називається *інтерполюючою функцією*, процес її побудови – *інтерполюванням*, а точки $x_0, x_1, \ldots, x_n$– *вузлами інтерполювання.* Зауважимо, що коли аргумент x знаходиться поза межами проміжку інтерполювання $[x_0,\ x_n]$, то задача побудови функції $\phi(x)$ називається *екстраполюванням.*

З геометричної точки зору задача інтерполювання для функції однієї змінної означає побудову кривої, яка проходить через точки площини з координатами $(x_0,\ y_0)$, $(x_1,\ y_1)$, $\ldots$, $(x_n,\ y_n)$. Однак цілком очевидно, що через дані точки можна провести безліч кривих. Тому задача інтерполювання в її загальному вигляді не є однозначно визначеною.

2. Параболічне інтерполювання. Якщо інтерполюючу функцію $\phi(x)$ вибирати з класу многочленів, то в цьому випадку інтерполювання називають *параболічним.* Параболічне інтерполювання найзручніше, оскільки многочлени прості за формою, їх легко обчислювати, диференціювати та інтегрувати, вони не мають особливих точок і можуть набувати довільних значень.

Інколи зручно використовувати інші класи функцій. Якщо, наприклад, функція $f(x)$ періодична, то інтерполюючу функцію доцільно вибирати з класу тригонометричних функцій. У випадках, коли функція набуває безмежно великих значень в околі деякої точки, функцію $\phi(x)$ вибирають з класу дробово-раціональних функцій.

Ми розглядатимемо лише задачу параболічного інтерполювання. Треба побудувати многочлен степеня n

$$P_n = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x + a_n, \tag{1}$$

який задовольняв би умови

$$P_n(x_i) = y_i, \qquad i = \overline{1, n}\,, \tag{2}$$

де $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \ldots, y_n = f(x_n)$.

Для визначення невідомих коефіцієнтів многочлена (1) побудуємо систему лінійних рівнянь на основі умов (2)

$$\begin{cases} a_0 x_0^n + a_1 x_0^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x_0 + a_n = & y_0, \\ a_0 x_1^n + a_1 x_1^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x_1 + a_n = & y_1, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_0 x_n^n + a_1 x_n^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x_n + a_n = & y_n. \end{cases} \tag{3}$$

Це є система $n+1$ лінійних рівнянь з $n+1$ невідомими. Зауважимо, що невідомими величинами тут є числа a_0, a_1, $\ldots$, a_n.

Система (3) має єдиний розв'язок, оскільки її визначник є визначником Вандермонда. Останній відмінний від нуля, бо за умовою задачі всі вузли інтерполювання різні. Таким чином, існує єдиний многочлен виду (1), що задовольняє умови (2).

Многочлен $P_n(x)$ називають *інтерполяційним многочленом*, наближену рівність $f(x) \approx P_n(x)$ – *інтерполяційною формулою.*

Зауважимо, що хоч інтерполяційний многочлен, що задовольняє умови (2), і єдиний, проте можливі різні форми його запису.

Як правило, інтерполяційний многочлен будують в одному з наступних випадків:

- функція задана таблично, а треба знайти її значення для тих значень аргументу, яких в таблиці немає;
- функція задана графічно, а треба знайти її наближений аналітичний вираз;
- функція задана аналітично, але її вираз досить складний і незручний для подальших математичних перетворень.

3. Інтерполяційний многочлен Лагранжа. Найбільш загальною формулою параболічного інтерполювання є інтерполяційна формула Лагранжа. У цьому випадку інтерполяційний многочлен $L_n(x)$ шукатимемо у вигляді

$$\begin{aligned} L_n(x) = a_0(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n-1})(x-x_n)+ \\ a_1(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_{n-1})(x-x_n)+\cdots+ \\ a_i(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)+\cdots+ \\ a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-2})(x-x_{n-1}). \end{aligned} \quad (4)$$

Кожен доданок цього виразу є многочленом степеня n, причому при кожному з коефіцієнтів a_i, $i=\overline{1,n}$ немає множника $(x-x_i)$.

Для того, щоб знайти коефіцієнти a_i, $i=\overline{1,n}$, підставимо в (4) почергово $x=x_i$, $i=\overline{1,n}$ і використаємо умови (2). Поклавши $x=x_i$, дістанемо

$$L_n(x_i)=y_i=a_i(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n),$$

звідки $a_i=\dfrac{y_i}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$.

Тепер, якщо підставити ці вирази для коефіцієнтів a_i у формулу (4), отримаємо інтерполяційний многочлен

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}y_i\,. \quad (5)$$

Останній вираз називають *інтерполяційним многочленом Лагранжа*, а наближену рівність $f(x)\approx L_n(x)$ – *інтерполяційною формулою Лагранжа.*

Многочлен (5) може бути записаний у наступному вигляді

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}y_i\,, \quad (6)$$

де $\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ – многочлен $n+1$-го степеня. Для виведення формули (6) продиференціюємо $\omega_{n+1}(x)$, використавши формулу диференціювання добутку

$$\omega'_{n+1}(x)=\sum_{i=0}^{n}(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)\,.$$

Поклавши тут $x = x_i$, $i = \overline{1, n}$, отримаємо

$$\omega'_{n+1}(x_i) = (x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n) .$$

Підставивши вирази для $\omega_{n+1}(x)$ і $\omega'_{n+1}(x_i)$ у (5), дістанемо потрібне співвідношення (6).

Досить поширеними є випадки *лінійного* і *квадратичного* інтерполювання. Відповідні формули дістанемо із загальної, якщо в (5) приймемо $n = 1$ і $n = 2$.

Нехай $n = 1$, тобто значення функції $f(x)$ задано в двох вузлах x_0 і x_1. Тоді з формули (5) отримаємо

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 . \tag{7}$$

Ця формула є *формулою лінійного інтерполювання.* Многочлен $L_1(x)$ є многочленом першого степеня, який є рівнянням прямої, що проходить через точки (x_0, y_0) і (x_1, y_1).

Поклавши у формулі (5) $n = 2$, дістанемо

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2 .$$

Останню рівність називають *формулою квадратичного інтерполювання.* Функція $y = L_2(x)$ – це квадратична функція, графіком якої є парабола, що проходить через три задані точки (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2). Суть квадратичного інтерполювання полягає в тому, що дуга кривої на відрізку $[x_0,\, x_2]$ замінюється дугою параболи, яка в трьох заданих точках (вузлах інтерполювання) перетинається з графіком $y = f(x)$.

4. Організація ручних обчислень за формулою Лагранжа. Безпосереднє застосування формули Лагранжа вимагає великої кількості однотипних обчислень. Організація обчислень буде суттєво покращена, якщо користуватися спеціальною обчислювальною схемою.

Для цього формулу (6) потрібно записати у наступному вигляді $L_n(x) = \omega_{n+1}(x) \sum\limits_{i=0}^{n} \frac{y_i}{P_i}$, де позначено $P_i = (x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)$, $i = \overline{1, n}$.

Результати обчислень заносять у таблицю 4. Спочатку обчислюють і заносять у відповідні клітинки всеможливі різниці $x_i - x_j$, $i \neq j$,

$x - x_i$, $i, j = \overline{1, n}$, де x – точка, в якій знаходимо значення інтерполяційного многочлена Лагранжа. Останні різниці у таблиці для зручності підкреслюють. Потім обчислюють добутки P_i всіх різниць у рядках. Зауважимо, що кожне з чисел P_i, $i = \overline{1, n}$, є знаменником у формулі Лагранжа. На наступному кроці обчислюють частки y_i/P_i і на цьому завершується заповнення таблиці.

Таблиця 4

i	x_i	Різниці					P_i	y_i	$\frac{y_i}{P_i}$
0	x_0	$\underline{x - x_0}$	$x_0 - x_1$	$x_0 - x_2$	...	$x_0 - x_n$	P_0	y_0	$\frac{y_0}{P_0}$
1	x_1	$x_1 - x_0$	$\underline{x - x_1}$	$x_1 - x_2$	...	$x_1 - x_n$	P_1	y_1	$\frac{y_1}{P_1}$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
n	x_n	$x_n - x_0$	$x_n - x_1$	$x_n - x_2$	...	$\underline{x - x_n}$	P_n	y_n	$\frac{y_n}{P_n}$

На основі складеної таблиці обчислюють:

- суму $S = \sum_{i=0}^{n} \frac{y_i}{P_i}$ елементів останнього стовпчика;
- добуток D діагональних елементів (у таблиці вони підкреслені).

Цей добуток дорівнює значенню многочлена $\omega_{n+1}(x)$ в точці x. Остаточне значення $L_n(x)$ отримують, помноживши знайдену суму S на добуток D, тобто $L_n(x) = S \cdot D$.

Недоліком описаної схеми є те, що для кожного нового значення аргументу x або при підвищенні порядку многочлена, тобто при залученні нових вузлів, всі обчислення виконують заново.

5. Інтерполяційна схема Ейткіна. У випадку, коли немає потреби знати наближений аналітичний вираз таблично заданої функції, а треба лише обчислити її значення в деякій точці, яка не збігається з жодним з вузлів інтерполювання, зручно використовувати *інтерполювання за схемою Ейткіна*, особливістю якої є однотипність обчислень. Перевага цієї схеми над вище описаним методом полягає в тому, що при залученні нових вузлів не потрібно перераховувати все спочатку, а варто лише скористатися попередніми обчисленнями для підвищення степеня многочлена Лагранжа.

Обчислення значення функції в точці, яка не збігається з вузлами інтерполювання, починається із задіювання двох вузлів інтерполювання з послідовним включенням нових аж до досягнення потрібної точності. Скористаємось формулою Лагранжа у випадку лінійної інтерполяції (див. формулу (7)). На відрізку $[x_0, x_1]$ інтерполяційне значення функції (позначимо його через $P_{0,1}(x)$) можна подати у рівносильному до рівності (7) вигляді $P_{0,1}(x) = \dfrac{1}{x_1 - x_0}\begin{vmatrix} y_0 & x_0 - x \\ y_1 & x_1 - x \end{vmatrix}$, на відрізку $[x_1, x_2]$ – у вигляді $P_{1,2}(x) = \dfrac{1}{x_2 - x_1}\begin{vmatrix} y_1 & x_1 - x \\ y_2 & x_2 - x \end{vmatrix}$, і, нарешті, на відрізку $[x_0, x_2]$ – у вигляді $P_{0,2}(x) = \dfrac{1}{x_2 - x_0}\begin{vmatrix} y_0 & x_0 - x \\ y_2 & x_2 - x \end{vmatrix}$.

Замінимо тепер y_0 і y_2 в останній формулі на $P_{0,1}(x)$ і $P_{1,2}(x)$ відповідно. Отримаємо наступний вираз

$$P_{0,1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_0}\begin{vmatrix} P_{0,1}(x) & x_0 - x \\ P_{1,2}(x) & x_2 - x \end{vmatrix}.$$

Якщо в останньому виразі відкрити визначник, то безпосередньо можна переконатися, що $P_{0,1,2}(x)$ – це інтерполяційний многочлен Лагранжа другого порядку, для якого виконуються рівності

$$P_{0,1,2}(x_0) = y_0, \quad P_{0,1,2}(x_1) = y_1, \quad P_{0,1,2}(x_2) = y_2.$$

Таким чином, застосовуючи лінійну інтерполяцію до многочленів $P_{0,1}(x)$ і $P_{1,2}(x)$, ми отримали інтерполяційний многочлен другого степеня $P_{0,1,2}(x)$.

Ця схема узагальнюється на інтерполяційні многочлени вищих степенів. Методом математичної індукції можна довести, що інтерполяційний многочлен n-го степеня, побудований за $n+1$ вузлом, отримується шляхом лінійної інтерполяції, застосованої до двох різних інтерполяційних поліномів $(n-1)$-го степеня, кожен з яких побудований за певними n вузлами інтерполювання. Значення інтерполяційного многочлена степеня n можна обчислити за формулою

$$P_{0,1,\ldots,n}(x) = \frac{1}{x_n - x_0}\begin{vmatrix} P_{0,1,\ldots,n-1}(x) & x_0 - x \\ P_{1,2,\ldots,n}(x) & x_n - x \end{vmatrix},$$

де $P_{0,1,\ldots,n-1}(x)$ і $P_{1,2,\ldots,n}(x)$ – значення інтерполяційних многочленів $(n-1)$-го степеня, обчислених у точці x на попередньому кроці обчислень. Можна переконатися, що $P_{0,1,\ldots,n}(x_i) = y_i$, $i = \overline{1,n}$

і $P_{0,1,\dots,n}(x)$ збігається з інтерполяційним многочленом Лагранжа n-го степеня.

В обчисленнях за цією схемою нові вузли x_i залучають доти, поки самі обчислення не покажуть, що необхідної точності досягнуто. Іншими словами, потреби в залученні нових вузлів немає, якщо для деякого натурального $k > 1$ виконується умова

$$|P_{0,1,\dots,k-1}(x) - P_{0,1,\dots,k}(x)| \le \varepsilon\,,$$

де ε – точність обчислень.

6. Інтерполяційні формули Ньютона. Табулювання функцій, як правило, проводять для рівновіддалених вузлів, тобто $x_i = x_0 + ih$, $i = \overline{1, n}$. Число h в цьому випадку називають *кроком інтерполяції*.

Скінченні різниці. Виведення інтерполяційних формул для рівновіддалених вузлів вимагає введення нового поняття.

Скінченною різницею першого порядку назвемо різницю між значеннями функції у сусідніх вузлах інтерполювання, тобто вираз $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i = f(x_{i+1}) - f(x_i)$, $i = \overline{1, n-1}$. Зі скінченних різниць першого порядку утворюють *скінченні різниці другого порядку* $\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$, $i = \overline{1, n-2}$. Аналогічно будують скінченні різниці вищих порядків, зокрема, для всіх $k \in \mathbb{N}$, $2 \le k \le n$, маємо

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i\,, \qquad i = \overline{1, n-k}\,. \tag{8}$$

Зауважимо, що скінченних різниць порядку k є рівно $n - k + 1$, тобто із зростанням порядку скінченних різниць їх кількість зменшується.

Для більшої наглядності при обчисленні скінченних різниць їх заносять у таблицю (див. табл. 5). Покажемо на прикладі процес заповнення такої таблиці.

Нехай задано функцію $y = x^3 - 4x^2 + 7x - 3$. Необхідно скласти таблицю скінченних різниць від початкового значення $x = 0$ до кінцевого $x = 4$ з кроком $h = 1$.

Таблиця 5

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
0	-3	4	-2	6	0
1	1	2	4	6	
2	3	6	10		
3	9	16			
4	25				

Знайдемо значення функції у вузлах $x_0 = 0$, $x_1 = 1$, $x_2 = 2$, $x_3 = 3$, $x_4 = 4$. Маємо $y_0 = -3$, $y_1 = 1$, $y_2 = 3$, $y_3 = 9$, $y_4 = 25$. Тепер знайдемо скінченні різниці першого порядку.

За означенням $\Delta y_0 = y_1 - y_0 = 1-(-3) = 4$, $\Delta y_1 = y_2 - y_1 = 3-1 = 2$ і т. д. Далі з формули (8) отримуємо скінченні різниці другого порядку $\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = 2-4 = -2$, $\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1 = 6-2 = 4$ і т. д.; третього: $\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0 = 4-(-2) = 6$, $\Delta^3 y_1 = \Delta^2 y_2 - \Delta^2 y_1 = 10-4 = 6$ і четвертого: $\Delta^4 y_0 = \Delta^3 y_1 - \Delta^3 y_0 = 6-6 = 0$. Зрозуміло, що елементи стовпчиків таблиці 5, починаючи з третього, є різницями відповідних двох чисел із сусіднього зліва стовпчика. Таким чином, для обчислення скінчених різниць можна користуватися таблицею, аналогічною до таблиці 5.

Перша інтерполяційна формула Ньютона. Нехай деяка функція $f(x)$ задана своїми значеннями у рівновіддалених вузлах інтерполювання і для цієї функції вже складено таблицю скінченних різниць. Будемо шукати інтерполяційний многочлен у вигляді

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + \cdots + a_n(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}). \qquad (9)$$

Очевидно, що це є многочлен n-го степеня (це видно з останнього доданку). Значення невідомих коефіцієнтів a_0, a_1, ..., a_n знайдемо з умов $P_n(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = \overline{1,n}$.

Підставимо в (9) $x = x_0$, отримаємо $P_n(x_0) = a_0 = y_0$, звідки маємо $a_0 = y_0$. Після підстановки в (9) $x = x_1$ отримаємо тотожність $P_n(x_1) \equiv a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_1$. Враховуючи, що $a_0 = y_0$, отримаємо $y_1 = y_0 + a_1 h$, де $h = x_1 - x_0$. Звідси маємо $a_1 = \dfrac{y_1 - y_0}{h} = \dfrac{\Delta y_0}{h}$. При $x = x_2$ маємо $P_n(x_2) \equiv a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$, звідки $y_2 = y_0 + \dfrac{\Delta y_0}{h}(x_0 + 2h - x_0) + a_2(x_0 + 2h - x_0)h$. Останню рівність запишемо через скінченні різниці $y_2 = y_0 + 2\Delta y_0 + \Delta^2 y_0 = y_0 + 2\Delta y_0 + 2h^2 a_2$. Звідси $a_2 = \dfrac{\Delta^2 y_0}{2h^2}$. Аналогічно можна показати, що при підстановці $x = x_3$ отримаємо значення коефіцієнта $a_3 = \dfrac{\Delta^3 y_0}{6h^3}$.

У загальному випадку вираз для a_k матиме вигляд $a_k = \dfrac{\Delta^k y_0}{k!h^k}$, $k = \overline{1,n}$. Підставивши ці значення у формулу (9), отримаємо

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (10)$$

На практиці зручніше користуватися дещо іншою формою запису цього многочлена. Зробимо заміну $\dfrac{x-x_0}{h}=t$, тобто $x=x_0+th$. Тоді $\dfrac{x-x_1}{h}=t-1$, $\dfrac{x-x_2}{h}=t-2$, $\dots$, $\dfrac{x-x_{n-1}}{h}=t-n+1$. Враховуючи останні співвідношення, перепишемо многочлен (10) таким чином

$$P_n(x)=y_0+t\Delta y_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0+\dots \\ +\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0\,. \qquad (11)$$

Останню рівність називають *першою інтерполяційною формулою Ньютона.* Цю формулу зручно використовувати для інтерполювання на початку відрізку інтерполяції. Скажімо, якщо необхідно знайти значення функції $f(x)$ при деякому x, то за початкове значення x_0 беруть найближче, причому менше, ніж x, значення аргументу. Кажуть, що першу інтерполяційну формулу Ньютона застосовують для *інтерполювання вперед.*

Друга інтерполяційна формула Ньютона. Коли значення аргументу знаходиться ближче до кінця таблиці скінченних різниць, застосовувати першу інтерполяційну формулу Ньютона недоцільно. У цьому випадку користуються *другою інтерполяційною формулою Ньютона*, загальний вигляд якої

$$P_n(x)=a_0+a_1(x-x_n)+\dots+a_n(x-x_n)\cdots(x-x_1)\,.$$

Виведення формул для визначення коефіцієнтів a_i, $i=\overline{1,n}$ проводиться за схемою, описаною в попередньому пункті. В результаті для довільного k, $k=\overline{1,n}$ матимемо $a_k=\dfrac{\Delta^k y_{n-k}}{k!h^k}$.

Підставимо вирази a_k $(k=\overline{1,n}\,)$ в многочлен $P_n(x)$ і отримаємо

$$P_n(x)=y_n+\frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x-x_n)+\frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x-x_n)(x-x_{n-1})+\dots \\ +\frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_n)(x-x_{n-1})\cdots(x-x_1)\,. \qquad (12)$$

В останньому многочлені зробимо заміну $\dfrac{x-x_n}{h}=t$, звідки отримуємо $x=x_n+th$. Тоді для довільного k, $k=\overline{1,n}$ матимемо $\dfrac{x-x_{n-k}}{h}=t+k$. Після підстановки цих виразів у формулу (12) одержимо многочлен

$$P_n(x) = y_n + t\Delta y_{n-1} + \frac{t(t+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \dots + \frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!}\Delta^n y_0 \,.$$

Останню рівність називають *другою інтерполяційною формулою Ньютона.* Цю формулу зручно використовувати для тих значень аргументу, що лежать в кінці відрізку інтерполяції. Кажуть, що другу інтерполяційну формулу Ньютона застосовують для *інтерполювання назад.*

Приклад. Для функції $f(x)$ складено таблицю скінченних різниць. Знайти значення $f(1{,}57)$.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
1,50	4,482	0,229	0,013	−0,001
1,55	4,711	0,242	0,012	0,001
1,60	4,953	0,254	0,013	0,001
1,65	5,207	0,267	0,014	
1,70	5,474	0,281		
1,75	5,755			

Обмежимося трьома скінченними різницями. Оскільки для заданої точки виконується нерівність $1{,}55 < 1{,}57 < 1{,}60$, то візьмемо $x_0 = 1{,}55$. Тоді

$$t = \frac{1{,}57 - 1{,}55}{0{,}05} = 0{,}4.$$

Підставимо число $t = 0{,}4$ і скінченні різниці до третього порядку у формулу (11).

$$y = 4{,}711 + 0{,}4 \cdot 0{,}242 + \frac{0{,}4(0{,}4-1)}{2!}0{,}012 + \frac{0{,}4(0{,}4-1)(0{,}4-2)}{3!}0{,}001 \approx 4{,}806$$

Бачимо, що останній доданок досить малий, тому можна було б обійтись двома скінченними різницями.

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Сформулюйте постановку задачі інтерполювання функції.
(2) Що таке параболічне інтерполювання ?
(3) Дайте означення інтерполяційного многочлена, інтерполяційної формули.
(4) Виведіть формулу інтерполяційного многочлена Лагранжа.

(5) Опишіть алгоритм інтерполювання функції за схемою Ейткіна.

(6) Складіть таблицю значень деякої функції $f(x)$ і побудуйте для неї перший та другий інтерполяційні многочлени Ньютона.

Тема 5. Чисельне інтегрування і чисельне диференціювання

Література : **[1]**, гл. II, §§15, 16, гл. III, §§1–3; **[2]**, гл. 5, §§5.1–5.8; **[3]**, розд. 5, §5.9, розд. 6, §§6.1, 6.3–6.6; **[4]**, гл. VI, §§18, 20; **[5]**, гл. 3, §§1–4; **[6]**, гл. VII, §§7.1, 7.6, 7.7; **[7]**, розд. VII, §§30–34 .

1. Постановка задачі. При розв'язуванні багатьох задач, які зустрічаються в геометрії, техніці, економіці тощо доводиться обчислювати визначені інтеграли типу

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

де $f(x)$ інтегрована на відрізку $[\,a,\,b\,]$ функція. З курсу вищої математики відомо, що для знаходження такого інтегралу можна скористатися формулою Ньютона-Лейбніца

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a),$$

де $F(x)$ – первісна функції $f(x)$, тобто $F'(x) = f(x)$.

Проте на практиці доволі часто зустрічаються випадки, коли первісну неможливо чи не вдається виразити через елементарні функції. Може статися, що аналітичний вираз первісної, якщо його вдалося знайти, має досить складний і незручний для обчислень вигляд. Крім того, підінтегральна функція може бути задана таблично чи графічно. У цих випадках для обчислення визначених інтегралів користуються чисельними методами. Формули, які використовують для наближеного обчислення інтегралів, називають *квадратурними формулами*. Ідея побудови таких формул полягає в тому, що підінтегральну функцію замінюють іншою, наприклад, інтерполяційним многочленом, а потім знаходять інтеграл від нової функції.

Практичне розв'язування задач часто потребує обчислення похідної функції. Коли аналітичний вираз функції чи знайденої похідної складний, або, коли функція задана таблично, тоді використовують чисельне диференціювання.

Для побудови формул чисельного диференціювання функцію $f(x)$ інтерполюють многочленом $P_n(x)$, відтак вважають, що похідні від функції наближено рівні відповідним похідним від многочлена, тобто $f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x)$ для всіх $k \in \mathbb{N}$.

2. Формули чисельного інтегрування. Розглянемо найпростіші квадратурні формули.

Метод прямокутників. З курсу вищої математики відомо, що за означенням визначений інтеграл є границею його інтегральних сум, тобто $\int\limits_a^b f(x)\,dx = \lim\limits_{n\to\infty} \sum\limits_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\Delta x_i$, де точки ξ_i вибирають довільно з проміжків розбиття, довжини яких позначаються числами Δx_i. На цій формулі грунтується виведення квадратурної формули методу прямокутників.

Розіб'ємо відрізок $[\,a,\,b\,]$ на n рівних частин. Тоді величина Δx_i рівна $\Delta x_i = \dfrac{b-a}{n} = h$, і справедлива така наближена рівність

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\Delta x_i = h\sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i).$$

Число h називається *кроком квадратурної формули.*

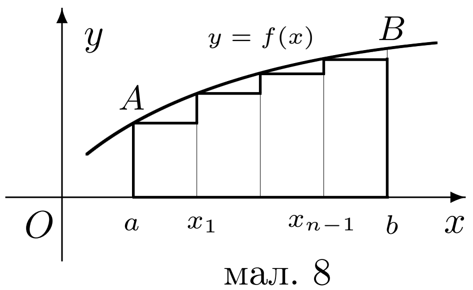
Якщо в останній формулі точки ξ_i сумістити з лівими кінцями відрізків розбиття, тобто $\xi_0 = x_0$, $\xi_1 = x_1, \ldots, \xi_{n-1} = x_{n-1}$, то отримаємо *формулу лівих прямокутників*

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) = h\sum_{i=0}^{n-1} y_i = h(y_0 + y_1 + \cdots + y_{n-1}). \qquad (1)$$

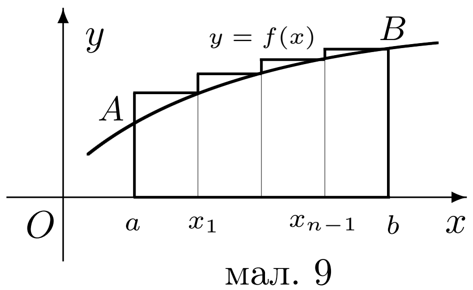
Якщо ж точки ξ_i сумістити з правими кінцями відрізків розбиття, тобто $\xi_0 = x_1$, $\xi_1 = x_2, \ldots, \xi_{n-1} = x_n$, то отримаємо *формулу правих прямокутників*

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1}) = h\sum_{i=0}^{n-1} y_{i+1} = h(y_1 + y_2 + \cdots + y_n). \qquad (2)$$

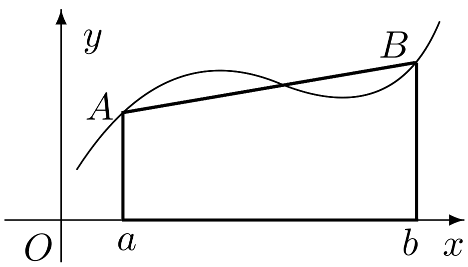
Геометричний зміст формули прямокутників полягає в тому, що криволінійна трапеція $aABb$ замінюється східчастою фігурою, складеною з прямокутників. На малюнку 8 зображено випадок лівих прямокутників, на малюнку 9 – випадок правих прямокутників.



мал. 8



мал. 9



мал. 10

Метод трапецій. Наближене значення інтеграла можна порахувати іншим способом. Для цього на відрізку $[\,a,\,b\,]$ дугу AB графіка підінтегральної функції $y = f(x)$ замінимо хордою. Відтак вважатимемо, що значення визначеного інтеграла наближено рівне площі утвореної трапеції $aABb$ (див. мал. 10)

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}\,.$$

Зрозуміло, що точність обчислень зросте, якщо $[\,a,\,b\,]$ поділити на кілька частин і застосувати останню формулу до кожного з новоутворених відрізків. На практиці відрізок інтегрування ділять на рівні частини, тоді довжина кожної з них дорівнює $\dfrac{b-a}{n}$, де n – кількість відрізків розбиття. У цьому випадку отримаємо формулу

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

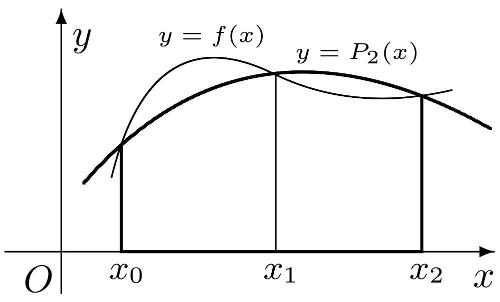
Оскільки величини $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$ під знаком суми зустрічаються двічі, то останнє співвідношення переписують наступним чином

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\left[\frac{y_0+y_n}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}y_i\right]$$

Цю рівність називають *формулою трапецій*. Іноді її записують так

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + \cdots + 2y_{n-1} + y_n), \text{ де } h = \frac{b-a}{n}.$$

Метод Сімпсона (метод парабол). Точність чисельного інтегрування помітно зростає, якщо підінтегральну функцію $y = f(x)$ на відрізку $[\,a,\, b\,]$ замінити квадратичною функцією (мал. 11), яка у вузлах x_0, x_1, x_2 співпадає з функцією $f(x)$. Підінтегральну функцію $f(x)$ замінимо інтерполяційним многочленом Ньютона другого степеня $f(x) \approx P_2(x) = y_0 + \dfrac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \dfrac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1)$. Тоді



мал. 11

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \int_{x_0}^{x_2} P_2(x)\,dx =$$

$$2hy_0 + \frac{\Delta y_0}{h} \cdot \frac{4h^2}{2} + \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2} \cdot \left(\frac{8h^3}{3} - h\frac{4h^2}{2} \right) =$$

$$2hy_0 + 2h\Delta y_0 + \frac{h}{3}\Delta^2 y_0 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2).$$

Для підвищення точності обчислень відрізок $[\,a,\, b\,]$ розбивають на n пар відрізків і замінюють підінтегральну функцію інтерполяційним многочленом Ньютона другого степеня на кожному проміжку довжиною $2h$. Тоді чисельне значення визначеного інтеграла на відрізку $[\,a,\, b\,]$ визначається із такої наближеної рівності

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left[(y_0 + y_{2n}) + 4(y_1 + \cdots + y_{2n-1}) + 2(y_2 + \cdots + y_{2n-2})\right],$$

де $h = \dfrac{b-a}{2n}$. Остання рівність називається *формулою Сімпсона.*

Приклад. Обчислити інтеграл $\displaystyle\int_1^2 \frac{dx}{x}$, використовуючи відомі квадратурні формули. Проміжок $[1,\, 2]$ розбити на 10 рівних частин.

Заповнимо таблицю значень підінтегральної функції $y = \dfrac{1}{x}$ в точках поділу

i	x_i	y_i	i	x_i	y_i	i	x_i	y_i	i	x_i	y_i
0	1	1,0000	3	1,3	0,7692	6	1,6	0,6250	9	1,9	0,5263
1	1,1	0,9091	4	1,4	0,7143	7	1,7	0,5882	10	2	0,5000
2	1,2	0,8333	5	1,5	0,6667	8	1,8	0,5556			

Порахуємо цей інтеграл за формулою Ньютона-Лейбніца

$$\int_1^2 \frac{dx}{x} = \ln 2 - \ln 1 = \ln 2 \approx 0{,}693147 \tag{3}$$

Обчислимо шуканий інтеграл за формулою лівих прямокутників

$$\int\limits_1^2 \frac{dx}{x} \approx \frac{2-1}{10}(y_0 + y_1 + \cdots + y_9) = 0{,}1 \cdot 7{,}1877 = 0{,}71877.$$

За формулою правих прямокутників отримуємо

$$\int\limits_1^2 \frac{dx}{x} \approx \frac{2-1}{10}(y_1 + y_2 + \cdots + y_{10}) = 0{,}1 \cdot 6{,}6877 = 0{,}66877.$$

Знайдемо цей же інтеграл за допомогою методу трапецій. Проміжок [1, 2] розіб'ємо на 10 рівних частин. Тоді отримаємо значення

$$\int\limits_1^2 \frac{dx}{x} \approx \frac{2-1}{10}\left(\frac{y_0 + y_{10}}{2} + y_1 + \cdots + y_9\right) = 0{,}1 \cdot 6{,}9377 = 0{,}69377.$$

Для того, щоб знайти шуканий інтеграл за формулою Сімпсона, поділимо відрізок [1, 2] на 5 пар рівних відрізків, тобто на 10 частин. Тоді

$$\int\limits_1^2 \frac{dx}{x} \approx \frac{2-1}{2 \cdot 5 \cdot 3}\left[y_0 + y_{10} + 4(y_1 + \cdots + y_9) + 2(y_2 + \cdots + y_8)\right] =$$

$$0{,}0333 \cdot 20{,}7944 \approx 0{,}6931456$$

Бачимо, що у кожному з випадків отримано різні результати, причому найточнішим виявився метод Сімпсона.

Взагалі про точність трьох розглянутих методів можна стверджувати, що похибка обчислень за формулами прямокутників обернено пропорційна числу n – кількості відрізків розбиття; за формулою трапецій – числу n^2; за формулою Сімпсона – числу n^4. Наприклад, при збільшені кількості відрізків розбиття вдвічі похибка обчислень за формулою прямокутників зменшується приблизно в 2 рази, за формулою трапецій – в 4 рази, за формулою Сімпсона – в 16 раз.

3. Формули чисельного диференціювання. Як було зазначено вище, для чисельного диференціювання функції треба спочатку її наблизити одним з інтерполяційних многочленів.

Чисельне диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа. Вважаємо, що на відрізку $[a, b]$ функція $f(x)$ задана таблицею значень у рівновіддалених вузлах інтерполювання, тобто маємо $x_{i+1} - x_i = h$, $i = \overline{1, n-1}$. У цьому випадку загальний вигляд інтерполяційного многочлена Лагранжа можна спростити. Введемо нову змінну t за формулою $t = \dfrac{x - x_0}{h}$. Тоді $x - x_i = x - x_0 - ih = h(t-i)$, $i = \overline{1, n}$ і $x_i - x_j = x_i - x_0 - jh = h(i-j)$, $i, j = \overline{1, n}$, $i \neq j$.

Після підстановки многочлен набере вигляду

$$L_n(x) = L_n(x_0 + th) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} y_i \qquad (4)$$

Остання рівність є інтерполяційною формулою Лагранжа для рівновіддалених вузлів.

Далі вважаємо, що $f'(x) \approx L_n'(x)$. Продиференціюємо рівність (4) по x, не забуваючи, що після заміни в многочлені Лагранжа x є функцією від t. Оскільки $x = x_0 + th$, то $\dfrac{dx}{dt} = h$. Тому після диференціювання (див., наприклад, [3]) отримаємо

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{d}{dt} \left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} \right] \cdot y_i \qquad (5)$$

Остання наближена рівність є формулою чисельного диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа у випадку рівновіддалених вузлів.

Розглянемо частковий випадок формули (5). Нехай функція задана трьома табличними значеннями ($n = 2$). Тоді

$$f'(x) \approx L_n'(x) = \frac{1}{h} \left[\frac{1}{2}(2t-3)y_0 - (2t-2)y_1 + \frac{1}{2}(2t-1)y_2 \right]. \qquad (6)$$

Зокрема, якщо похідні знаходимо у вузлах інтерполювання, то отримаємо наступні вирази:

$$f'(x_0) = y_0' \approx \frac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2)\,, \qquad f'(x_1) = y_1' \approx \frac{1}{2h}(-y_0 + y_2)\,,$$
$$f'(x_2) = y_2' \approx \frac{1}{2h}(y_0 - 4y_1 + 3y_2)\,. \tag{7}$$

Приклад. Знайти наближене значення похідної функції в точці $x = 4$. Функція задана таблично $x_0 = 2$, $y_0 = 4$, $x_1 = 3$, $y_1 = -2$, $x_2 = 4$, $y_2 = 6$.

В нашому випадку $h = 1$. Скористаємося формулою (6)

$$f'(x) \approx \frac{4}{2}(2t-3) + 2(2t-2) + \frac{6}{2}(2t-1) = 14t - 13.$$

Далі, $t = \dfrac{x - x_0}{h} = \dfrac{4-2}{1} = 2$, тому $f'(4) \approx 14 \cdot 2 - 13 = 15$.

Зауважимо, що для знаходження похідної можна було б скористатися третьою з формул (7), оскільки точка $x = 4$ – один з вузлів інтерполювання.

Чисельне диференціювання на основі інтерполяційних формул Ньютона. Запишемо для функції $f(x)$, що задана своїми значеннями в рівновіддалених вузлах, перший інтерполяційний многочлен Ньютона

$$f(x) \approx y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \dots + \frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0,$$

де $t = \dfrac{x - x_0}{h}$, $h = x_{i+1} - x_i$.

Перепишемо цей поліном, відкривши дужки в чисельнику кожного доданку

$$f(x) \approx y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{6}\Delta^3 y_0 +$$
$$\frac{t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t}{24}\Delta^4 y_0 + \dots$$

Зауважимо, що $\dfrac{df(x)}{dx} = \dfrac{df(x)}{dt} \cdot \dfrac{dt}{dx} = \dfrac{1}{h} \cdot \dfrac{df(x)}{dt}$. Продиференціюємо останню рівність по x двічі

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right)$$

і

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 + (t-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6t^2-18t+11}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right).$$

Аналогічно можна обчислити похідні вищих порядків.

Для того, щоб отримати значення похідних в точці, що лежить в кінці таблиці, треба скористатися другою інтерполяційною формулою Ньютона. Застосовуючи той же прийом, що і для випадку першої інтерполяційної формули, отримаємо

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_{n-1} + \frac{2t+1}{2}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{3t^2+6t+2}{6}\Delta^3 y_{n-3} + \frac{2t^3+9t^2+11t+3}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \ldots\right)$$

і

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_{n-2} + (t+1)\Delta^3 y_{n-3} + \frac{6t^2+18t+11}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \ldots\right).$$

Формули чисельного диференціювання значно спрощуються, якщо значення похідних обчислюється у вузлах інтерполювання. Наприклад, в точці $x = x_0$ (для неї $t = 0$) отримаємо

$$f'(x) = y_0' \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \ldots\right) \tag{8}$$

і

$$f''(x) = y_0'' \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 y_0 - \ldots\right). \tag{9}$$

Приклад. Нехай функція задана таблично. Потрібно знайти похідні $f'(0{,}01)$ і $f''(0{,}01)$.

Складемо таблицю скінчених різниць

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
0,01	1,519	4,512	2,854	-0,221
0,02	6,031	7,366	2,633	
0,03	13,397	9,999		
0,04	23,396			

У нашому випадку $h = 0{,}01$. Скориставшись формулами (8) і (9) отримаємо

$$f'(0{,}01) \approx \frac{1}{0{,}01}\left(4{,}512 - \frac{2{,}854}{2} - \frac{0{,}221}{3}\right) = 301{,}13334\,,$$

$$f''(0{,}01) \approx \frac{1}{(0{,}01)^2}\,(2{,}854 + 0{,}221) = 30750\,.$$

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Сформулюйте загальну постановку задачі чисельного інтегрування та чисельного диференціювання.

(2) Які ви знаєте квадратурні формули? Запишіть їх. Дайте геометричну ілюстрацію.

(3) Запишіть формули чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Лагранжа і Ньютона.

Тема 6. Чисельні методи розв'язування звичайних диференціальних рівнянь

Література : **[1]**, гл. VIII, §2; **[2]**, гл. 6, §§6.1–6.4; **[3]**, розд. 7, §§7.1–7.3; **[4]**, гл. IX, §§30, 31; **[5]**, гл. 9, §§1, 4; **[6]**, гл. IX, §§9.1, 9.2, 9.4–9.6; **[7]**, розд. VII, §§36, 37 .

1. Постановка задачі. Часто математичні моделі задач техніки і природознавства зводяться до певного диференціального рівняння, розв'язок якого повинен задовольняти деякі початкові умови.

Задача Коші для диференціального рівняння першого порядку формулюється так: знайти розв'язок рівняння (1) у вигляді функції $y = y(x)$, що задовольняє початкову умову (2)

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & (1) \\ y(x_0) = y_0. & (2) \end{cases}$$

Геометрично це означає, що треба знайти ту інтегральну криву $y = y(x)$ рівняння (1), яка проходить через задану точку (x_0, y_0).

Теорема 1 (Пікара). *Якщо функція $f(x, y)$ неперервна в замкнутому прямокутнику $\Delta = \{(x, y) : |x - x_0| \le a, |y - y_0| \le b\}$ і задовольняє в ньому умову Ліпшиця по змінній y, тобто існує таке число $M > 0$, яке не залежить від x і y, що*

$$|f(x_1, y_1) - f(x_2, y_2)| \le M|y_1 - y_2|$$

для будь-яких точок $(x_1, y_1) \in \Delta$ і $(x_2, y_2) \in \Delta$, то існує єдина диференційована функція, яка є розв'язком диференціального рівняння (1)*, що задовольняє початкову умову* (2)*.*

Всюди далі будемо вважати, що на проміжку, де шукається розв'язок, виконуються всі умови, що забезпечують існування та єдиність роз'язку задачі Коші.

На сьогоднішній день розроблено чимало методів знаходження розв'язків диференціальних рівнянь через елементарні функції. Проте більшість практичних задач вдається розв'язати тільки за допомогою наближених методів, які можна розбити на три групи:

- *аналітичні*, які дозволяють отримати наближений розв'язок у вигляді аналітичного виразу;
- *графічні*, які дають можливість наближено побудувати інтегральну криву;
- *чисельні*, в результаті застосування яких можна отримати наближений розв'язок у вигляді таблиці значень шуканої функції.

2. Метод Пікара (метод послідовних наближень). Цей метод є представником групи аналітичних методів. Він виник у зв'язку з доведенням теореми існування і єдиності розв'язку рівняння (1) і є одним із застосувань принципу стискуючих відображень.

Нехай потрібно знайти розв'язок задачі Коші (1)–(2). Проінтегруємо обидві частини рівності (1) від x_0 до x: $\int\limits_{x_0}^{x} y'\,dx = \int\limits_{x_0}^{x} f(x, y)\,dx$. Останню рівність можна записати

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x, y)\,dx. \qquad (3)$$

Таким чином, задача Коші (1)–(2) замінюється інтегральним рівнянням (3). Його розв'язок буде задовольняти диференціальне рівняння (1) і початкову умову (2). Замінюючи в правій частині останньої рівності функцію y значенням y_0, отримаємо перше наближення

$$y_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x, y_0)\, dx.$$

Інтеграл в правій частині останньої рівності містить тільки змінну x. Після знаходження цього інтеграла буде отримано аналітичний вираз наближення $y_1(x)$ як функції від змінної x. Замінимо тепер в правій частині рівняння (3) функцію y знайденим значенням y_1 і отримаємо друге наближення

$$y_2(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x, y_1)\, dx \qquad \text{і т.д.}$$

В загальному випадку ітераційна формула має вигляд

$$y_n(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x, y_{n-1})\, dx\,, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

Застосування останньої формули породжує послідовність функцій

$$y_1(x), y_2(x), \ldots, y_n(x), \ldots \tag{4}$$

Достатні умови збіжності цієї послідовності сформульовано в наступній теоремі.

Теорема 2. *Нехай в околі точки* (x_0, y_0) *функція* $f(x, y)$ *неперервна і має обмежену часткову похідну* $f'_y(x, y)$. *Тоді в деякому інтервалі, що містить точку* x_0, *послідовність* (4) *збігаєтьcя до розв'язку задачі Коші* (1)–(2).

3. Метод Ейлера. В основі цього чисельного методу лежить ідея графічної побудови розв'язку диференціального рівняння, однак цей метод дає одночасно і спосіб знаходження шуканої функції в чисельній (табличній) формі. Метод Ейлера застосовують в основному для проведення орієнтовних розрахунків. Але ідеї, закладені в його основу, є ключовими при розробці багатьох інших методів.

Нехай задачу Коші (1)–(2) треба розв'язати на проміжку $[\,a,\, b\,]$. Розіб'ємо відрізок $[\,a,\, b\,]$ на n рівних частин точками $x_i = x_0 + ih$, $i = \overline{1, n}$, де $h = \frac{b-a}{n}$ – крок інтегрування. Проінтегруємо рівняння (1) на відрізку $[x_0,\, x_1]$, маємо $\displaystyle\int_{x_0}^{x_1} f(x, y)\, dx = \int_{x_0}^{x_1} y'\, dx = y_1 - y_0$, звідки $y_1 = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(x,y)\,dx$. Останню рівність можна записати у вигляді $y_1 = y_0 + hy_0'$. Дійсно, якщо крок h вибрати достатньо малим, то можна вважати, що $f(x,y) \approx f(x_0,y_0)$, і тоді матимемо $\int_{x_0}^{x_1} f(x,y)\,dx \approx f(x_0,y_0)(x_1-x_0) = hy_0'$, де $y_0' = f(x_0,y_0)$.

Аналогічно, інтегруючи рівняння $y' = f(x,y)$ на відрізку $[x_1,\, x_2]$, отримаємо $y_2 = y_1 + hy_1'$, де $y_1' = f(x_1,y_1)$. І в загальному вигляді $y_{k+1} = y_k + hy_k'$, де $y_k' = f(x_k,y_k)$. Позначимо $y_{k+1} - y_k = \Delta y_k$, тоді

$$\Delta y_k = hy_k'\,, \qquad y_{k+1} = y_k + \Delta y_k\,.$$

Реалізація методу Ейлера зводиться до циклічного застосування останньої пари формул.

Геометричний зміст методу Ейлера полягає в тому, що на інтервалі $[x_k, x_{k+1}]$ інтегральна крива замінюється відрізком дотичної, що виходить з точки $M_k(x_k,y_k)$ з кутовим коефіцієнтом $f(x_k,y_k)$.

Наближенням інтегральної кривої є ламана Ейлера з вершинами в точках $M_0(x_0,y_0)$, $M_1(x_1,y_1)$, $\ldots$, $M_n(x_n,y_n)$. Перша ланка цієї ламаної дотикається до інтегральної кривої в точці $M_0(x_0,y_0)$.

Зазначимо, що точність методу досить мала і з переходом від точки до точки її похибка систематично зростає. Геометрично це означає, що ламана Ейлера віддаляється від істинної інтегральної кривої.

На практиці часто використовують *удосконалений метод Ейлера.* Суть його полягає в тому, що спочатку знаходять допоміжне значення $y_{k+\frac12}$ шуканої функції в проміжній точці $x_{k+\frac12} = x_k + \frac{h}{2}$ за формулою $y_{k+\frac12} = y_k + \frac{h}{2}y_k'$. Потім обчислюють значення $y'_{k+\frac12} = f(x_{k+\frac12}, y_{k+\frac12})$ і насамкінець отримують $y_{k+1} = y_k + hy'_{k+\frac12}$.

4. Метод Рунге-Кутта. З появою і розвитком ЕОМ у чисельному інтегруванні звичайних диференціальних рівнянь бурхливого розвитку набули методи типу Рунге-Кутта. В обчислювальній практиці їх широко застосовують завдяки тому, що вони:

- однокрокові, тобто для обчислення розв'язку задачі Коші в точці x_{k+1} треба знати її розв'язок лише в точці x_k;
- дають змогу здійснювати чисельне інтегрування зі змінним кроком;
- особливо зручні для програмування на ЕОМ, оскільки обчислення за ними мають циклічний характер.

Нехай, як і раніше, треба знайти розв'язок задачі Коші (1)–(2) на відрізку $[\,a,\ b\,]$. Розіб'ємо проміжок $[\,a,\ b\,]$ на n рівних частин точками $x_i = x_0 + ih$, $i = \overline{1, n}$, де $h = \frac{b-a}{n}$ – крок інтегрування. В методі Рунге-Кутта, так як і в методі Ейлера, послідовні значення шуканої функції y визначаються за формулою $y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$. Для визначення Δy_i розкладемо функцію $y(x)$ в ряд Тейлора і обмежимося членами ряду до h^4 включно. Тоді приріст функції запишемо

$$\Delta y = y(x+h) - y(x) = hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y'''(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x).$$

Похідні $y''(x)$, $y'''(x)$, $y^{(4)}(x)$ знайдемо послідовним диференціюванням рівняння $y'(x) = f(x, y)$. Можна показати, що з точністю до членів четвертого порядку значення Δy обчислюється за формулою

$$\Delta y = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

де коефіцієнти k_1, k_2, k_3, k_4 знаходять з формул

$$k_1 = hf(x, y), \qquad k_3 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2}),$$
$$k_2 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2}), \qquad k_4 = hf(x + h, y + k_3).$$

Таким чином, застосування методу Рунге-Кутта зводиться до послідовного обчислення чотирьох значень чисел

$$\begin{cases} k_1^{(i)} = & h \cdot f(x_i, y_i), \\ k_2^{(i)} = & h \cdot f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2}), \\ k_3^{(i)} = & h \cdot f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2^{(i)}}{2}), \\ k_4^{(i)} = & h \cdot f(x_i + h, y_i + k_3^{(i)}), \end{cases} \tag{5}$$

тоді на їх основі – приросту

$$\Delta y_i = \frac{1}{6}(k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}), \tag{6}$$

а відтак – наступного наближення $y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$.

Всі обчислення зручно виконувати за певною схемою і результати заносити в таблицю (див. табл. 6). На першому кроці ($i = 0$) в таблицю записують початкові умови x_0, y_0, а потім – результати обчислень за формулами (5) та (6). Відтак знаходять $\Delta y_0 = \dfrac{1}{6}S$, де S –

сума елементів останнього стовпчика. Потім знаходять наступне наближення за формулою $y_1 = y_0 + \Delta y_0$. Заповнення таблиці на кроці m здійснюється аналогічно в припущенні, що початковою точкою є (x_m, y_m). У таблиці 6 треба всюди у формулах прийняти $i = m$.

Таблиця 6

Крок	x	y	$y' = f(x,y)$	$k = h \cdot f(x,y)$	Δy
i	x_i	$y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1}$	$f(x_i, y_i)$	$k_1^{(i)}$	$k_1^{(i)}$
	$x_i + \frac{h}{2}$	$y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2}$	$f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2})$	$k_2^{(i)}$	$2k_2^{(i)}$
	$x_i + \frac{h}{2}$	$y_i + \frac{k_2^{(i)}}{2}$	$f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2^{(i)}}{2})$	$k_3^{(i)}$	$2k_3^{(i)}$
	$x_i + h$	$y_i + k_3^{(i)}$	$f(x_i + h, y_i + k_3^{(i)})$	$k_4^{(i)}$	$k_4^{(i)}$

Якщо ε – задана точність розв'язку, то кількість n точок поділу вибирають так, щоб крок $h = \dfrac{b-a}{n}$ задовольняв умову $h^4 < \varepsilon$.

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Як класифікуються наближені методи розв'язування задачі Коші для диференціального рівняння першого порядку ?

(2) Сформулюйте суть методу Пікара.

(3) Які достатні умови збіжності методу Пікара до розв'язку задачі Коші ?

(4) Сформулюйте суть методу Ейлера та геометричну інтерпретацію цього методу.

(5) Запишіть розрахункові формули для методу Рунге-Кутта. Які переваги цього методу перед іншими методами наближеного розв'язування задачі Коші ?

Тема 7. Методи обробки експериментальних даних

Література : **[2]**, гл. 7, §§7.1–7.3; **[3]**, розд. 8, §8.1; **[4]**, гл. X, §§32, 36; **[6]**, гл. VI, §§6.1–6.5.

1. Постановка задачі. У процесі дослідження різних процесів природознавства, економіки, техніки тощо доводиться на основі великої кількості дослідних даних виявляти суттєві фактори, які впливають на досліджуваний об'єкт, встановлювати форму зв'язку між величинами, що описують певний процес, а також уточнювати параметри отриманих рівнянь зв'язку.

При визначенні залежностей між величинами за дослідними даними складають таблицю, у відповідності до якої підбирають формулу, що приблизно виражає досліджувану залежність. Інакше кажучи, знаходять функцію з добре відомого класу, значення якої близькі до значень, що знайдені у досліді.

Нехай у результаті досліджень отримано значення $y_1, y_2, \ldots, y_n$ величини y, які відповідають значенням $x_1, x_2, \ldots, x_n$ величини x. Потрібно знайти аналітичний вигляд функціональної залежності $y = f(x)$, яка б пов'язувала змінні x і y та добре відображала результати дослідних даних. Сукупність точок $M_k(x_k, y_k)$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$, які називаться *дослідними точками*, дозволяє побудувати точковий графік. З першого погляду здається, що наступним кроком є побудова одного з інтерполяційних поліномів. Проте значення y_i знаходять експериментально, і тому ці величини вже є наближеними числами в силу неминучих похибок вимірювання. У цьому випадку задача інтерполювання табличної функції втрачає сенс, оскільки знаходити функцію, графік якої проходив би точно через точки M_k, немає потреби.

Натомість шукають таку функцію $f(x)$, значення якої при $x = x_k$ досить близькі до експериментальних значень y_k $(k = 0, 1, \ldots, n)$. Формулу $y = f(x)$ називають *емпіричною* або *рівнянням регресії* y на x. Емпіричні формули мають велике практичне значення, оскільки вдало підібране рівняння регресії дає змогу не тільки апроксимувати (наблизити) сукупність експериментальних даних, але й екстраполювати знайдену залежність на інші проміжки значень x.

Процес побудови емпіричних залежностей складається з двох етапів: вибір емпіричної формули і уточнення коефіцієнтів вибраного рівняння регресії.

Вдало вибрати емпіричну формулу не завжди просто. Універсального методу здійснення цього кроку не існує. Як правило, користуються графічним способом. Для цього на площині будують точковий графік з точок $M_k(x_k, y_k)$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$. Відтак проводять плавну криву якомога ближче до всіх даних точок, причому так, щоб дослідні дані розміщувалися з обох боків цієї кривої. Після цього візуально визначають, графік якої відомої функції найбільш подібний до побудованої кривої.

Встановивши вигляд емпіричної формули, треба знайти чи уточнити її коефіцієнти. Для цього існує ряд методів, наприклад, метод вибраних точок, метод середніх. Проте найточніші значення коефіцієнтів емпіричної формули можна знайти за методом найменших квадратів, який розглянемо детально.

2. Метод найменших квадратів. Цей метод запропонували та дослідили відомі математики Карл Фрідріх Гаус (1777 – 1855) та Андріен Марі Лежандр (1752 – 1833).

Загальна характеристика методу. Нехай емпірична формула має вигляд

$$y = f(x, a, b, c, \ldots)\,, \tag{1}$$

де a, b, c, $\ldots$ – невідомі параметри. Позначимо через $\bar{y}_k$ значення функції (1) в точках x_k, тобто $\bar{y}_k = f(x_k, a, b, c, \ldots)$ $(k = 0, 1, \ldots, n)$. Треба знайти такі значення параметрів, щоб відстань між точками $(y_1, y_2, \ldots, y_n)$ і $(\bar{y}_1, \bar{y}_2, \ldots, \bar{y}_n)$ була найменшою. Відстань в просторі $\mathbb{R}^n$ знаходять за формулою

$$S = \sqrt{(y_1 - \bar{y}_1)^2 + (y_2 - \bar{y}_2)^2 + \cdots + (y_n - \bar{y}_n)^2}\,.$$

Якщо при деяких параметрах величина S буде найменшою, то при цих же значеннях найменшого значення набуде і функція

$$F(a, b, c, \ldots) = \sum_{k=1}^{n} (y_k - \bar{y}_k)^2 = \sum_{k=1}^{n} \Big(y_k - f(x_k, a, b, c, \ldots) \Big)^2\,.$$

Інакше кажучи, треба розв'язати задачу на знаходження мінімуму функції $F(a, b, c, \ldots)$. Як відомо, необхідною умовою мінімуму функції багатьох змінних є рівність нулю всіх її часткових похідних.

Для визначеності розглянемо випадок трьох параметрів a, b, c. Тоді необхідна умова мінімуму функції $F(a,b,c)$ запишеться так:

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0\,, \qquad \frac{\partial F}{\partial b} = 0\,, \qquad \frac{\partial F}{\partial c} = 0\,.$$

Продиференціювавши функцію $F(a,b,c)$, отримаємо відносно параметрів a, b, c систему рівнянь

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{n} \left((y_k - f(x_k,a,b,c)) \cdot \dfrac{\partial f(x_k,a,b,c)}{\partial a} \right) = 0\,, \\ \sum\limits_{k=1}^{n} \left((y_k - f(x_k,a,b,c)) \cdot \dfrac{\partial f(x_k,a,b,c)}{\partial b} \right) = 0\,, \\ \sum\limits_{k=1}^{n} \left((y_k - f(x_k,a,b,c)) \cdot \dfrac{\partial f(x_k,a,b,c)}{\partial c} \right) = 0\,. \end{cases} \tag{2}$$

Система (2) називається *нормальною.* Якщо вона має єдиний розв'язок, то він і буде шуканим. Зауважимо, що коли емпірична функція $f(x,a,b,c)$ є лінійною відносно змінних a,b,c, то система (2) буде системою лінійних рівнянь відносно шуканих параметрів.

Розглянемо окремі види залежностей між експериментальними даними і опишемо процес побудови емпіричної формули у кожному з випадків.

Лінійна залежність. Нехай між дослідними даними (x_k, y_k), $k = 1,2,\ldots,n$, існує лінійна залежність. У цьому випадку загальна емпірична формула $y = ax + b$ містить два параметри a і b. Для того, щоб знайти коефіцієнти a і b, прирівняємо до нуля часткові похідні функції $F(a,b) = \sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)^2$. Отримаємо систему

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a} = -2\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)x_i = 0\,, \\ \dfrac{\partial F}{\partial b} = -2\sum\limits_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b) = 0\,. \end{cases}$$

Після нескладних перетворень маємо

$$\begin{cases} S_{xx}\cdot a + S_x \cdot b = S_{xy}\,, \\ S_x \cdot a + b = S_y\,, \end{cases}$$

де $S_x = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} x_i$, $S_y = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} y_i$, $S_{xx} = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2$, $S_{xy} = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i$. Розв'язавши останню систему відносно a і b, знайдемо

$$a = \frac{S_{xy} - S_x \cdot S_y}{S_{xx} - S_x^2}\,, \qquad b = \frac{S_y \cdot S_{xx} - S_x \cdot S_{xy}}{S_{xx} - S_x^2}\,. \tag{3}$$

Зазначимо, що у випадку лінійної залежності, крім графічного є ще й аналітичний критерій виявлення лінійної залежності між значеннями x і y. Покладемо $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$, $k_i = \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}$, $i = \overline{1, n-1}$. Якщо $k_i = \text{const}$, то залежність між x і y лінійна. Якщо $k_1 \approx k_2 \approx \cdots \approx k_{n-1}$, то залежність між експериментальними даними близька до лінійної і в цьому випадку є зміст шукати емпіричну функцію теж у вигляді $y = ax + b$.

Приклад. Нехай вивчається залежність розчинності R азотнонатрієвої солі від температури t. Побудувати лінійну емпіричну функцію $R = at + b$. Результати вимірювань занесено в таблицю.

t	0	4	10	15	21
R	67,5	71,0	76,3	80,6	85,7

Перевіримо, чи залежність лінійна. Обчислимо коефіцієнти $k_1 = 0{,}875$, $k_2 = 0{,}883$, $k_3 = 0{,}860$, $k_4 = 0{,}850$. Оскільки $k_1 \approx k_2 \approx k_3 \approx k_4$, то для даної залежності можна побудувати лінійну емпіричну формулу. Для обчислення коефіцієнтів складемо таблицю.

i	t_i	R_i	$t_i \cdot R_i$	t_i^2
1	0	67,5	0	0
2	4	71,0	284	16
3	10	76,3	763	100
4	15	80,6	1209	225
5	21	85,7	1799,7	441
$\sum$	$\sum = 50$	$\sum = 381{,}1$	$\sum = 4055{,}7$	$\sum = 782$
S	$S_t = 10{,}0$	$S_R = 76{,}22$	$S_{tR} = 811{,}14$	$S_{tt} = 156{,}4$

Тепер з формул (3) отримаємо значення $a \approx 0{,}9$, $b \approx 67{,}5$. Отже, шуканою емпіричною формулою є $R = 0{,}9t + 67{,}5$.

Квадратична залежність. На практиці нелінійний зв'язок двох змінних часто апроксимують функцією виду

$$y = ax^2 + bx + c\,. \tag{4}$$

У цьому випадку, враховуючи умови (2), система для визначення коефіцієнтів a, b і c набере вигляду

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 = 0\,, \\ \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i = 0\,, \\ \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i^2 - bx_i - c) = 0\,. \end{cases}$$

Після рівносильних перетворень отримаємо систему

$$\begin{cases} S_{x^4} \cdot a + S_{x^3} \cdot b + S_{x^2} \cdot c = S_{x^2 y}\,, \\ S_{x^3} \cdot a + S_{x^2} \cdot b + S_{x} \cdot c = S_{xy}\,, \\ S_{x^2} \cdot a + S_{x} \cdot b + c = S_{y}\,, \end{cases}$$

де $S_{x^k} = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^k$, $k = 1, 2, 3, 4$, $S_{x^k y} = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^k y_i$, $k = 0, 1, 2$. Розв'язком цієї системи є шукані коефіцієнти a, b, c для емпіричної функції (4).

Показникова та степенева залежності. Серед нелінійних залежностей між двома змінними розглянемо ще показникову та степеневу.

Нехай степенева залежність задана рівністю $y = ax^b$, де $x > 0$, $a > 0$, $b > 0$. Логарифмуючи її, знаходимо $\ln y = b \cdot \ln x + \ln a$. Далі, поклавши $X = \ln x$, $Y = \ln y$, $B = \ln a$, $A = b$, отримаємо $Y = AX + B$.

Логарифмуючи рівняння $y = a \cdot b^x$, яким задають показникову залежність, отримуємо $\ln y = \ln a + x \cdot \ln b$. Після заміни $Y = \ln y$, $X = x$, $A = \ln b$, $B = \ln a$ дістанемо рівняння $Y = AX + B$.

Отже, у розглядуваних випадках для побудови емпіричної формули потрібно:

- за вихідною таблицею даних (x_i, y_i) побудувати нову таблицю (X_i, Y_i), використовуючи відповідну заміну;
- методом найменших квадратів знайти коефіцієнти A і B лінійної функції $Y = AX + B$;
- за відповідними формулами повернутися до початкових змінних.

Зазначимо, що встановити загальний вигляд емпіричної формули для загального нелінійного випадку доволі складно. Графічний спосіб у цьому разі не завжди придатний. Тоді вдаються до аналітичної перевірки. Зокрема, нелінійну залежність зводять до лінійної, а останню перевіряють описаним вище аналітичним методом.

Реалізацію цього алгоритму детальніше розглянемо на прикладі.

Приклад. Знайти емпіричну формулу степеневої залежності, заданої таблицею

V	2	4	8	16	25	32	50	64
I	2,45	3,70	5,70	8,55	11,25	12,95	17,15	20,00

Загальний вигляд емпіричної формули матиме вигляд $V = aI^b$.

Перейдемо до лінійної залежності $Y = AX + B$, де $Y = \lg V$, $X = \lg I$, $B = \lg a$, $A = b$. Визначимо параметри A і B методом найменших квадратів.

i	$X_i = \lg I_i$	$Y_i = \lg V_i$	$X_i \cdot Y_i$	X_i^2
1	0,3892	0,3010	0,1171	0,1515
2	0,5682	0,6021	0,3421	0,3229
3	0,7559	0,9031	0,6827	0,5714
4	0,9320	1,2041	1,1222	0,8686
5	1,0512	1,3979	1,4695	1,1050
6	1,1123	1,5051	1,6741	1,2372
7	1,2343	1,6990	2,0971	1,5235
8	1,3010	1,8062	2,3499	1,6926
$\sum$	7,3441	9,4185	9,8547	7,4727
S	0,918	1,177	1,232	0,934

За формулами (3) знаходимо, що $A = 1{,}6599$, $B = -0{,}409$. Повертаючись до початкових змінних, отримуємо $a = 0{,}457$, $b = 1{,}66$.

Отже, формула

$$V = 0{,}457 \cdot I^{1{,}66}$$

є шуканим рівнянням регресії.

Контрольні запитання та завдання для самоперевірки

(1) Чому інтерполювання функції не можна вважати методом обробки експериментальних даних?

(2) Дайте означення рівняння регресії y на x.

(3) Опишіть загальну характеристику методу найменших квадратів.

(4) Опишіть процес побудови емпіричної формули у випадку а) лінійної залежності; б) показникової та степеневої залежностей.

Рекомендована література

Основна

1. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. -М.:Наука, 1987. -598 с.
2. *Заварыкин В.М., Житомирский В.Г., Лапчик М.П.* Численные методы. -М.:Просвещение, 1991. -175 с.
3. *Лященко М.Я., Головань М.С.* Чисельні методи. -К.:Либідь, 1996. -287 с.
4. *Пулькин С.П., Никольская Л.Н., Дьячков А.С.* Вычислительная математика. -М.:Просвещение, 1980. -176 с.

Додаткова

5. *Берёзин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. -М.:Физматгиз, 1962. -т.I, 464 с. -т.II, 639 с.
6. *Данилина Н.И., Дубровская Н.С. и др.* Численные методы. -М.:Высшая школа, 1976. -368 с.
7. *Жалдак М.І., Рамський Ю.С.* Чисельні методи математики. -К.:Радянська школа, 1984. -206 с.

Зміст

Вступ ... 3

Тема 1. Основи теорії похибок ... 4

Тема 2. Чисельні методи розв'язування рівнянь з однією змінною ... 15

Тема 3. Методи розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь ... 26

Тема 4. Інтерполювання функцій ... 34

Тема 5. Чисельне інтегрування і чисельне диференціювання ... 44

Тема 6. Чисельні методи розв'язування звичайних диференціальних рівнянь ... 52

Тема 7. Методи обробки експериментальних даних ... 58

Рекомендована література ... 64

Навчальне видання

Возняк Любов Софронівна
Шарин Сергій Володимирович

Чисельні методи

Методичний посібник
для студентів природничих спеціальностей

Літературний редактор Н.Я.Шарин
Комп'ютерний макет С.В.Шарин

Підп. до друку 23.02.2001 Формат 604x084/4160
Папір офсетн. Гарн. Computer Modern
Умовн. друк. арк. 4   Вид. друк. арк. 4,8
Замовлення № 384

Видавництво "Плай"
Прикарпатського університету ім. В.Стефаника
76000 Івано-Франківськ
вул. Шевченка, 57, тел. 59-60-27