

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

Методи обробки даних в інформатиці

Чисельні методи

Навчальний посібник

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра
за освітньою програмою «Інформаційно-обчислювальні засоби радіоелектронних систем»
спеціальності 172 «Електронні комунікації та радіотехніка»

Укладачі: Н.О. Бондаренко, В.М. Бондаренко, В.П. Корнєв

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2023

Рецензент	<i>Цибульський Л.Ю.</i> , канд. техн. наук, доцент кафедри електронних пристроїв та систем КПІ ім. Ігоря Сікорського
Відповідальний редактор	<i>Редько І.В.</i> , доктор фізико-математичних наук, професор кафедри конструювання електронно-обчислювальної апаратури факультету електроніки КПІ ім. Ігоря Сікорського

*Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 8 від 02.06.2023 р.)
за поданням Вченої ради факультету електроніки
(протокол № 05/2023 від 22.05.2023 р.)*

Для студентів технічних спеціальностей важливо розуміння основних ідей чисельних методів та їх особливостей, галузей їх застосування, щоб використовувати чисельні методи як готовий інструмент в своїй практичній роботі.

Навчальний посібник має сприяти опануванню студентами змісту базових і сучасних чисельних методів, їх переваг та недоліків, а також способів математичного опису, при розв'язанні реальних погано обумовлених і жорстких інженерних задач, а також задач, що мають велику розмірність. Для кращого засвоєння студентами матеріалу, посібник містить приклади виконання, контрольні питання і завдання.

Навчальний посібник призначений для здобувачів ступеня бакалавра спеціальності 172 «Електронні комунікації та радіотехніка», також буде корисним для студентів інших технічних спеціальностей.

Реєстр. № **НП XX/XX-XXX**. Обсяг 3,1 авт. арк.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Перемоги, 37, м. Київ, 03056

<https://kpi.ua>

Свідцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

©КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023

ЗМІСТ

Вступ	4
1. ТЕОРІЯ ТА ПРАВИЛА НАБЛИЖЕНИХ ОБЧИСЛЕНЬ	6
1.1. Джерела похибок та наближені числа	6
1.2. Задачі теорії похибок	9
Контрольні питання і завдання	10
2. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЇ	11
2.1. Ряди	11
2.2. Точкова апроксимація	17
2.3. Інтерполяція	18
2.4. Лінійна інтерполяція	20
Контрольні питання і завдання	28
3. ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ	30
3.1. Метод диференціювання з використанням інтерполяційних формул	30
3.2. Метод диференціювання з використанням формул кінцевих різниць	34
3.3. Метод невизначених коефіцієнтів	36
Контрольні питання і завдання	41
4. ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ	41
4.1. Методи інтегрування на основі локальної інтерполяції	43
4.2. Квадратурні формули інтегрування	45
4.3. Метод Монте-Карло	52
Контрольні питання і завдання	55
5. МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ	57
5.1. Ітераційні методи	58
5.2. Прямі методи	63
5.3. Порівняння прямих та ітераційних методів	64
Контрольні питання і завдання	67
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	68

Вступ

У сучасних наукових дослідженнях можна виділити три напрями: експериментальний, теоретичний та обчислювальний.

Експериментальне напрям характеризується тим, що з дослідження об'єктів і явищ матеріального світу ставиться спеціальний науковий досвід – натурний експеримент, під час проведення якого забезпечується можливість стежити за фізичним об'єктом, що вивчається, впливати на нього іншими об'єктами, змінювати умови протікання досліджуваного процесу.

Теоретичний напрямок базується на побудові та аналітичному дослідженні математичних моделей, що відображають у математичній формі найважливіші властивості досліджуваних об'єктів.

В основі обчислювального напрямку наукового дослідження лежить обчислювальний експеримент. Проведення обчислювального експерименту передбачає певний план дій, які умовно можна розбити на три етапи:

- на першому етапі вибирається математична модель об'єкта, яка потім досліджується теоретичними методами. У ході теоретичного дослідження моделі знаходять граничні, асимптотичні рішення, що дозволяють отримати важливі попередні знання про об'єкт;

- другий етап присвячується розробці алгоритму реалізації моделі на комп'ютері. Модель представляється у формі, яка зручна для застосування чисельних методів, визначається послідовність обчислювальних та логічних операцій, які потрібно зробити, щоб знайти рішення із заданою точністю;

- на третьому етапі створюються комп'ютерні програми, які «перекладають» модель і алгоритм на доступну комп'ютеру мову. Їх можна назвати «електронною» моделлю об'єкта, що вивчається. Така програмна модель є придатною для безпосереднього випробування на комп'ютері.

Таким чином, за допомогою математичного моделювання розв'язання наукової задачі зводиться до розв'язання математичної задачі, що є її моделлю.

Для вирішення математичних завдань використовуються дві основні групи методів: аналітичні та чисельні.

Аналітичні методи дозволяють одержати розв'язання задачі у вигляді формул. Зокрема, якщо математичне завдання полягає у вирішенні найпростіших рівнянь алгебри або диференціальних тощо, то використання відомих з курсу математичного аналізу прийомів відразу призводить до мети. На жаль,

практично це буває досить рідко. Зокрема, переважна частина нелінійних диференціальних рівнянь не вирішуються аналітичними методами; при обчисленні визначених інтегралів також часто не вдається виразити первісну через елементарні функції; знаходження рішень систем лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності прямими методами може призводити до нереальних витрат часу, навіть при використанні обчислювальної техніки.

Для вирішення таких завдань розробляються та застосовуються методи наближених обчислень чи чисельні методи, що дозволяють звести розв'язання математичної задачі до виконання кінцевої кількості арифметичних дій над числами.

Розробка чисельних методів і алгоритмів наближеного вирішення типових математичних завдань з використанням обчислювальної техніки складає предмет обчислювальної математики - одного з сучасних розділів математики, що розвиваються. Успіхи у вирішенні таких важливих для суспільства завдань, як управління космічними польотами, використання атомної енергії, управління великими підприємствами тощо. були б неможливі без застосування електронних обчислювальних машин та чисельних методів.

Освітній компонент «[Методи обробки даних в інформатиці: Частина 2](#)» забезпечує базові знання чисельних методів, способів їх математичного опису, аналізу альтернатив для ґрунтовного підбору необхідного комплексу чисельних методів для вирішення реальних інженерних задач, виконання розрахунків на комп'ютері з використанням спеціалізованих пакетів BORLAND C або Matlab, обробки, інтерпретації, аналізу та корекції отриманого результату у відповідності до вимог технічного завдання.

Дисципліна викладається студентам на другому курсі у весняному семестрі на кафедрі конструювання електронно-обчислювальної апаратури факультету електроніки. Надбанні знання студенти використовують у самостійній роботі, а також при виконанні лабораторних робіт в дистанційному режимі.

1. ТЕОРІЯ ТА ПРАВИЛА НАБЛИЖЕНИХ ОБЧИСЛЕНЬ

Питання для розгляду:

- джерела похибок;
- похибки: вихідної інформації, методу(апроксимації), похибка результату;
- правила наближених обчислень, обчислювальна похибка;
- наближені числа, абсолютна та відносна похибки;
- значущі й вірні цифри числа;
- пряма й обернена задачі теорії похибок.

1.1. Джерела похибок та наближені числа

Вирішення більшості практичних задач можна подати у вигляді двох послідовних етапів, з певним ступенем умовності [1, 2]:

- 1) математичний опис розглянутої проблеми;
- 2) вирішення сформульованої математичної задачі.

На першому етапі ми зустрічаємося із двома характерними джерелами помилки:

- реальні процеси не завжди можна точно описати математично;
- неточність завдання вихідних параметрів, які одержуються, як правило, з експерименту, дає лише наближене початкове знання.

Відповідно до цього сумарна похибка математичної моделі та початкових даних поєднується в *похибку вихідної інформації*.

Неточність початкових даних часто називають *непереборною похибкою*. Отримання точного розв'язання математичного завдання (другий етап) незалежно від того, будується воно аналітично або на ЕОМ, як правило, не здійснено. Тому в практичних розрахунках використовуються методи отримання наближених рішень і, насамперед – чисельні.

Така вимушена заміна точного рішення наближеним і породжує *похибку методу*, або, як її часто називають, *похибку апроксимації*.

Також, у процесі розв'язання задачі ми робимо округлення вихідних даних, проміжних та остаточних результатів. Ці похибки, а також похибки, які виникають при виконанні арифметичних операцій над наближеними числами,

тією чи іншою мірою переносяться на результат обчислень і утворюють так звану *обчислювальну похибку* або *похибку округлень*.

У зв'язку з цим, під час постановки завдання, або вказується необхідна точність остаточного результату, тобто задається похибка, максимально допустима в процесі вирішення математичного завдання, або обмежуються вимогою підрахунку сумарної *похибки результату*.

У практиці обчислень часто виникає необхідність округлення числа, тобто в заміні його іншим числом з меншою кількістю цифр, причому зберігається одна або кілька цифр, рахуючи зліва направо.

Сформулюємо правила округлення, якими будемо користуватися надалі:

- Якщо цифри, що відкидаються, є більші за половину одиниці останнього розряду, що залишається, то остання цифра, що залишається, посилюється (збільшується на одиницю). В інакшому випадку, цифри, що залишаються, не зазнають змін.

- Якщо ж цифри, що відкидаються, становлять число, що дорівнює половині одиниці останнього розряду, що залишається, то остання цифра, що залишається, посилюється, якщо вона непарна, і не зазнає змін, якщо вона парна.

Приклад.

Числа $A_1 = 248,25001$; $A_2 = 2,91325$; $A_3 = 228,13$; $A_4 = 243,15$ округлити до десятих часток.

Рішення.

Дотримуючись правила округлення, маємо:

$$a_1 = 248,3; a_2 = 2,9; a_3 = 228,1; a_4 = 243,2.$$

У повсякденній практичній діяльності, а також при вирішенні тієї чи іншої математичної задачі використовуються числа двох типів: точні та наближені.

Наближеним числом a (для точного числа A) називається число, яке трохи відрізняється від точного і замінює його у обчисленнях.

Визначення 1.

Абсолютною похибкою Δa наближеного числа a називається величина, не менша за абсолютне значення різниці між точним числом A та його наближеним значенням a :

$$\Delta a \geq |a - A| \quad (1.1)$$

Таким чином, точне число A заключено в межах :

$$a - \Delta a \leq A \leq a + \Delta a.$$

Визначення 2.

Відносною похибкою δa наближеного числа a називається величина, що визначається нерівністю :

$$\delta a \geq \frac{|A-a|}{|a|}, (a \neq 0) \quad (1.2)$$

Таким чином, за відносну похибку числа a можна прийняти:

$$\delta a = \frac{\Delta a}{|a|} \quad (1.3)$$

Будь-яке позитивне число a можна представити у такому вигляді:

$$a = \alpha_1 \times 10^m + \alpha_2 \times 10^{m-1} + \dots + \alpha_n \times 10^{m-n+1} + \dots, \quad (1.4)$$

де α_i - десяткові цифри числа a ($\alpha_i = 0,1,\dots,9$), причому $\alpha_1 \neq 0$, а m - ціле число, зване старшим десятковим розрядом числа a .

Визначення 3.

Значущими цифрами числа називаються всі цифри, крім нулів, що стоять ліворуч від першої відмінної від нуля цифри.

Нулі, записані в кінці числа, завжди значущі (інакше їх не пишуть).

Наприклад, числа 0,001406 та 5,0300 мають відповідно 4 та 5 значущих цифр.

Якщо ж хочемо показати, що у числі 400000 лише два значущих нуля, то це число слід записати у вигляді добутку двох співмножників: $400 \cdot 10^3$, або $0,400 \cdot 10^6$. Остання форма запису називається *нормалізованою*.

Визначення 4.

Цифри $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ наближеного числа a називаються *вірними* в сенсі ω , якщо абсолютна похибка числа a не перевищує ω одиниць розряду останньої правильної цифри:

$$\Delta a \leq \omega \cdot 10^{m-n+1} \quad (1.5)$$

При $\omega = 1$ ($\omega = 0,5$) цифри $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ називаються вірними у широкому (вузькому) сенсі.

Аналогічного роду залежність можна встановити між кількістю вірних значущих цифр та відносною похибкою:

$$\delta a = \frac{\omega}{\alpha 1} 10^{1-n}, n > 1 \quad (1.6)$$

1.2. Задачі теорії похибок

Обчислюється значення функції n змінних $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в деякій точці $A(A_1, A_2, \dots, A_n)$, координати якої відомі лише приблизно.

Потрібно визначити похибку, яка з'являється при цьому обчисленні.

Наведемо одне з можливих рішень, сформульованого завдання.

Нехай a_i і Δa_i ($i = 1, 2, \dots, n$) є наближені значення та їх похибки для координат точки A , а $u = f(a_1, a_2, \dots, a_n)$ - наближене значення шуканої величини $U = f(A_1, A_2, \dots, A_n)$. Застосовуючи теорему Лагранжа про приріст функції, для абсолютної величини різниці точного та наближеного значень, можна отримати наступну оцінку:

$$|U - u| = |f(A_1, A_2, \dots, A_n) - f(a_1, a_2, \dots, a_n)| \leq \sum_{i=1}^n (B_i \Delta a_i) \quad (1.7)$$

де $B_i = \max_P \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|$, а область P є областю можливих значень координат:

$$A_i : P = \{A_i : a_i - \Delta a_i \leq A \leq a_i + \Delta a_i; i = 1, 2, \dots, n\}$$

Типові задачі

Пряма задача

Дано наближене число $a = 88,325$ і відомо, що воно має три вірних значущих цифри в широкому (вузькому) сенсі. Треба оцінити абсолютну і відносну похибки в обох випадках.

Рішення.

Оскільки у числа a три вірні цифри в широкому (вузькому) сенсі, то абсолютна похибка даного числа не перевищує одиниці (половини одиниці) останнього вірного розряду:

$$\Delta a \leq \omega \cdot 10^{m-n+1} = 0,1 \cdot \omega = \begin{cases} 0,1 & \omega = 1 \\ 0,05 & \omega = 0,5 \end{cases}$$

$$\delta a = \frac{\omega}{\alpha 1} 10^{1-n} = 0,0013 \cdot \omega = \begin{cases} 0,002 & \omega = 1 \\ 0,00065 & \omega = 0,5 \end{cases}$$

Обернена задача

Дано наближене число $a = 2,7182$ та його абсолютна похибка $\Delta a = 0,007$. Визначити, які значущі цифри наближеного числа є вірними в широкому (вузькому) сенсі.

Рішення.

В силу формули (1.5) маємо:

$$0,007 \leq \omega \cdot 10^{0-n+1}.$$

Рішенням цієї нерівності є:

$$n \leq 3, \text{ при } \omega = 1;$$

$$n \leq 2, \text{ при } \omega = 0,5.$$

Таким чином, у наближеного числа $a = 2,7182$, по крайній мірі, є три вірних знаки в широкому сенсі та два вірних знаки у вузькому сенсі. Про інші цифри нічого не можна сказати, вірні вони чи ні. Їх називають *сумнівними*.

Контрольні питання і завдання

1. Назвіть основні джерела похибок?
2. Які цифри числа називають значущими?
3. Як по запису наближеного числа оцінити його абсолютну і відносну похибки?
4. Як вірно записувати результат наближених обчислень чи вимірювань?
5. В чому сенс прямої та оберненої задач теорії похибок?
6. Наведіть формули для визначення похибок арифметичних операцій?
7. Що таке нормалізована форма запису числа? Наведіть приклади.
8. Які особливості обчислення сум наближених чисел з використанням комп'ютера?
9. Сформулюйте правила округлення наближених чисел.
10. Сформулюйте визначення вірної цифри числа. Наведіть приклади.
11. В чому різниця між визначенням вірної цифри числа в широкому і вузькому сенсі. Які цифри числа називають сумнівними?

2. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЇ

Питання на розгляд:

- степеневі та функціональні ряди;
- збіжність, теореми та ознаки збіжності ряду;
- радіус і інтервал збіжності ряду;
- розклад функції в ряд Тейлора (Маклорена);
- поняття частинної суми ряду;
- приклади знаходження наближеного значення функції за допомогою розкладу її в степеневий ряд.

Зазвичай, рішення задачі потребує обчислення значень певних не елементарних функцій, таких як тригонометричні, логарифмічні, показові і т. п.

Якщо застосовується ручне обчислення значення елементарних функцій – використовують таблиці.

При комп'ютерному обчисленні, внесення таблиці до комп'ютера потребує багато пам'яті, а пошук потрібного значення функції в пам'яті комп'ютера не така проста справа.

Тому для обчислення значення функцій у заданій точці на комп'ютері використовують розклад цих функцій в *степеневі ряди*.

2.1. Ряди

Числовим рядом називаємо нескінченну суму числової послідовності:

$$\sum_{n=1}^{\infty} u_n(x) = u_1(x) + u_2(x) + \dots + u_n(x) + \dots$$

де u_n – загальний член ряду.

Ряд вважається заданим, якщо відомо закон утворення членів ряду, тобто коли кожен член ряду u_n залежить від n (номер ітерації).

Наприклад: якщо $u_n = \frac{1}{n}$, маємо ряд $1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} + \dots$

Суму перших n членів ряду називають n -ю частинною сумою ряду.

Тому, $S_1 = u_1, S_2 = u_1 + u_2, \dots$

Функціональний ряд – ряд, елементами якого є функції, і позначається:

$$\sum_{n=1}^{\infty} u_n(x) = u_1(x) + u_2(x) + \dots + u_n(x) + \dots,$$

$u_n(x) = f(n, x)$ визначені і неперервні в одному і тому ж інтервалі.

Множина значень x , для яких функціональний ряд збігається, називається *областю збіжності* цього ряду:

$$S_n(x) = u_1(x) + u_2(x) + u_3(x) + \dots + u_n(x)$$

$$S(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n(x) \text{ — сума ряду,}$$

$$R_n(x) = S(x) - S_n(x) \text{ — залишок ряду.}$$

Функціональний ряд вигляду:

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n, \quad (2.1)$$

називають **степеневим рядом** відносно змінної x , де $c_i = \text{Const}$, для всіх i .

Ряд вигляду:

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n (x - x_0)^n,$$

також є **степеневим**, але дає розклад по степеням $(x - x_0)$.

Якщо отриманий числовий **ряд збігається**, то точка x_0 — є *точкою збіжності ряду*, інакше — *точкою розбіжності ряду*.

Областю збіжності ряду називають сукупність числових значень аргументу x , при яких ряд сходиться.

Дослідження на збіжність степеневого ряду.

Теорема Абеля: Члени ряду (2.1) менші за відповідні члени ряду:

$$M + M * \left| \frac{x}{x_1} \right| + M * \left| \frac{x}{x_1} \right|^2 + \dots + M * \left| \frac{x}{x_1} \right|^n + \quad (2.2)$$

Ряд (2.2) — геометрична прогресія, яка збігається при $q = \left| \frac{x}{x_1} \right| < 1$.

Тобто за ознакою порівняння ряд є збіжний.

Маємо:

$$\begin{array}{lll} \nearrow & |x| < R & \text{ряд збігається} \\ \rightarrow & |x| > R & \text{ряд розбігається} \\ \searrow & x = R \\ & x = -R & \text{Потрібні додаткові дослідження} \end{array} \quad \exists R \geq 0:$$



R – радіус збіжності, $(-R; R)$ – інтервали збіжності

Інтервал збіжності степеневого ряду

Якщо $R = +\infty$, то інтервал збіжності вся числова вісь. Якщо $R = 0$, то степеневий ряд збігається лише в одній точці $x = 0$.

Для ряду $a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + \dots + a_n(x - x_0)^n + \dots$ центр інтервалу збіжності в точці $x = x_0$ (а не $x = 0$) та інтервал збіжності:

$$(x_0 - R, x_0 + R).$$

Радіус збіжності степеневого ряду

Радіус збіжності можна визначити за ознакою Даламбера (2.3), та ознакою Коші (2.4).

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{c_{n+1}}{c_n} \right|, \quad (2.3)$$

$$R = \frac{1}{\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|c_n|}}. \quad (2.4)$$

Розклад функції в степеневі ряди

Розклад функції в нескінченну суму степеневих функцій є **ряд Тейлора**, який використовують для апроксимації функції.

Визначення:

Якщо функція $f(x)$ нескінченно диференційована в околі точки x_0 та залишковий член $R_n(x)$ прямує до нуля при $n \rightarrow \infty$ ($\lim_{n \rightarrow \infty} R_n(x) = 0$), з формули Тейлора можна отримати розкладання функції $f(x)$ по степеням $(x - x_0)$, яке називають рядом Тейлора:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0)^1 + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n.$$

Умови збіжності ряду Тейлора

Теорема 1. Для того, щоб ряд Тейлора збігався на інтервалі $(-R, R)$ до функції $f(x)$, необхідно і достатньо, щоб залишковий член формули Тейлора прямував до нуля, при всіх $x \in (-R, R)$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R_n(x) = 0, \forall x \in (-R; R).$$

Теорема 2. Якщо функція $f(x)$ на інтервалі $(-R, R)$ нескінченно диференційована і її похідні рівномірно обмежені в сукупності, тобто існує така стала M , що для всіх $x \in (-R, R)$ виконується нерівність $|f^{(n)}(x)| \leq M$ при $n = 0, 1, 2, \dots$, то функцію можна розкласти в ряд Тейлора на цьому інтервалі.

Якщо в ряді Тейлора покласти $x_0 = 0$, то отримаємо розклад функції по степенях x в так званий **ряд Маклорена**:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x^1 - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x^2 - x_0) \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n. \quad (**)$$

Розкладання деяких елементарних функцій в ряд Тейлора (Маклорена)

Для розкладання функції $f(x)$ в ряд Маклорена (**) потрібно:

- Знайти похідні $f'(x), f''(x), \dots, f^{(n)}(x), \dots$;
- Обчислити значення похідних в точці $x_0 = 0$;
- написати ряд (**) для заданої функції та знайти його інтервал збіжності;
- знайти інтервал $(-R; R)$, в якому залишковий член ряду Маклорена $R_n(x) \rightarrow 0$ и $n \rightarrow \infty$;

Якщо такий інтервал існує, то значення функції $f(x)$ та сума ряду Маклорена в ньому співпадають.

Важливо: в інтервалі збіжності степеневого ряду залишковий член прямує до нуля, якщо $n \rightarrow \infty$.

Наведемо таблицю, що вміщує розклад в ряд Маклорена деяких елементарних функцій, які часто зустрічаються в інженерних розрахунках:

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots, \quad x \in (-\infty; \infty)$$

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots, \quad x \in (-\infty; \infty)$$

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots, \quad x \in (-\infty; \infty)$$

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots + x^n + \dots, \quad x \in (-1; 1)$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots + (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} + \dots, \quad x \in (-1; 1]$$

$$\arctg(x) = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \dots, \quad x \in [-1; 1]$$

$$\operatorname{sh}(x) = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots, \quad x \in (-\infty; \infty)$$

Підсумуємо:

Степеневі ряди можуть бути використані для обчислення наближених значень функції, якщо функцію $f(x)$ в інтервалі $(-R; R)$ можна розкласти в степеневий ряд [3]:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n + \dots,$$

то наближене значення дорівнюватиме частинній сумі $S_n(x)$.

Точність результату розрахунку збільшується зі збільшенням кількості доданих членів ряду n .

Абсолютна похибка дорівнює модулю залишку ряду:

$$|f(x) - S_n(x)| = |r_n(x)|,$$

де $r_n(x) = a_{n+1}x^{n+1} + a_{n+2}x^{n+2} + \dots$ – залишок ряду.

Такий підхід до розрахунку приблизного значення функції є можливим, якщо *ряд збігається*.

Приклади:

1) Знайдемо наближене значення функції $\sin(x)$ в заданій точці x із заданою точністю $\varepsilon = 10^{-2}$ шляхом її розкладу в ряд Маклорена.

Розкладемо функцію $\sin(x)$ в ряд Маклорена:

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots$$

Перевіримо умови збіжності цього ряду:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \approx 0$$

Послідовність збігається до нуля, отже ряд є збіжним.

Нехай є значення функції, яке треба розрахувати за допомогою отриманого ряду при $x=1.5$ та з точністю $\varepsilon=10^{-2}$.

Розраховуємо:

$$y = \sin(1.5) \approx 1.5 - \frac{1.5^3}{3!} + \frac{1.5^5}{5!} \approx 1.00078$$

1) Перевіримо задану точність, істинне значення $\sin(1.5) = 0.997495$.

$$|0.997495 - 1.00078| = 0.003285 < 0.01$$

Похибка в межах допустимого.

2) Знайдемо наближене значення функції Тейлора.

Розкладемо функцію $\text{sh}(x)$ в ряд Тейлора в околі $x_0=1$.

$$\text{sh}(x) = \text{sh}(1) + \frac{\text{sh}'(1)}{1!}(x-1)^1 + \frac{\text{sh}''(1)}{2!}(x-1)^2 + \dots + \frac{\text{sh}^{(n)}(1)}{n!}(x-1)^n$$

Перевіримо умови збіжності:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\text{sh}^{(n)}(1)}{n!}(x-1)^n \approx 0$$

Послідовність збігається до нуля, оскільки факторіал зростає швидше ніж $\text{sh}(x)$ тому границя послідовності прямує до нуля, отже ряд є збіжним.

Нехай є значення функції, яке треба розрахувати за допомогою отриманого ряду при $x=1.5$ та з точністю $\varepsilon=10^{-2}$. Отже розраховуємо:

$$y = \text{sh}(1.5) = \text{sh}(1) + \frac{\text{sh}'(1)}{1!}(1.5-1)^1 + \frac{\text{sh}''(1)}{2!}(1.5-1)^2 + \dots + \frac{\text{sh}'''(1)}{3!}(1.5-1)^3 + \frac{\text{sh}^{(4)}(1)}{4!}(1.5-1)^4 + \dots + \frac{\text{sh}^{(n)}(1)}{n!}(x-1)^n \approx 2.12929$$

Перевіримо задану точність, істинне значення $\text{sh}(1.5) = 2.12928$.

$$|2.12928 - 2.12929| = 0.00001 < 0.01$$

Похибка в межах допустимого.

2.2. Точкова апроксимація

Питання на розгляд:

- неперервна апроксимація;

- точкова апроксимація;
- інтерполювання;
- канонічний поліном;
- локальна інтерполяція;
- глобальна інтерполяція.

Функції, що використовуються в математичних моделях, можуть бути задані як аналітичним способом (у вигляді формули), так і таблицею, при якій функція відома тільки при певних дискретних значеннях аргументу. Зокрема, якщо функціональна залежність отримана в результаті розрахунків, проведених на комп'ютері, або в процесі вимірювань, здійснених в рамках будь-якого експерименту, вона виявляється заданою саме табличним способом.

На практиці нам можуть знадобитися значення функції в інших точках, відмінних від тих, що задані в таблиці. Однак отримати ці значення можна тільки шляхом складних розрахунків або проведенням дорогих експериментів.

Це завдання вирішується шляхом наближеної заміни функції $f(x)$ більш простішою функцією $\varphi(x)$. Введену функцію $\varphi(x)$ можна використовувати не тільки для наближених обчислень значень $f(x)$, але також для проведення аналітичних розрахунків в теоретичному дослідженні моделі.

Наближення функції $f(x)$ найпростішою функцією $\varphi(x)$ називається апроксимацією (від латинського *approximo* – наближаюся).

Апроксимуючу функцію $\varphi(x)$ будують таким чином, щоб відхилення (у певному сенсі) $\varphi(x)$ від $f(x)$, в заданій області, було найменшим. Поняття "малого відхилення" залежить від того, яким способом оцінюється близькість двох функцій, тому будемо уточнювати його в подальшому, при розгляді конкретних методів апроксимації.

Неперервна апроксимація

Якщо вихідну функцію $f(x)$ задано аналітично, то при побудові апроксимуючої функції $\varphi(x)$ можливо вимагати мінімального відхилення однієї функції від іншої на деякій неперервній множині точок, наприклад, на відрізку $[a,b]$.

Такий вид апроксимації називається *неперервним* або *інтегральним*. Теоретично для найкращого наближення доцільно вимагати, щоб в усіх точках відрізка $[a,b]$ відхилення апроксимуючої функції $\varphi(x)$ від функції $f(x)$ було за абсолютною величиною менше заданої величини $\varepsilon \geq 0$:

$$|f(x) - \varphi(x)| < \varepsilon, a \leq x \leq b.$$

В цьому випадку кажуть, що функція $\varphi(x)$ *рівномірно наближає функцію $f(x)$* з точністю ε на інтервалі $[a, b]$. Але практично отримати рівномірне наближення дуже трудомістка робота, тому цей спосіб апроксимації головним чином використовується в теоретичних дослідженнях.

Найбільш використовуваним є *середньоквадратичне наближення*, для якого найменше значення має величина [1]:

$$M = \int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2 dx$$

Будемо вимагати звернення до нуля частинних похідних від M по параметрам, які визначають функцію $\varphi(x)$, отримаємо рівняння, яке дозволить знайти найкращі значення цих параметрів.

Точкова апроксимація

Апроксимацію, при якій наближення будується на заданій дискретній множині точок $\{x_i\}$ називають *точковою*. В даному випадку, умова мінімуму величини S , для *середньоквадратичного наближення*:

$$S = \sum_{i=0}^n [y_i - \varphi(x_i)]^2$$

де y_i – значення функції $f(x)$ у точках x_i .

2.3. Інтерполяція

Іншим видом точкової апроксимації є *інтерполювання*, при якому апроксимуюча функція $\varphi(x)$ приймає в заданих точках x_i , ті самі значення y_i , що і функція $f(x)$, тоді $\varphi(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$. В цьому випадку, близькість інтерполяційної функції до заданої функції полягає в тому, що їх значення співпадають на заданій системі точок.

Інтерполяція – спосіб знаходження проміжних значень величини за наявним дискретним набором відомих значень. Нехай у ході експерименту отримано таблицю залежності значення функції $y=f(x)$, $(y_0, y_1, y_2, \dots, y_n)$, від вхідної величини x $(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$ (табл. 2.1).

Таблиця 2.1

Вид таблиці експериментальних даних

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_{n-1}	x_n
-------	-------	-------	---------	-----------	-------

y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_{n-1}	y_n
-------	-------	-------	---------	-----------	-------

Інтерполяцію функцій застосовують у разі коли потрібно знайти значення функції $y(x)$ при значенні аргументу x_i , що належить інтервалу $[x_0, \dots, x_n]$, але не збігається за значенням з жодним значенням, наведеним у табл. 2.1.

Саме інтерполяція функцій, часто зустрічається при обмеженості можливостей під час проведення експерименту. Зокрема, через дорожнечу та трудомісткість проведення експерименту, чи через наявність ризику для життя (умови радіації, умови хімічної небезпеки...) розмір вибірки $(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$ може бути досить малий.

При цьому, в багатьох випадках, аналітичний вираз функції $y(x)$ не відомий та отримати його за таблицею наявних значень (табл. 2.1) у більшості випадків неможливо. Тому замість неї будують іншу функцію $P(x)$, яка легко обчислюється і має ту ж таблицю значень (збігається з нею в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$), як і $f(x)$, тобто:

$$P_n(x_i) = f(x_i) = y_i; \quad (2.5)$$

Знаходження такої наближеної функції називається інтерполяцією, а точки $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ вузлами інтерполяції.

Інтерполяційну функцію зручно шукати у вигляді полінома n степені тому, що поліном просто обчислюється, диференціюється, інтегрується.

Зазначимо, що для кожного набору точок є лише один інтерполяційний поліном, степені не більше n , де n – це кількість точок в таблиці. Певний поліном можна однозначно представити у різних формах [1,2].

Графічно, завдання інтерполяції полягає в тому, щоб побудувати таку інтерполяційну функцію, яка проходитиме через усі вузли інтерполяції (рис.2.1)

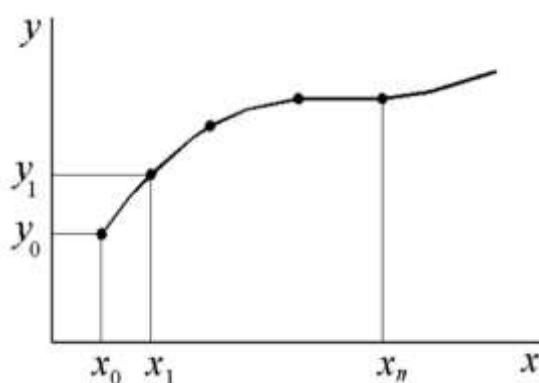


Рис.2.1. Вид інтерполяційної функції

Канонічний поліном

Вид канонічного полінома степені n :

$$P_n(x) = a_0 + a_1x^1 + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n. \quad (2.6)$$

Вибір полінома степені n заснований на тому факті, що через $n+1$ точку проходить єдина крива степені n . Підставивши вираз (2.6) у формулу (2.5), отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (2.7):

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_{n-1}x_0^{n-1} + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_{n-1}x_1^{n-1} + a_nx_1^n = y_1 \\ a_0 + a_1x_2 + a_2x_2^2 + \dots + a_{n-1}x_2^{n-1} + a_nx_2^n = y_2 \\ \dots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_{n-1}x_n^{n-1} + a_nx_n^n = y_n \end{cases} \quad (2.7)$$

Розв'яжемо цю систему лінійних алгебраїчних рівнянь та знайдемо коефіцієнти інтерполяційного полінома $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$. Бачимо, чим більше точок в таблиці, тим більший порядок системи, складніше розв'язати таку систему і визначити коефіцієнти a_i . Тому іноді, коли можна трошки поступитись точністю заради швидкості обчислення, використовують *локальну інтерполяцію*.

До локальної інтерполяції відносять інтерполяцію не високих порядків: лінійну, квадратичну, третього порядку.

2.4. Лінійна інтерполяція

Лінійна інтерполяція – найпростіший вид локальної інтерполяції, яка часто використовується. Її сенс у тому, що задані точки з координатами (x_i, y_i) , при $i = 0, 1, 2, \dots, n$ з'єднуються прямолінійними відрізками, а функцію $y(x)$ можна приблизно уявити у вигляді ламаної.

Рівняння кожного відрізка ламаної різні. Оскільки є n інтервалів (x_{i-1}, x_i) , то для кожного з них, як рівняння інтерполяційного поліному, використовується рівняння прямої, що проходить через дві сусідні точки x з таблиці: для i -го інтервалу можна написати рівняння прямої, що проходить через точки (x_{i-1}, y_{i-1}) та (x_i, y_i) :

$$\frac{y - y_{i-1}}{y_i - y_{i-1}} = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}.$$

Звідси:

$$y = a_i x + b_i, x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad (2.8)$$

$$a_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, b_i = y_{i-1} - a_i x_{i-1}. \quad (2.9)$$

Отже, при використанні лінійної інтерполяції, спочатку потрібно визначити інтервал, в який потрапляє значення аргументу (*локалізувати значення аргументу, в якому будемо визначати значення функції*), а потім підставити його у формулу (2.8) та знайти наближене значення функції у цій точці.

Приклад лінійної інтерполяції для експериментальних даних згідно табл. 2.2. наведено на рис. 2.2.

Таблиця 2.2.

Таблиця експериментальних даних

Індекс	0	1	2	3	4
x	1	2	3	4	5
y	2,5	4	3,5	5	6

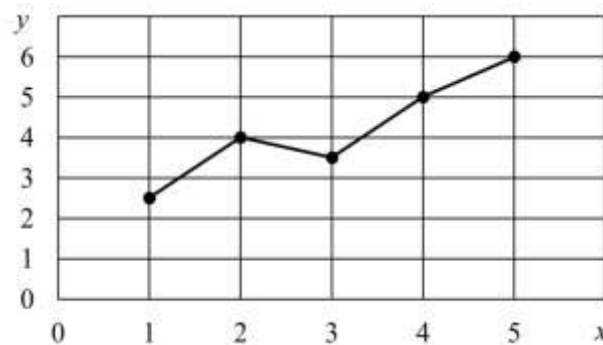


Рис. 2.2. Графічне розв'язання лінійної інтерполяції

Приклад

Маємо експериментальні дані (табл.2.3).

Таблиця 2.3

x	0	2	3	3,5
y	-1	0,2	0,5	0,8

Завдання:

1. Знайти значення функції за $x=1$ і $x=3,2$.
2. Розв'язати завдання графічно.

Розв'язання:

1. Точка $x=1$ належить першому локальному відрізку $[0;2]$, тобто. $i=1$ і, отже, за наведеними вище формулами (2.8) та (2.9):

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{0,2 - (-1)}{2 - 0} = 0,6$$

$$b_1 = y_0 - a_1 x_0 = -1 - 0,6 \cdot 0 = -1$$

$$y = a_1 x + b_1 = 0,6 \cdot 1 - 1 = -0,4.$$

Точка $x=3,2$ належить третьому інтервалу $[3;3,5]$, тобто. $i=3$ і, отже, за формулами (2.8) та (2.9):

$$a_3 = \frac{y_3 - y_2}{x_3 - x_2} = \frac{0,8 - 0,5}{3,5 - 3} = 0,6$$

$$b_3 = y_2 - a_3 x_2 = 0,5 - 0,6 \cdot 3 = -1,3$$

$$y = a_3 x + b_3 = 0,6 \cdot 3,2 - 1,3 = 0,62$$

2. За даними таблиці 2.3 будуємо графік (рис. 2.3.)

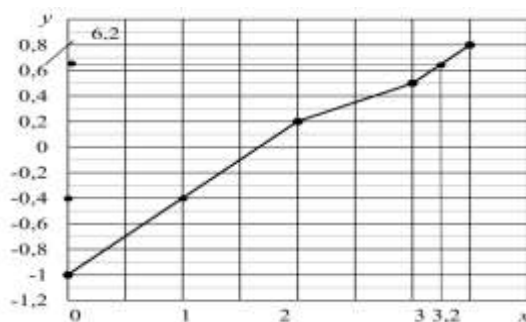


Рис. 2.3. Графічне розв'язання задачі

Такий підхід використовується і для квадратичної інтерполяції.

Методи глобальної інтерполяції

Сама назва говорить про те, що будується єдиний поліном, який проходить через усі точки таблиці.

Інтерполяційний поліном Лагранжа

Інтерполяційний поліном Лагранжа має вигляд:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \cdot L_n(x) \quad (2.10)$$

де $L_n(x)$ – множник Лагранжа.

$$L_n(x) = \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{(x-x_k)}{(x_i-x_k)}$$

Отже:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \left(\prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{x-x_k}{x_i-x_k} \right)$$

Чисельник і знаменник не повинні включати значення $x = x_i$, так як значення знаменника не може дорівнювати нулю.

У розгорнутому вигляді формулу Лагранжа можна записати наступним чином:

$$P_n(x) = y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} + \dots + y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)\dots(x_n-x_{n-1})}. \quad (2.11)$$

Інтерполяційний поліном Лагранжа зазвичай застосовується в теоретичних дослідженнях (при доказі теорем, аналітичному вирішенні завдань тощо).

Інтерполяційний поліном Ньютона

В подальшому розглядаємо варіанти, коли вузли інтерполяції рівно віддалені за величиною, тобто $x_i - x_{i-1} = h = \text{Const}$, де h – крок інтерполяції, тобто $x_i = x_0 + nh$. Інтерполяційні поліноми Ньютона зручно використовувати, якщо точка в якій шукаємо значення інтерполяційного поліному знаходиться на початку таблиці – перша інтерполяційна формула, або в кінці таблиці – друга формула Ньютона.

Перша інтерполяційна формула Ньютона

Інтерполяційний поліном будується у вигляді:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_n(x-x_0)\dots(x-x_{n-1}). \quad (2.12)$$

Побудова поліному зводиться до визначення коефіцієнтів a_i . При записі коефіцієнтів користуються кінцевими різницями.

Кінцеві різниці першого порядку записуються:

$$\begin{aligned}\Delta y_0 &= y_1 - y_0; \\ \Delta y_1 &= y_2 - y_1; \\ &\dots \\ \Delta y_{n-1} &= y_n - y_{n-1},\end{aligned}$$

де y_i - значення функції при відповідних значеннях x_i .

Кінцеві різниці другого порядку:

$$\begin{aligned}\Delta^2 y_0 &= \Delta y_1 - \Delta y_0; \\ \Delta^2 y_1 &= \Delta y_2 - \Delta y_1; \\ &\dots \\ \Delta^2 y_{n-2} &= \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2}.\end{aligned}$$

Кінцеві різниці вищих порядків знаходяться аналогічно:

$$\begin{aligned}\Delta^k y_0 &= \Delta^{k-1} y_1 - \Delta^{k-1} y_0; \\ \Delta^k y_1 &= \Delta^{k-1} y_2 - \Delta^{k-1} y_1; \\ &\dots \\ \Delta^k y_{n-2} &= \Delta^{k-1} y_{n-1} - \Delta^{k-1} y_{n-2}.\end{aligned}$$

Коефіцієнти $a_0, a_1, \dots, a_n$ знаходяться з умови $P_n(x_i) = y_i$.

Знаходимо a_0 . Припустимо, що $x=x_0$ тоді, підставляючи це значення в формулу (2.12), отримаємо:

$$a_0 = P(x_0) = y_0.$$

Далі, підставляючи значення $x=x_1$ в формулу (2.12), отримаємо вираз для a_1 :

$$P_n(x_1) = y_1 = y_0 + a_1(x_1 - x_0),$$

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y_0}{h}.$$

Для визначення a_2 , вважаючи $x=x_2$, аналогічно отримаємо:

$$P_n(x_2) = y_2 = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_0 + 2\Delta y_0 + a_2 2h^2;$$

$$a_2 = \frac{y_2 - y_0 - 2\Delta y_0}{2h^2} = \frac{y_2 - y_0 - 2y_1 + 2y_0}{2h^2} = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2h^2} = \frac{(y_2 - y_1) - (y_1 - y_0)}{2h^2} = \frac{\Delta y_1 - \Delta y_0}{2h^2} = \frac{\Delta y_0}{2!h^2}.$$

Загальна формула для знаходження всіх коефіцієнтів має вигляд:

$$a_i = \frac{\Delta^i y_0}{i! h^i},$$

де $i=0, \dots, n$.

В результаті (2.12) набуде вигляду [3]:

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)\dots(x-x_{n-1}). \quad (2.13)$$

Цей многочлен називають першим інтерполяційним поліномом Ньютона.

Приклад

Дана таблиця значень (табл. 2.4) залежності в'язкості води ρ від температури $\rho = f(T)$.

Таблиця 2.4

Залежність в'язкості води від температури

$T, ^\circ\text{C}$	0	25	50	75	100
$\rho, \text{кг/м}^3$	1000	997	988	975	960

Завдання:

1. Побудувати перший інтерполяційний поліном Ньютона.
2. Визначте значення полінома для температури $T=12^\circ\text{C}$.

Розв'язання:

Складемо таблицю кінцевих різниць функції (табл. 2.5):

Таблиця 2.5

Таблиця кінцевих результатів

Індекс	T	ρ	$\Delta\rho$	$\Delta^2\rho$	$\Delta^3\rho$	$\Delta^4\rho$
0	0	1000	-3	-6	2	0
1	25	997	-9	-4	2	
2	50	988	-13	-2		
3	75	975	-15			
4	100	960				

Для побудови полінома скористаємося формулою (2.13):

$$\begin{aligned} P_4(T) &= \rho_0 + \frac{\Delta\rho_0}{h}(T-T_0) + \frac{\Delta^2\rho_0}{2!h^2}(T-T_0)(T-T_1) + \\ &+ \frac{\Delta^3\rho_0}{3!h^3}(T-T_0)(T-T_1)(T-T_2) + \frac{\Delta^4\rho_0}{4!h^4}(T-T_0)(T-T_1)(T-T_2)(T-T_3) = \\ &= 1000 - \frac{3}{25}(T-0) - \frac{6}{25^2 \cdot 2}(T-0)(T-25) + \frac{2}{25^3 \cdot 6}(T-0)(T-25)(T-50) = \\ &= 0,0000213 T^3 - 0,0064 T^2 + 0,0267 T + 1000 \end{aligned}$$

Підставивши в формулу, отриманого полінома, значення $T=12^\circ\text{C}$, знайдемо значення щільності $\rho=999,35 \text{ кг/м}^3$.

Друга інтерполяційна формула Ньютона

Для знаходження значень функції в кінці інтервалу інтерполювання інтерполяційний поліном записують у вигляді:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= a_0 + a_1(x-x_n) + a_2(x-x_n)(x-x_{n-1}) + \dots \\ &\dots + a_n(x-x_n)(x-x_{n-1})\dots(x-x_1). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Коефіцієнти $a_0, a_1, \dots, a_n$ знаходять з умови $P_n(x_i) = y_i$.

Далі діємо як в попередньому випадку. Підставляючи в формулу (2.14) значення $x = x_n$, отримаємо вираз для коефіцієнту a_0 :

$$P_n(x_n) = y_n = a_0.$$

Для $x=x_{n-1}$:

$$P_n(x_{n-1}) = y_{n-1} = y_n + a_1(x_{n-1} - x_n),$$

отримаємо:

$$a_1 = \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h}.$$

Для $x=x_{n-2}$:

$$\begin{aligned} P_n(x_{n-2}) &= y_{n-2} = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x_{n-2} - x_n) + a_2(x_{n-2} - x_n)(x_{n-2} - x_{n-1}) = \\ &= y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(-2h) + a_2 \cdot 2h^2 = y_n - 2\Delta y_{n-1} + a_2 2h^2; \end{aligned}$$

отримаємо:

$$a_2 = \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}.$$

Формула для знаходження всіх коефіцієнтів в загальному вигляді:

$$a_i = \frac{\Delta^i y_{n-1}}{i! h^i}.$$

Підставивши вирази для визначення коефіцієнтів a_i , в формулу (2.14), отримаємо другу інтерполяційну формулу Ньютона [2,3]:

$$P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h} (x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2! h^2} (x - x_n)(x - x_{n-1}) + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3! h^3} (x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n} (x - x_n)(x - x_{n-1}) \dots (x - x_1) \quad (2.15)$$

Приклад

Дано таблицю значень $\rho=f(T)$, (табл. 2.5).

Таблиця 2.5

Таблиця кінцевих результатів

Індекс	T	ρ	$\Delta\rho$	$\Delta^2\rho$	$\Delta^3\rho$	$\Delta^4\rho$
0	0	1000	-3	-6	2	0
1	25	997	-9	-4	2	
2	50	988	-13	-2		
3	75	975	-15			
4	100	960				

1. Побудувати другий інтерполяційний поліном Ньютона.
2. Визначити значення полінома для температури $T=90^\circ\text{C}$.

Розв'язання:

Для побудови полінома скористаємося формулою (2.15) та табл. 2.5:

$$\begin{aligned} P_4(x) &= \rho_4 + \frac{\Delta\rho_3}{h} (T - T_4) + \frac{\Delta^2\rho_2}{2! h^2} (T - T_4)(T - T_3) + \\ &+ \frac{\Delta^3\rho_1}{3! h^3} (T - T_4)(T - T_3)(T - T_2) + \frac{\Delta^4\rho_0}{4! h^4} (T - T_4)(T - T_3)(T - T_2)(T - T_1) = \\ &= 960 - \frac{15(T-100)}{25} - \frac{2(T-100)(T-75)}{2! 25^2} + \frac{2(T-100)(T-75)(T-50)}{3! 25^3} = \\ &= 0,0000213 \cdot T^3 - 0,0064 \cdot T^2 - 0,2933 \cdot T + 1028. \end{aligned}$$

Підставивши в формулу (2.15), отриманого полінома, значення $T=90^\circ\text{C}$, знайдемо відповідне значення щільності $\rho=965,29 \text{ кг/м}^3$.

При побудові інтерполяційних формул Ньютона використовуються лише значення функції, які лежать по одну сторону від обраного початкового значення, тому ці формули носять односторонній характер.

В багатьох випадках виявляються корисними інтерполяційні формули, які містять як попередні, так і наступні значення функції по відношенню до її початкового значення. Відповідні інтерполяційні формули носять назву *інтерполяційні формули з центральними різницями*. До них відносяться формули Гауса, Стірлінга, Бесселя, *Їх ви візьмете на самотійне вивчення*.

Контрольні питання і завдання

1. Надайте визначення степеневому та функціонального рядів.
2. Які ознаки збіжності ряду ви знаєте? Як їх застосувати на практиці?
3. Покажіть як можна розкласти вашу улюблену функцію в ряд Тейлора/Маклорена.
4. Розрахуйте для свого ряду радіус та інтервал збіжності.
5. Дайте визначення частинної суми ряду.
6. В чому сенс ознаки Д'аламбера? Надайте формулу.
7. Надайте визначення знакозмінного ряду.
8. Для яких рядів застосовується, для визначення збіжності, ознака Лейбниця?
9. За якою ознакою можна визначити радіус збіжності? Наведіть приклад.
10. В якому випадку можливо використати розклад функції в ряд для її апроксимації?
11. У чому полягає завдання апроксимації функцій?
12. У чому полягає особливість апроксимації заданої таблицею функції методом інтерполювання?
13. Як пов'язаний порядок інтерполяційного полінома з кількістю вузлів при глобальній інтерполяції?
14. У чому полягає ідея локальної інтерполяції?

15. У чому відмінність інтерполяції кубічними сплайнами від локальної кубічної інтерполяції?
16. Як здійснюється підбір емпіричної формули для встановленої з досвіду залежності?
17. У чому полягає ідея методу найменших квадратів та яка основна сфера його застосування? Чим відрізняється цей метод від методу інтерполяції?
18. Що таке середньоквадратичне відхилення.
19. Як визначити степінь наближення багаточлена.
20. Сформулюйте постановку завдання наближення функції методом інтерполяції.
21. Запишіть інтерполяційний багаточлен Ньютона та інтерполяційний багаточлен Лагранжа першого ступеня.
22. Які переваги має запис інтерполяційного багаточлена за формулою Ньютона перед формулою Лагранжа.

3. ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ

Питання на розгляд:

- методи диференціювання з використанням інтерполяційних формул Ньютона;
- метод диференціювання з використанням інтерполяційної формули Стірлінга;
- метод диференціювання з використанням інтерполяційної формули Лагранжа;
- метод диференціювання з використанням формул кінцевих різниць;
- метод Рунге (апроксимації похідної);

- метод невизначених коефіцієнтів.

При чисельному рішенні багатьох практичних задач доволі часто виникає необхідність отримати значення похідних різних порядків функції $y=f(x)$, яка задана таблицею або у вигляді складного аналітичного виразу безпосереднє диференціювання якого складна справа. В таких випадках використовуються наближені методи диференціювання.

Розглянемо наступну задачу:

На сітці $a \leq x_0, x_1, \dots, x_n \leq b$ у вузлах x_i задані значення $y_i=f(x_i)$ функції $f(x)$, неперервно диференційованої $n+1+m$ разів. Треба обчислити похідну $f^{(m)}(x^*)$, $x^* \in [a, b]$ та оцінити похибки.

Один з можливих і найпростіших шляхів рішення цієї задачі виходить внаслідок диференціювання інтерполяційних формул.

Для цього замінюємо табличну функцію $y_i = f(x_i)$ інтерполяційним поліномом, побудованим на тій самій системі вузлів x_i .

3.1. Метод диференціювання з використанням інтерполяційних формул

Метод диференціювання з використанням першої інтерполяційної формули Ньютона

Нехай є функція $f(x)$, що задана своїми значеннями у рівновіддалених точках $x_k = x_0 + kh$; $k = 0, 1, \dots, n$ на відрізку $x \in [a; b]$.

Значення функції у цих точках $f_k = f(x_k)$. Для знаходження похідних $f'(x)$, $f''(x)$ і т.д. функцію $f(x)$, замінюють інтерполяційним поліномом Ньютона, побудованим за системою вузлів $x_0, x_1, \dots, x_k$ ($k \leq n$):

$$\begin{aligned} f(x) &\approx P_n(x_0 + gh) = \\ &= f_0 + q\Delta f_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 f_0 + \dots \\ &+ \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)}{n!}\Delta^n f_0, \end{aligned}$$

де $q = \frac{x-x_0}{h}$, $h = x_{k+1} - x_k$, $k = 0, \dots, n$.

Розкриваючи дужки і враховуючи правило диференціювання складної функції:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dq} * \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} * \frac{dy}{dq},$$

отримаємо вираз для першої похідної:

$$y'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2q-1}{x} * \Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6} * \Delta^3 y_0 + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} * \Delta^4 y_0 + \dots \right]. \quad (3.1)$$

Аналогічно, за тим же правилом:

$$y'' = \frac{d(y')}{dx} = \frac{d(y')}{dq} * \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} * \frac{d(y')}{dq},$$

Отримаємо вираз для другої похідної:

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 + (q-1) * \Delta^3 y_0 + \frac{6q^2-18q+11}{6} * \Delta^4 y_0 + \dots \right] \quad (3.2)$$

Таким чином, можна при необхідності обчислити похідну функції $y(x)$ будь-якого порядку.

Зауважимо, що при обчисленні похідних у фіксованій точці x в якості x_0 , краще брати найближче табличне значення аргументу [1].

Аналогічно можна вивести формули числового диференціювання, оснований на другій інтерполяційній формулі Ньютона.

Метод диференціювання з використанням інтерполяційної формули Стірлінга (центральні різниці)

Нехай $\dots, x_{-3}, x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2, x_3, \dots$ – система рівновіддалених точок з кроком $h = x_i - x_{i-1}$. Вважаючи $q = \frac{x-x_0}{h}$ та замінюючи функцію $y=f(x)$ інтерполяційним поліномом Стірлінга, отримаємо:

$$y(x) = y_0 + q\Delta y_{-1/2} + \frac{q^2}{2!} \cdot \Delta^2 y_{-1} + \frac{q(q^2-1)}{3!} \cdot \Delta^3 y_{-3/2} + \frac{q^2(q^2-1)}{4!} \cdot \Delta^4 y_{-2} + \\ + \frac{q(q^2-1)(q^2-2^2)}{5!} \cdot \Delta^5 y_{-5/2} + \frac{q^2(q^2-1)(q^2-2^2)}{6!} \cdot \Delta^6 y_{-3} + \dots, \quad (3.3)$$

де для скорочення запису введені наступні позначення:

$$\Delta y_{-1/2} = \frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2}, \quad \Delta^3 y_{-3/2} = \frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2}, \quad \Delta^5 y_{-5/2} = \frac{\Delta^5 y_{-3} + \Delta^5 y_{-2}}{2}$$

і т.д.

З (3.3) з урахуванням того, що $\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h}$, виходить :

$$y'(x) = \frac{1}{h} \left(\Delta y_{-1/2} + q \Delta^2 y_{-1} + \frac{3q^2-1}{6} \cdot \Delta^3 y_{-3/2} + \frac{2q^3-q}{12} \cdot \Delta^4 y_{-2} + \frac{5q^4-15q^2+4}{120} \cdot \Delta^5 y_{-5/2} + \frac{3q^5-10q^3+4q}{360} \cdot \Delta^6 y_{-3} + \dots \right), \quad (3.4)$$

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 y_{-1} + q \Delta^3 y_{-3/2} + \frac{6q^2-1}{12} \cdot \Delta^4 y_{-2} + \frac{2q^3-3q}{12} \cdot \Delta^5 y_{-5/2} + \frac{15q^4-30q^2+4}{360} \cdot \Delta^6 y_{-3} \dots \right). \quad (3.5)$$

Числове диференціювання з використанням інтерполяційного полінома Лагранжа

Один з універсальних способів побудови формул числового диференціювання полягає в тому, що за значеннями функції f у вузлах $x_0, x_1, \dots, x_n$ будують інтерполяційний поліном Лагранжа $L_n(x)$, припускаючи, що справедлива наближена рівність:

$$f(x)^{(m)} \approx L^{(m)}(x), 0 \leq m \ll n.$$

Функція $f(x)$ може бути представлена як:

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x), \quad \text{де } R_n(x) \text{ — похибка.}$$

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \Omega_n, \quad \Omega_n = \max_{[0;n]} |\bar{\omega}_n(q)|.$$

Нехай $\dots, x_{-3}, x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2, x_3, \dots$ — система рівновіддалених точок, тобто відомі $x_i = x_0 + i \cdot h$.

Для такого випадку поліном Лагранжа:

$$L_n = \sum_{i=0}^n \frac{\omega_{n+1}(x) f(x_i)}{(x-x_i) \omega_{n+1}(x_i)} \quad (3.6)$$

де $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$.

Зробимо заміну: $t = \frac{x-x_0}{h}$,

отримаємо:

$$\omega_{n+1}(x) = h^{n+1}t(t-1)\dots(t-n) = h^{n+1}t^{n+1} \quad (3.7)$$

де $t^{[n+1]} = t(t-1)\dots(t-n)$ є розділена різниця порядку $(n+1)$.

Тобто, для полінома Лагранжа можна записати [1]:

$$L_n = \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} y_i}{i!(n-1)!} * \frac{t^{[n+1]}}{t-i} \quad (3.8)$$

Беручи до уваги що $dx/dt = h$, отримаємо:

$$f'(x) = L'_n(x) = \frac{1}{h} \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} f(x_i)}{i!(n-1)!} * \frac{d}{dt} \left(\frac{t^{[n+1]}}{t-i} \right) \quad (3.9)$$

Розглянемо часткові випадки:

1) $n = 1$ (2 вузли):

$$L_1(x) = (1-q)f_0 + qf_1, \quad q = \frac{x-x_0}{h}.$$

$$L'_1(x) = \frac{dL_1(x)}{dq} * \frac{dq}{dx}; \quad \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \Rightarrow L'_1(x) = \frac{1}{h}(-f_0 + f_1) = \frac{f_1-f_0}{h}.$$

$$f'(x) \approx L'(x) = \frac{f_1-f_0}{h} \quad - \text{формула для чисельного диференціювання.}$$

$$f'(x) = \frac{f_1-f_0}{h} = \frac{h}{2} f''(\xi); \quad x_0 < \xi < x_1 - \text{формула чисельного}$$

диференціювання з залишковим членом.

2) $n = 2$ (3 вузли):

$$f(x) \approx L_2(x) = \frac{(q-1)(q-2)}{2} f_0 - q(q-2)f_1 + \frac{q(q-1)}{2} f_2;$$

$$L'_2(x) = \frac{1}{h} \left[\frac{2q-3}{2} f_0 - (2q-2)f_1 + \frac{2q-1}{2} f_2 \right].$$

$$f_0(x)' \approx L'_2(x) = \frac{1}{h} \left[-\frac{3}{2} f_0 + 2f_1 - \frac{1}{2} f_2 \right] = \frac{1}{2h} [-3f_0 + 4f_1 - f_2];$$

$$f_1(x)' \approx L'_2(x_1) = \frac{1}{h} \left[-\frac{1}{2} f_0 + \frac{1}{2} f_2 \right] = \frac{1}{2h} [f_2 - f_0];$$

$$f_2(x)' \approx L'_2(x_2) = \frac{1}{h} \left[\frac{1}{2} f_0 - 2f_1 + \frac{3}{2} f_2 \right] = \frac{1}{2h} [f_0 - 4f_1 + 3f_2].$$

Знайдемо тепер другі похідні:

$$L_2''(x) = \frac{1}{h^2} [f_0 - 2f_1 + f_2]; L_2''(x_0) = L_2''(x_1) = L_2''(x_2) = \frac{1}{h^2} [f_0 - 2f_1 + f_2]$$

Різними будуть лише похибки $R_2(x_0)$, $R_2(x_1)$, $R_2(x_2)$.

3) $n = 3$ (4 вузли):

$$f'_0 = \frac{1}{6h} [-11f_0 + 18f_1 - 9f_2 + 2f_3];$$

$$f'_1 = \frac{1}{6h} [-2f_0 - 3f_1 + 6f_2 - f_3];$$

$$f'_2 = \frac{1}{6h} [f_2 - 6f_1 + 3f_2 + 2f_3];$$

$$f'_3 = \frac{1}{6h} [-2f_0 + 9f_1 - 18f_2 + 11f_3].$$

Для $n = 3$ вирази других похідних функції:

$$f''_0 = \frac{1}{h^2} [2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3].$$

$$f''_1 = \frac{1}{h^2} [f_0 - 2f_1 + f_2];$$

$$f''_2 = \frac{1}{h^2} [f_1 - 2f_2 + f_3];$$

$$f''_3 = \frac{1}{h^2} [-f_0 + 4f_1 - 5f_2 + 2f_3].$$

Помічаємо наступні закономірності:

1) Вирази для похідних функції у проміжних вузлах відрізка $[x_0; x_n]$ є більш простими, ніж у граничних вузлах.

2) При парній кількості вузлів n , у середньому вузлі для похідної парного порядку, порядок точності формули (ступінь h) на одиницю більший, ніж в інших вузлах.

Тому, рекомендується, по можливості, використовувати формули числового диференціювання з вузлами, розташованими симетрично відносно точки, в якій обчислюються похідні.

3.2. Метод диференціювання з використанням формул кінцевих різниць

За визначенням похідна функції $y(x)$:

$$y' = y'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} \Delta y = y(x + \Delta x) - y(x) \quad (3.10)$$

Але оскільки функція $y(x)$ задана таблицею, то величина приросту аргументу має кінцеве значення (кінцева різниця), і для обчислення похідної можна використовувати тільки наближену рівність виду:

$$y' = y'(x) \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad \Delta y = y(x + \Delta x) - y(x) \quad (3.11)$$

Співвідношення (3.11) називається апроксимацією (наближенням) похідної, за допомогою кінцевих різниць.

Залежно від способу обчислення кінцевих різниць, можемо отримати різні формули для обчислення похідної в одній і тій самій точці. Першу похідну функції $y(x)$ в i -тому вузлі можна апроксимувати наступним чином:

$$y_{x,i} = \frac{\Delta y_i}{\Delta x} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad (\text{права різницева похідна}) \quad (3.12)$$

$$y_{\bar{x},i} = \frac{\Delta y_i}{\Delta x} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad (\text{ліва різницева похідна}) \quad (3.13)$$

$$y_{0x,i} = \frac{\Delta y_i}{2\Delta x} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad (\text{центральна різницева похідна}) \quad (3.14)$$

Спираючись на формулу (3.11), можна знайти також вирази для похідної другого порядку (старших похідних).

$$y_i'' = (y_i')' = \frac{\frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h}}{h} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \quad (3.15)$$

Метод Рунге-Ромберга (апроксимації похідної)

Нехай в загальному випадку $F(x)$ – функція, яка задана своїми значеннями на рівномірній сітці з кроком h . Функція $F(x)$ підлягає апроксимації ($F(x)$ – це похідна). Нехай $f(x, h)$ – деяка наближена апроксимація (звичайно-різницева) функції $F(x)$ на тій самій рівномірній сітці з кроком h . $R(x, h)$ – похибка апроксимації. Припустимо, що похибку апроксимації можна записати наступним чином:

$$R(x, h) = h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) \quad (3.16)$$

Тут $h^p \psi(x)$ – основний (головний) член похибки, $O(h^{p+1})$ – залишковий член похибки. Запис у такому вигляді означає, що апроксимуюча формула з похибкою виду (3.16) має p -тий порядок точності. Тоді вираз для апроксимації функції $F(x)$ (похідної) у загальному випадку можна представити таким чином:

$$F(x) = f(x, h) + h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) \quad (3.17)$$

Припустимо, що проведено дві серії розрахунків для однієї і тієї самої точки x по одній і тій самій наближеній формулі, але при цьому використані відповідно сітки з кроками h та $h_I = kh$. Напишемо співвідношення (3.17) в точці x для сітки з кроком $h_I = kh$:

$$F(x) = f(x, kh) + (kh)^p \psi(x) + O(kh^{p+1}) \quad (3.18)$$

Прирівняємо праві частини (3.17) і (3.18):

$$f(x, h) + h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) = f(x, kh) + (kh)^p \psi(x) + O(kh^{p+1}) \quad (3.19)$$

врахуємо, що $O(h^{p+1}) \approx O(kh^{p+1})$, тому:

$$f(x, h) - f(x, kh) = (kh)^p \psi(x) - h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) \quad (3.20)$$

Знайдемо з (3.20) вираз для основного (головного) члена похибки апроксимації похідної:

$$h^p \psi(x) = \frac{f(x, h) - f(x, kh)}{k^p - 1} + O(h^{p+1}) \quad (3.21)$$

Розрахунок за другою сіткою дозволяє оцінити похибку розрахунку на першій сітці (з точністю до членів вищого порядку). Підставимо знайдений вираз похибки апроксимації похідної (3.21) в (3.17):

$$F(x) = f(x, h) + \frac{f(x, h) - f(x, kh)}{k^p - 1} + O(h^{p+1}) \quad (3.22)$$

Ця формула (3.22) називається формулою Рунге [2,3] і дозволяє за результатами двох розрахунків значень похідної $f(x, h)$ і $f(x, kh)$, з порядком точності p і кроками, відповідно h та kh , знайти уточнене значення похідної з порядком точності $p+1$.

Цей метод є досить простим, але дуже ефективним і застосовується в великому числі випадків.

3.3. Метод невизначених коефіцієнтів

Метод невизначених коефіцієнтів – це інший підхід до отримання формул чисельного диференціювання, особливо зручний в багатовимірному випадку, коли побудова інтерполяційного полінома стає непростю справою.

Станемо шукати наближений вираз для похідної від функції у вигляді [3]:

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^n c_i f(x_i), \quad (3.23)$$

який мотивується тією обставиною, що диференціювання будь-якого порядку є лінійною операцією. При цьому коефіцієнти c_i постараємося підібрати так, щоб ця формула була точною формулою для якогось «досить представницького» набору функцій, наприклад, для всіх поліномів степені не вище заданої. Враховуючи лінійність формули (3.23), можна брати в якості функції $f(x)$ поліноми $1, x, x^2, \dots, x^n$. Кожна така умова породжує якесь лінійне співвідношення для коефіцієнтів c_i , а в цілому ми приходимо до системи лінійних рівнянь, для розв'язання якої природно взяти число невідомих, що дорівнює кількості рівнянь, тобто $m = n$.

Отримана система лінійних рівнянь має вигляд:

$$\begin{cases} c_0 & + & c_1 & & + \dots + & c_n & = & 0 \\ c_0 x_0 & + & c_1 x_1 & & + \dots + & c_n x_n & = & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ c_0 x_0^{k-1} & + & c_1 x_1^{k-1} & & + \dots + & c_n x_n^{k-1} & = & 0 \\ c_0 x_0^k & + & c_1 x_1^k & & + \dots + & c_n x_n^k & = & k! \\ c_0 x_0^{k+1} & + & c_1 x_1^{k+1} & & + \dots + & c_n x_n^{k+1} & = & (k+1)! x \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ c_0 x_0^n & + & c_1 x_1^n & & + \dots + & c_n x_n^n & = & n(n-1) \dots (n-k+1) x^{n-k+1} \end{cases}$$

В правих частинах цієї системи стоять k -ті похідні від $1, x, x^2, \dots, x^n$, а матрицею системи є матриця Вандермонда, яка неособлива для попарно різних вузлів $x_0, x_1, \dots, x_n$.

При цьому система лінійних рівнянь є однозначно розв'язною відносно коефіцієнтів $c_0, c_1, \dots, c_n$ при будь якій правій частині, але змістовним є лише випадок $k \leq n$. В іншому разі, якщо $k > n$, права частина системи виявляється нульовою, і, як наслідок, система також має але тільки беззмістовне нульове рішення. Цей факт інтуїтивно ясно пояснюється: **не можна побудувати формулу для обчислювання похідної k -го порядку від функції, використовуючи значення цієї функції не більше ніж в k точках.**

Приклади

Дано таблицю значень $\{x, y\}$, функцію $\arctg(x)$, на відрізку $[a, b]$, де

$$a = x_0, b = x_n.$$

Обраховувати наближене значення першої похідної, обраної вами функції, в заданій проміжній точці x , за допомогою заданого чисельного методу

диференціювання, з використанням заданих табличних даних. Обчислити відносну й абсолютну похибки, залишити тільки вірні значущі цифри в результаті.

Обчислити значення першої та другої похідних в точці $x=x_i$ аналітично й чисельно, заданим методом для значень приросту аргументу $h = \Delta x = 1; 0.1; 0.01$; Результати розрахунків вивести на екран у вигляді таблиці.

Приклад

Нехай необхідно знайти похідну 1 та 2 порядків в точці $x = 4$ для функції

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

Отже, використовуючи метод центральних різниць можемо отримати наступні дані.

Таблиця 3.1

Значення аргументів та функції $\sinh(x)$ в залежності від кроку

$X(h=1)$	1	2	3	4	5	6	7	8
$\sinh(x)$	1.1752	3.62686	10.01787	27.28992	74.20321	201.71316	548.31612	1490.47883
$X(h=0.1)$	3.7	3.8	3.9	4	4.1	4.2	4.3	4.4
$\sinh(x)$	20.21129	22.33941	24.6911	27.28992	30.16186	33.33567	36.84311	40.7193
$X(h=0.01)$	3.97	3.98	3.99	4	4.01	4.02	4.03	4.04
$\sinh(x)$	29.48283	26.74917	27.01819	27.28992	27.56437	27.84158	28.12157	28.40437

Знайдемо другу похідну f в точці $x=4$ за наступною формулою:

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^n c_i f(x_i).$$

$f(x_i)$ – Значення функції в точках x_i .

Для прикладу візьмемо 4 точки: $x_0 = 3.8$, $x_1 = 3.9$, $x_2 = 4$, $x_3 = 4.1$, які виділені в табл.3.1.

Знайдемо коефіцієнти c_0, c_1, c_2, c_3 , для цього складемо систему:

$$\begin{cases} c_0 + c_1 + c_2 + c_3 = 0 \\ 3.8c_0 + 3.9c_1 + 4c_2 + 4.1c_3 = 0 \\ 3.8^2c_0 + 3.9^2c_1 + 4^2c_2 + 4.1^2c_3 = 2 * 1 \\ 3.8^3c_0 + 3.9^3c_1 + 4^3c_2 + 4.1^3c_3 = (3 * 2) * 4 \end{cases}$$

Розв'язуючи систему відомими методами для рішення систем лінійних алгебраїчних рівнянь отримаємо коефіцієнти:

$$c_0 = 0, \quad c_1 = 100, \quad c_2 = -200, \quad c_3 = 100.$$

Підставляємо в початкову формулу:

$$f''(4) = 0 * 22.33 + 100 * 24.691 - 200 * 27.2899 + 100 * 30.161 \approx 27.1$$

Порівнюємо отриманий результат з істинним значенням: $\sinh(x)'' = \sinh(x)$, тому друга похідна в точці $x = 4$ буде 27.28992.

Для порівняння проведемо обчислення похідної за формулою центральних різниць:

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x + \Delta x) - y(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Отже, розраховуємо (у точці 4) використовуючи таблицю вихідних значень для функції.

Значення першої похідної(крок = 1)

$$\frac{y(x + \Delta x) - y(x - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{74.20321 - 10.01787}{2 * 1} = 32.09267$$

Значення першої похідної(крок = 0.1)

$$\frac{y(x + \Delta x) - y(x - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{30.16186 - 24.6911}{2 * 0.1} = 27.3538$$

Значення першої похідної(крок = 0.01)

$$\frac{y(x + \Delta x) - y(x - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{27.56437 - 27.01819}{2 * 0.01} = 27.309$$

При аналітичному розв'язанні, похідна $\sinh(x)$ має таке значення при $x = 4$:

$$\sinh(x)' = 27,289917$$

Обрахуємо похибку результату (для кроків 1, 0.1, 0.01)

При значенні кроку 1

$$\text{Абсолютна} : \Delta = 27,289917 - 32.09267 = -4.8$$

$$\text{Відносна} : \frac{4.8}{32.09267} = 0.1496 > 14\%$$

При значенні кроку 0.1

$$\text{Абсолютна} : \Delta = 27,289917 - 27.3538 = -0.0639$$

$$\text{Відносна} : \frac{0.0639}{27.3538} = 0.0023$$

Вірні значущі цифри результату :

$$0.0639 < 0,5 * 10^{1-n+1} = 0,5 * 10^{-n}$$

Маємо $n = 0$, нуль вірних знаків після коми.

При значенні кроку 0.01

$$\text{Абсолютна} : \Delta = 27,289917 - 27.309 = -0.0191$$

$$\text{Відносна} : \frac{0.0191}{27.309} = 0.0007$$

Вірні значущі цифри результату :

$$0.0191 < 0,5 * 10^{1-n+1} = 0,5 * 10^{-n}$$

Маємо в результаті одну вірну цифру після коми, $n = 1$

Контрольні питання і завдання

1. В чому особливість чисельного диференціювання з використанням інтерполяційних поліномів?
2. Назвіть основні джерела похибок чисельного диференціювання?
3. Розкрийте сенс методу невизначених коефіцієнтів.
4. Для чого використовують метод Рунге?
5. Як обирається крок в методі Рунге?

4. ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ

Питання для розгляду:

- формули прямокутників;
- формула трапецій;
- формула парабол (Симпсона);
- метод Ньютона-Котеса;
- метод Чебишова;
- метод Гауса;
- метод Монте-Карло.

В багатьох задачах, що пов'язані з аналізом, ідентифікацією, оцінюванням якості систем виникає необхідність обчислення певних інтегралів.

Якщо функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[a,b]$ й відома її первісна $F(x)$, то визначений інтеграл в межах $[a,b]$ може бути обчислений за формулою Ньютона – Лейбніца:

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

де $F'(x) = f(x)$.

Графічно інтеграл визначається площею, що обмежується графіком функції $y=f(x)$.

Але часто точно обчислити інтеграл важко через велику складність аналітичних перетворень, а інколи це взагалі неможливо (у випадках невластних інтегралів), чи коли підінтегральна функція задана набором числових даних, наприклад, отриманих з експерименту, або в результаті складних обчислень.

Все це породжує потребу у побудові формул чисельного інтегрування, або квадратурних формул.

Задача чисельного інтегрування функції полягає в обчисленні значення визначеного інтеграла на основі ряду значень підінтегральної функції. Формули чисельного інтегрування часто називають квадратурними.

Найбільш відомими методами знаходження визначених інтегралів є [1,3]:

- формули прямокутників, трапецій, Симпсона (метод парабол);
- методи Ньютона-Котеса, Гауса, Чебишова, які ґрунтуються на використанні так званих квадратурних формул, отриманих заміною $f(x)$ інтерполяційними поліномами;
- методи Монте-Карло, ґрунтовані на використанні методів статистичних випробувань.

4.1. Методи інтегрування на основі локальної інтерполяції

Формули прямокутників

Ідея методу полягає в розбитті відрізка інтегрування на дрібні частини $[x_{i-1}, x_i]$ і у побудові прямокутників, які спираються на відрізки $[x_{i-1}, x_i]$ и мають висоту $f(\zeta)$. Якщо розбиття відрізка рівномірне, то $x = a + i \cdot h$, де h – крок

$$h = \frac{(a-b)}{n}, \overline{0, n..}$$

Вважається, що інтеграл дорівнює приблизно сумі площ побудованих прямокутників. **Узагальнена квадратурна формула прямокутників** має вигляд:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}),$$

де точка $\xi_i \in (x_i, x_{i-1})$.

В залежності від вибору ξ_i , розрізняють формули лівих, правих й середніх прямокутників.

Нехай $\xi_i = x_{i-1}$. **Формула лівих прямокутників**, має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) \text{ – для нерівновіддалених вузлів,}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}) \text{ – для рівновіддалених вузлів.}$$

Порядок точності формули перший. Геометрична інтерпретація наведена на (рис.4.1.):

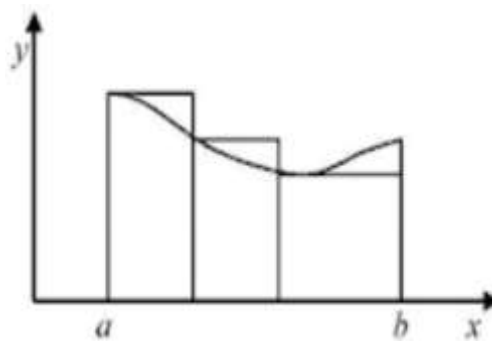


Рис. 4.1. Метод лівих прямокутників

Нехай $\xi_i = x_i$. **Формула правих прямокутників**, має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f(x_i)(x_i - x_{i-1}) \text{ – для нерівновіддалених вузлів}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f(x_i) \text{ – для рівновіддалених вузлів}$$

Порядок точності формули – перший.

Геометрична інтерпретація наведена на (рис.4.2):

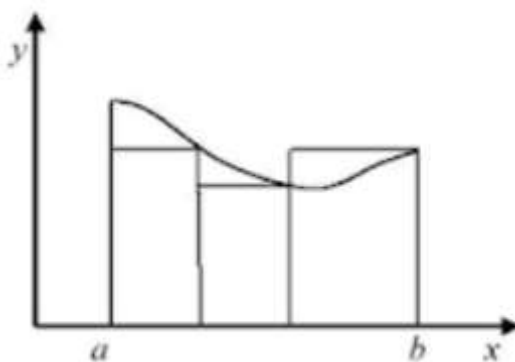


Рис. 4.2. Метод правих прямокутників

Нехай $\xi_i = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i)$, **формула середніх прямокутників** має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)(x_i - x_{i-1}) - \text{для нерівновіддалених вузлів}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) - \text{для рівновіддалених вузлів}$$

Порядок точності формул – другий. Геометрична інтерпретація наведена на рис.4.3.:

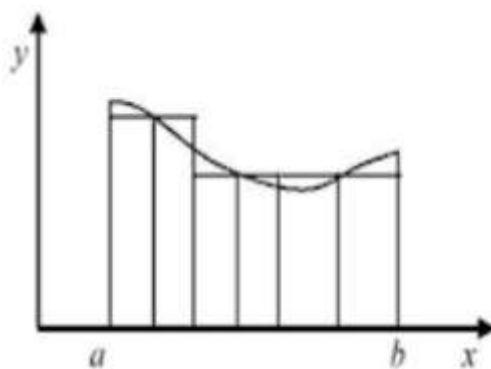


Рис. 4.3. Метод середніх прямокутників

Формули лівих та правих прямокутників можуть бути використані як для аналітично заданих функцій, так і для функцій, заданих таблицею. Метод середніх прямокутників може використовуватись для пошуку інтегралів тільки від аналітично заданих функцій.

4.2. Квадратурні формули інтегрування

Формули Ньютона-Котеса

Для виведення формул Ньютона-Котеса інтеграл зображується у вигляді:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + \Delta, \quad (4.1)$$

де x_i – вузли інтерполяції; A_i – коефіцієнти, які залежать від вигляду формули; Δ – похибка квадратурної формули.

Замінюючи в (4.1) підінтегральну функцію відповідним інтерполяційним поліномом Лагранжа для n рівновіддалених вузлів з кроком $h=(b-a)/n$, можна одержати таку формулу для розрахунку коефіцієнтів A_i , при довільній кількості вузлів:

$$A_i = \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-1}}{i!(n-1)!} \int_0^n \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{(q-i)} dq, \quad (4.2)$$

де $q = \frac{x-a}{h}$ – приведена змінна, а $a = x_0$.

Звичайно коефіцієнти $H_i = \frac{A_i}{b-a}$ називають коефіцієнтами Котеса.

При цьому формула набуває вигляду:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a) \sum_{i=0}^n H_i f(x_i)$$

і має такі властивості:

$$\sum_{i=0}^n H_i = 1 \text{ і } H_i = H_{n-i}$$

При $n=1$ і $n=2$ з формул (4.1) і (4.2) отримаємо формули методів трапецій та Симпсона:

$$\int_a^b f(x)dx = h\left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1}\right),$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(y_0 + y_n + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1})).$$

В таблиці наведені значення коефіцієнтів для $n = 1, 2, \dots, 8$

Таблиця 4.1

Коефіцієнти Котеса

$n \setminus N$	H_0	H_1	H_2	H_3	H_4	H_5	H_6	H_7	H_8	Загальний знаменник n
1	1	1								2
2	1	4	1							6
3	1	3	3	1						8

4	7	32	12	32	7					90
5	19	75	50	50	75	19				288
6	41	216	27	272	27	216	41			840
7	751	3577	1223	2989	2989	1223	3577	751		17280
8	989	5888	-958	10496	-4540	10496	-928	5888	989	28350

Похибки формул трапецій і Симпсона визначаються, відповідно, з виразів:

$$\Delta = -\frac{h^3}{12}M_2 \quad \text{та} \quad \Delta = -\frac{h^5}{90}M_4,$$

де M_2 і M_4 – максимальні для $f(x)$ при $x \in (a,b)$ значення другої та четвертої похідних.

Складові формули Ньютона-Котеса отримаємо шляхом комбінації простих формул. Наприклад, для формул трапецій і Симпсона (для парних n):

$$I = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + f(x_n)],$$

$$I = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + f(x_n)].$$

Аналогічно можна отримати складові формули Ньютона-Котеса більш високих порядків.

Для оцінювання похибки на практиці можна користуватись методом Рунге, аналогічно тому, як це робиться для методів диференціювання.

Формула Чебишова

Попередня формула може бути приведена до вигляду:

$$\int_{-1}^1 f(t)dt = \sum_{i=1}^n A_i f(t_i) \quad (4.3)$$

заміною змінних:

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t.$$

При виведенні формули Чебишова використовуються такі умови:

- коефіцієнти A_i рівні між собою;
- квадратурна формула (4.3) точна для всіх поліномів до степені n виключно.

За цих умов формула (4.3) має вигляд:

$$\int_{-1}^1 f(t)dt = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n f(t_i) \quad (4.4)$$

Для знаходження t_i , використовуємо другу умову, згідно з якою формула (4.4) повинна бути точною для функції вигляду:

$$f(t) = t^k, k = 1, \dots, n.$$

Після підстановки цих функцій в формулу (4.4) отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{cases} t_1 + t_2 + \dots + t_n = 0, \\ t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2 = \frac{n}{3}, \\ \dots \\ t_1^n + t_2^n + \dots + t_n^n = \frac{n[1 - (-1)^{n+1}]}{2(n+1)}. \end{cases} \quad (4.5)$$

Система рівнянь (4.5) має розв'язок при $n < 8$ та $n=9$. В цій обмеженій точності і полягає недолік формули Чебишова, тому що для більш високого порядку n , система не має дійсних рішень.

Значення t_i , для різних n наведені в таблиці 4.2.

Для довільного інтервалу (a, b) маємо формулу:

$$I = \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \text{ де } x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t_i.$$

Таблиця 4.2

Значення абсцис t_i , в формулі Чебишова

n	i	t_i
2	1;2	∓ 0.577350
3	1;3	∓ 0.707107
	2	0
4	1;4	∓ 0.794654
	2;4	∓ 0.187592
5	1;5	∓ 0.832498
	2;4	∓ 0.3745413
	3	0

n	i	t_i
6	1;6	∓ 0.866247
	2;5	∓ 0.422519
	3;4	∓ 0.266635
7	1;7	∓ 0.883862
	2;6	∓ 0.529657
	3;5	∓ 0.323912
	4	0

Похибка обчислень за методом Чебишова:

$$\Delta = \int_a^b \frac{\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(x) dx - \frac{b-a}{n(n+1)!} \sum_{i=1}^n \left(x_i - \frac{a+b}{2}\right)^{n+1} f^{(n+1)}(x).$$

Формула Гауса

Формула Гауса називається формулою найвищої алгебраїчної точності. Для формули раніше найвища точність може бути досягнута для поліномів степені $(2n - 1)$, які визначаються $2n$ постійними t_i і A_i , $(i = 1, 2, \dots, n)$.

Завдання полягає у визначенні коефіцієнтів A і абсцис точок t_i .

Для знаходження цих постійних розглянемо виконання формули (4.3) для функцій вигляду:

$$f(t) = t^k, k = 0, 1, \dots, 2n - 1.$$

Враховуючи, що:

$$\int_{-1}^1 t^k dt = \begin{cases} 2/(k+1) \\ 0 \end{cases},$$

Отримаємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n A_i = 2; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i = 0; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^2 = 1; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^{2n-2} = \frac{2}{2n-1}; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^{2n-1} = 0. \end{cases} \quad (4.6)$$

Ця система нелінійна, і її звичайне розв'язання пов'язане зі значними обчислювальними труднощами. Але якщо використовувати систему для поліномів вигляду:

$$f(t) = t^k P_n(t), \quad k = 0, 1, \dots, n - 1,$$

де $P_n(t)$ поліном Лежандра, тоді її можна звести до лінійної відносно коефіцієнтів A_i з заданими точками t_i . Оскільки степені поліномів у співвідношенні не перевищують $2n-1$, система повинна мати розв'язок, і формула (4.3) приймає вигляд:

$$\int_{-1}^1 t^k P_n(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i t_i^k P_n(t_i) \quad (4.7)$$

В результаті властивості ортогональності ліва частина виразу (4.7) дорівнює 0, тоді:

$$\sum_{i=1}^n A_i t_i^k P_n(t_i) = 0,$$

що завжди забезпечується при будь-яких значеннях A_i в точках t_i , які відповідають кореням відповідних поліномів Лежандра.

Підставляючи значення t_i , в систему (4.6) і враховуючи перші n рівнянь, можна визначити коефіцієнти A_i .

Формула (4.3), де t_i – нулі полінома Лежандра $P_n(t)$, а A_i , $i=1,2,\dots,n$ визначаються з системи (4.6), називається формулою Гауса.

Значення t_i , A_i для різних n наведені в таблиці параметрів формули Гауса (Табл.4.3.)

Таблиця 4.3

Параметри формули Гауса

n	i	t_i	A_i
1	1	0	2
2	1;2	∓ 0.57735027	1
3	1;3	∓ 0.77459667	$5/9=0.55555556$
	2	0	$8/9=0.88888889$
4	1;4	∓ 0.86113631	0.34785484
	2;3	∓ 0.33998104	0.65214516
6	1;6	∓ 0.93246951	0.17132450
	2;5	∓ 0.66120939	0.36046158
	3;4	∓ 0.238619119	0.46791394
7	1;7	∓ 0.94910791	0.12948496
	2;6	∓ 0.74153119	0.27970540
	3;5	∓ 0.40584515	0.38183006
	4	0	0.41795918
8	1;8	∓ 0.96028986	0.10122854
	2;7	∓ 0.79666648	0.22238104
	3;6	∓ 0.52553142	0.31370664
	4;5	∓ 0.18343464	0.36268678

Для довільного інтервалу $[a,b]$, формула методу Гауса приймає вигляд:

$$I = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f(x_i),$$

де

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t_i.$$

Оцінка похибки формули Гауса з n вузлами визначається зі співвідношення:

$$\Delta \leq \frac{(b-a)^{2n+1} (n!)^4 M_{2n}}{2^{2n+1} [(2n)!]^3 (2n+1)}$$

де M_{2n} – максимальне значення $2n$ похідної на відрізку $[a,b]$.

У випадку, коли підінтегральна функція задана аналітично, може бути поставлена задача про знаходження інтеграла з наперед заданою точністю. Оскільки точність розглянутих вище квадратурних формул залежить від кроку h , то точність результату можна підвищити, зменшуючи крок. Наприклад, можна ділити крок навпіл. В цьому випадку для оцінювання наближення до точного значення інтеграла використовують вже згадуваний метод Рунге:

$$I - I_{h/2} \approx \frac{I_{h/2} - I_h}{2^p - 1},$$

де I – точне значення інтеграла; I_h – наближене значення, отримане з кроком h ; $I_{h/2}$ – наближене значення, отримане з кроком $h/2$; p – порядок точності квадратурної формули.

Тому, для знаходження інтеграла з заданою точністю ε , потрібно обрати квадратурну формулу й початковий крок $h=h_0$. Далі розрахувати інтеграл з кроком $h/2$. Зменшувати крок навпіл необхідно до тих пір, поки не виконається умова:

$$|I_{h/2} - I_h| < \varepsilon.$$

Коли ця умова виконана, інтеграл приблизно дорівнює $I_{h/2}$.

Алгоритми застосування чисельних методів

Розглянемо послідовність дій для найбільш складних і точних алгоритмів. Послідовність застосування методу Гауса:

1. Вибір порядку методу і знаходження (за допомогою таблиці 4.3.) коефіцієнтів A_i значень t_i ($-1 \leq t \leq 1$).
2. Розбиття інтервалу $a \leq x \leq b$ на n інтервалів (рис. 4.4).
3. Знаходження значень для кожного інтервалу ($j=1, \dots, n$)

$$I = \sum_{j=1}^n I_j.$$

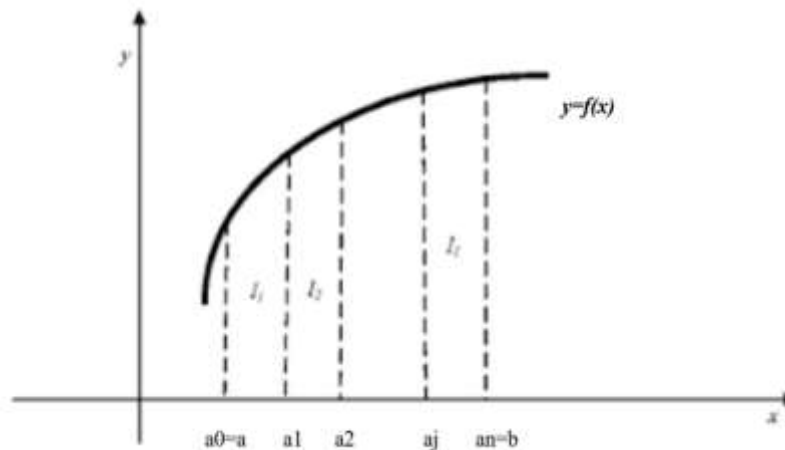


Рис. 4.4. Метод Гауса. Розбивка інтервалу

При цьому значення абсцис x_i , всередині кожного інтервалу j знаходяться за формулою:

$$x_i = \frac{a_{j+1}+a_j}{2} + \frac{a_{j+1}-a_j}{2} t_i, \quad (4.8)$$

де

$$a_{j+1} = a_j + h; \quad a_1 = a$$

$$a_{l+1} = b \quad j = 1, \dots, l;$$

$$h = \frac{b-a}{n}$$

I_j знаходяться за формулою:

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(x) dx = \frac{(a_{j+1}-a_j)}{2} \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) \quad (4.9)$$

Оцінювання похибки

В методі Чебишова послідовність дій аналогічна методу Гауса, але в пункті 1 коефіцієнти t_i , беруться з таблиці, а в пункті 3 для знаходження j -го інтеграла використовується формула:

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(x) dx = \frac{(a_{j+1}-a_j)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad (4.10)$$

де x_i , оцінюється так само, як і в методі Гауса, за формулою (4.8).

4.3. Метод Монте-Карло

Метод чисельного інтегрування Монте-Карло – це найбільш відоме застосування статистичного моделювання для розв'язання прикладних математичних задач.

Якщо з послідовністю випадкових чисел $\{x_i\} \in X$ з законом розподілу ймовірностей $f_x(x)$ провести функціональне перетворення:

$$y_i = \phi(x_i),$$

то математичне сподівання отриманої послідовності випадкових чисел $\{y_i\} \in Y$:

$$m_y = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) f_x(x) dx \quad (4.11)$$

при обсязі вибірки більше декількох тисяч чисел з достатньо високою точністю може бути оцінено за формулою:

$$m_y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (4.12)$$

Введемо в вирази так звану функцію індикатора області:

$$1[a, b, x] = \begin{cases} 1, & a \leq x \leq b; \\ 0, & x < a, x > b. \end{cases}$$

Якщо тепер обрати функцію:

$$\phi(x) = \frac{f(x)}{f_x(x)},$$

то кінцевий вираз буде мати вигляд:

$$I = m_y = \int_a^b f(x) dx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{f_x(x_i)} 1[a, b, x_i].$$

Похибка методу Монте-Карло визначається похибкою генерації псевдо випадкової послідовності чисел, що генеровані на комп'ютері, та обсягом вибірки. Вона може бути оцінена зі співвідношення:

$$\Delta = \frac{1}{2\sqrt{n(1-P)}}, \quad (4.13)$$

де p – гарантована ймовірність потрапляння похибки в інтервал $[-\Delta; +\Delta]$.

Кількість випробувань n не залежить від кратності інтеграла, тому метод Монте-Карло знаходить застосування для обчислення багатократних інтегралів, де застосовувати інші методи чисельного інтегрування неефективно через помітне збільшення кількості обчислювальних операцій.

Розглянемо послідовність дій при обчисленні кратних інтегралів. Для реалізації цієї процедури перш за все потрібно мати m генераторів випадкових чисел, де m дорівнює кратності інтегрування.

Геометрично, обчислення m -кратного інтеграла:

$$I = \iint_{(S)} \dots \int f(x_1, x_2, \dots, x_m) dx_1 dx_2 \dots dx_m, \quad (4.14)$$

де $y=f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ неперервна функція в обмеженій замкненій області зводиться до визначення $(m+1)$ -вимірного об'єму циліндра, що побудований на основі S і обмежений зверху поверхнею $y=f(x_1, x_2, \dots, x_m)$.

Для перетворення інтеграла (4.14) таким чином, щоб нова область інтегрування цілком знаходилась всередині одиничного m -вимірного куба σ , зробимо заміну змінних:

$$x_i = a_i + (b_i - a_i)\xi_i,$$

де ξ_i – відповідні координати від 0 до 1: a_i, b_i граничні значення координат області інтегрування.

Тоді з (4.14) отримуємо:

$$I = (a_1 - b_1)(a_2 - b_2) \dots (a_m - b_m)I_\xi,$$

де

$$I_\xi = \iint_{(\sigma)} \dots \int f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_m.$$

Якщо застосувати m генераторів рівномірно розподілених випадкових чисел в діапазоні $(0,1)$, то обчислення середнього значення функції від їх комбінацій з застосуванням багатовимірного індикатора області інтегрування дасть шукану оцінку інтеграла:

$$I_\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}) 1[\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}].$$

де $1[\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}]$ дорівнює 1, якщо точка потрапляє всередину області інтегрування, і 0, якщо не потрапляє.

Похибка обчислення m -кратного інтеграла за методом Монте-Карло оцінюється аналогічно однократному.

Розрахунок прикладу за методом Ньютона-Котеса

Завдання: знайти інтеграл функції $\text{ctg}(x)$ на проміжку $x \in [1;2]$.

Отримавши інтеграл функції $\text{ctg}(x)$, а саме $\ln(\sin(x)) + C$, при застосуванні формули Ньютона-Лейбніца на проміжку від $[a;b]$ маємо (аналітичне значення функції у заданій точці):

$$\ln(\sin(b)) - \ln(\sin(a)) = \ln(\sin(2)) - \ln(\sin(1)) = 0.0775207$$

Тепер, необхідно отримати апроксимаційне значення даної задачі.

Застосуємо метод Ньютона-Котеса порядку $n = 3$ для обчислення даного інтегралу:

$$\int_a^b f(x)dx \approx C_0 h \sum_{i=0}^n H_i f(x_i)$$

де n – кількість відріків розбиття (власне і степінь апроксимуючого поліному).

Таблиця 4.4

Коефіцієнти H_i для даної формули порядку 1-6

$N \setminus N$	H_0	H_1	H_2	H_3	H_4	H_5	H_6	H_7	H_8	Загальний знаменник n
1	1	1								2
2	1	4	1							6
3	1	3	3	1						8
4	7	32	12	32	7					90
5	19	75	50	50	75	19				288
6	41	216	27	272	27	216	41			840
7	751	3577	1223	2989	2989	1223	3577	751		17280
8	989	5888	-958	10496	-4540	10496	-928	5888	989	28350

Отже, при розв'язанні отриманої задачі розраховуємо наступні параметри:

Крок розбиття: $h = \frac{b-a}{n}$

Отже, маємо такі результати:

Крок інтегрування:

$$h = \frac{2-1}{3} = \frac{1}{3}$$

Коефіцієнти для інтегрування з таблиці для $n = 3$:

$$C_0 = \frac{3}{8}$$

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 3$$

$$H_2 = 3$$

$$H_3 = 1$$

Таблиця 4.5

Залежність функції від X

$X(h=\frac{1}{3})$	1	$1+\frac{1}{3}$	$1+2\frac{1}{3}$	2
$\text{Ctg}(x)$	0.64209	0.24202	-0.0961	-0.45756

Отже, згідно формули Ньютона-Котеса 3 порядку точності, маємо:

$$\int_1^2 \text{ctg}(x) dx \approx \frac{3}{8} * \frac{1}{3} (1 * 0.64209 + 3 * 0.24202 - 3 * 0.0961 - 0.45756) = 0.0777$$

Обрахуємо абсолютну та відносну похибки результату та кількість вірних значущих цифр:

Абсолютна похибка: $0.0775207 - 0.0777 = 0.0001793$

Відносна похибка: $\frac{0.0001793}{0.0777} = 0.00231$

Вірні значущі цифри $\Delta x < 0,5 * 10^{m-n+1}$

$$0.00231 < 0,5 * 10^{1-n+1} = 0,5 * 10^{-n}$$

Маємо $n = 2$.

Контрольні питання і завдання

1. У чому ідея методів Ньютона-Котеса для наближеного обчислення певних інтегралів?
2. Як впливає на точність чисельного інтегрування величина кроку h ?
3. Чи можна досягти необмеженого зменшення похибки інтегрування шляхом послідовного зменшення кроку?
4. Чому метод середніх прямокутників не застосовується для чисельного інтегрування функцій заданих таблицею?

5. Які переваги формули Сімпсона в порівнянні з формулою трапецій та наслідком чого є ці переваги?
6. У якому разі формула Сімпсона дає точне значення інтеграла?
7. Який підхід використовується на практиці для обчислення інтегралу із заданою точністю?
8. Яка ідея обчислення певного інтеграла методом Монте-Карло?
9. Формула якого методу інтегрування називається формулою найвищої алгебраїчної точності?

5. МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

Питання для розгляду:

- ітераційні методи розв'язання;
- лінійні стаціонарні методи;
- ітераційна процедура;
- порівняльні характеристики ітераційних методів;
- матриця розщеплення;
- поняття суміжної системи;
- цілком узгоджений ітераційний метод;
- необхідна та достатня умова збіжності ітераційної процедури;
- прямі методи (модифіковані методи Гауса) на самостійне вивчення;
- порівняльний аналіз ітераційних та прямих методів.

Системи лінійних алгебраїчних рівнянь можна розв'язувати за допомогою як прямих, так і ітераційних методів.

Ітераційні методи розв'язання – це методи наближеного розв'язування, що базуються на послідовному наближенні до розв'язку шляхом багаторазового застосування деякої обчислювальної процедури, при цьому вихідними даними для кожної наступної процедури є результати застосування попередніх процедур. Наслідком такого ітераційного процесу є послідовність, яка при виконанні деяких умов збігається до розв'язку задачі.

Для систем середньої вимірності часто більш привабливими є прямі методи. Ітераційні методи застосовуються головним чином для розв'язування складних задач великої вимірності, для яких внаслідок обмежень, що накладаються на об'єм робочої пам'яті і число арифметичних операцій, використання прямих методів виявляється достатньо важким або значно менше ефективним [3]. Наприклад, ітераційні методи, як правило, застосовуються для розв'язання задач з трьома просторовими змінними, задач, що включають системи нелінійних рівнянь, задач, що виникають при дискретизації систем рівнянь в частинних похідних, а також для розв'язування нестационарних задач з більш ніж однією просторовою змінною.

Формулювання і застосування ітераційних методів потребує спеціальних знань і деякого досвіду. Ефективному використанню ітераційних методів заважають три обставини [1]:

1) невідомо, який метод належить застосовувати і яким чином його можна реалізувати;

2) невідомо, як обирати ітераційні параметри, які необхідні для роботи конкретних методів, наприклад, коефіцієнт релаксації для методу послідовної верхньої релаксації;

3) неясний вибір моменту закінчення ітераційного процесу.

Внаслідок великого різноманіття задач та ітераційних процедур повністю позбавитися цих невизначеностей неможливо.

Вибір ефективного ітераційного методу розв'язування конкретної задачі залежить від її характерних властивостей та від архітектури обчислювальної машини, на якій буде розв'язуватися задача.

З огляду на це, жодних загальних правил вибору найкращого методу розв'язування не існує. Проте, знання порівняльних характеристик ряду ітераційних процедур загального вигляду може суттєво спростити проблему.

Отже, підхід до вибору методу має ґрунтуватись на аналізі теоретичних та обчислювальних принципів загальних ітераційних методів. Ці принципи потім можна реально використовувати при виборі ефективного ітераційного методу.

5.1. Ітераційні методи

Розглянемо клас ітераційних методів, призначених для розв'язування лінійних систем:

$$Ax=b, \quad (5.1)$$

де A – задана дійсна невинроджена матриця розміру $n \times n$, а b – заданий вектор-стовпець, що складається з n дійсних компонент.

Всі методи, що будуть нами розглянуті, є *лінійними стаціонарними методами першого порядку*, які можуть бути записані в такому вигляді:

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + F, \quad k=0,1,2,\dots \quad (5.2)$$

де G – дійсна матриця переходу даного методу розміру $n \times n$, а F – відповідний відомий вектор. Такий метод є методом першого порядку, оскільки наближення x^{k+1} залежить явно лише від x^k , але не залежить явно від $x^{k-1}, x^{k-2}, \dots, x^0$. Метод є лінійним, оскільки дані матриця G та вектор F не залежать від x^k . Цей метод є стаціонарним, оскільки ані G , ані F не залежать від номера ітерації n .

В подальшому, до основних ітераційних методів ми будемо відносити будь-який ітераційний метод виду (5.2).

До найбільш відомих основних ітераційних методів належать: метод Річардсона, метод Якобі, метод Гауса-Зейделя, метод послідовної верхньої релаксації і симетричної послідовної верхньої релаксації.

Всюди будемо припускати, що:

$$G = I - Q^{-1}A, \quad F = Q^{-1}b \quad (5.3)$$

для деякої невідродженої матриці Q . Така матриця Q називається *матрицею розщеплення*.

Із припущення (5.3) і того факту, що матриця A є невідродженою, витікає, що x є розв'язком суміжної системи:

$$(I - G)x = F \quad (5.4)$$

тоді і тільки тоді, коли $\bar{x}$ є також розв'язком системи (5.1), тобто:

$$\bar{x} = A^{-1}b. \quad (5.5)$$

Ітераційний метод (5.2), суміжна система (5.4) для якого має єдиний розв'язок x , що співпадає із розв'язком (5.1), називається *цілком узгодженим*.

Якщо $\{x^k\}$ є послідовністю ітераційних наближень, які визначаються за допомогою (5.2), то з властивості цілковитої (повної) узгодженості витікає, що:

- 1) якщо $x^k = \bar{x}$ для деякого k , то $x^{k+1} = x^{k+1} = \dots = \bar{x}$;
- 2) якщо послідовність $\{x^k\}$ збігається до деякого вектору $\bar{x}$, то $\hat{x} = \bar{x}$.

Завжди будемо припускати, що основний ітераційний метод (5.2) є *цілком узгодженим*, оскільки наявність цієї властивості є істотною для будь-якого розумного методу.

Іншою властивістю основних ітераційних методів, яку ми не завжди будемо заздалегідь припускати, є їхня збіжність. Кажуть, що *метод (5.2) збігається*, якщо для будь-якого початкового наближення x^0 послідовність $x^1, x^2, \dots$, що визначається за допомогою (5.2), збігається до $\bar{x}$.

Необхідна та достатня умова збіжності має вигляд:

$$S(G) < 1 \quad (5.6)$$

Для вимірювання швидкості збіжності лінійного стаціонарного ітераційного методу (5.2) визначимо вектор похибки ε^k :

$$\varepsilon^{(k)} = x^{(k)} - \bar{x}. \quad (5.7)$$

Визначимо середню швидкість збіжності методу (5.2) в такий спосіб:

$$R_k(G) = -\frac{1}{k} \ln \|G^k\|_\alpha. \quad (5.8)$$

Можна показати, що якщо $S(G) < 1$, то:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\|G^k\|_\alpha)^{\frac{1}{k}} = S(G). \quad (5.9)$$

Отже, ми прийшли до визначення *асимптотичної швидкості збіжності*:

$$R_\infty(G) = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k(G) = -\ln S(G). \quad (5.10)$$

Часто $R_\infty(G)$ називають просто *швидкістю збіжності*.

Якщо $S(G) < 1$, то грубе наближення для кількості ітерацій, що потрібні для зменшення норми вектору початкової похибки в ζ^{-1} разів, визначається за формулою:

$$k \approx -\frac{\ln \zeta}{R_\infty(G)} \quad (5.11)$$

Для більшості методів прискорення наявність збіжності основного методу (5.2) не є необхідною. Як правило, виявляється достатньо, щоб метод був *симетризованим*.

Визначення 1

Ітераційний метод (5.2) є симетризованим, якщо для деякої невідродженої матриці W матриця $W(I-G)W^{-1}$ виявляється симетричною і додатно визначеною.

Така матриця W називається *матрицею симетризації*.

Ітераційний метод, що не є симетризованим, називається *несиметризованим*.

Теорема: Якщо ітераційний метод (5.2) є симетризованим, то:

- 1) власні значення матриці G є дійсними;
- 2) алгебраїчно найбільше власне число $\lambda_{\max}$ матриці G менше одиниці;
- 3) множина власних значень матриці G містить базис відповідного векторного простору.

Численні ітераційні методи є симетризованими. Наприклад, основний метод (5.2) є симетризованим, якщо матриця A і матриця розщеплення Q в (5.3)

виявляються симетричними і додатно визначеними. В цьому випадку матриці $A^{1/2}$ і $Q^{1/2}$ є матрицями симетризації.

Крім того, матрицею симетризації є також будь-яка матриця W , така що:

$$Q = W^T W.$$

Зауважимо, що із властивості симетризованості не обов'язково впливає властивість збіжності. Якщо ітераційний метод (5.2) є симетризованим, то власні числа матриці G виявляються меншими за одиницю, але не обов'язково менше одиниці за модулем.

Отже, умова збіжності не завжди виконується. Проте завжди існує так званий екстрапольований метод, заснований на (5.2), який є збіжним, коли основний метод є симетризованим.

Екстрапольований метод визначається так:

$$x^{(k+1)} = \gamma(Gx^{(k)} + F) + (1-\gamma)x^{(k)} = G_{[\gamma]}x^{(k)} + \gamma F, \quad (5.12)$$

де

$$G_{[\gamma]} \equiv \gamma G + (1-\gamma)I \quad (5.13)$$

Тут γ – параметр, який часто називають "коефіцієнтом екстраполяції". Якщо ітераційний метод є симетризованим, то оптимальне значення γ для параметра γ в сенсі мінімізації $S(G_{[\gamma]})$ визначається за формулою:

$$\bar{\gamma} = \frac{2}{2 - \lambda_{\max}(G) - \lambda_{\min}(G)}, \quad (5.14)$$

де $\lambda_{\min}(G)$ і $\lambda_{\max}(G)$ є найменшим і найбільшим власним числом матриці G , відповідно.

Опустимо доказ того, що з умови $\lambda_{\max} < 1$. впливає, що оптимальний екстрапольований метод (5.12), є збіжним. Але це дійсно так.

Одним з найбільш вживаних ітераційних методів, який відрізняється швидкістю збіжності, простотою та легкістю програмування, є **метод Гаусса-Зейделя**.

Проілюструємо схему рішення методу. Хай дано систему трьох рівнянь (5.15):

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3\end{aligned}\tag{5.15}$$

Припустимо, що діагональні елементи a_{11} , a_{22} , a_{33} відмінні від нуля (в іншому випадку можна переставити рівняння). Виразимо невідомі x_1 , x_2 и x_3 відповідно з першого, другого и третього рівнянь системи (5.15):

$$\begin{aligned}x_1 &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3), \\x_2 &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3) \\x_3 &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2)\end{aligned}\tag{5.16}$$

Привласнимо деякі початкові наближення (нульові) значень невідомих: $x_1 = x_1^{(0)}$, $x_2 = x_2^{(0)}$, $x_3 = x_3^{(0)}$. Підставимо їх в перше рівняння правої частини виразу (5.16), отримаємо нове (перше) наближення для x_1 (5.17):

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)})\tag{5.17}$$

Використаємо значення (5.17) для x_1 та наближення $x_3^{(0)}$ для x_3 , знайдемо (5.18) перше наближення для x_2 :

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(0)})\tag{5.18}$$

И нарешті, використаємо обчислені значення $x_1 = x_1^{(1)}$, $x_2 = x_2^{(1)}$, отримаємо перше наближення для x_3 (5.19):

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(1)} - a_{32}x_2^{(1)})\tag{5.19}$$

На цьому завершується перша ітерація рішення системи (5.16).

Використаємо для наступної ітерації, в якості початкових, отримані значення $x_1^{(1)}$, $x_2^{(1)}$, $x_3^{(1)}$, і проведемо ітераційну процедуру так само, як попередню. Знайдемо другі наближення до рішення: $x_1 = x_1^{(2)}$, $x_2 = x_2^{(2)}$, $x_3 = x_3^{(2)}$ і т. д.

Таким чином, загальна формула ітераційного процесу для k -ітерації матиме вигляд:

$$\begin{aligned}x_1^{(k)} &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k-1)} - a_{13}x_3^{(k-1)}), \\x_2^{(k)} &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k-1)}) \\x_3^{(k)} &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k)})\end{aligned}\tag{5.20}$$

Ітераційний процес продовжуватиметься до тих пір, поки *всі* значення $x_i^{(k)}$ на k -ітерації не стануть близькими до значень $x_i^{(k-1)}$, отриманих на $(k-1)$ - ітерації:

$$|x_i^{(k)} - x_i^{k-1}| \leq \varepsilon$$

5.2. Прямі методи

Метод розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносять до класу *прямих, або точних*, якщо за умови відсутності округлень він дає точний розв'язок задачі після скінченного числа арифметичних і логічних операцій. До цих методів належать найбільш розповсюджений і всім відомий метод Гауса та його модифікації, метод відбиття (Хаусхолдера), метод обертань (Гівенса), метод квадратних коренів, метод Холецкого (метод LU – факторизації), метод прогону і т.п.

- **Метод послідовного виключення.** Найпростішим, хоча важким для практичних застосувань, методом розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь є метод послідовного виключення невідомих. Суть його в тому, що із першого рівняння змінна x_1 виражається через інші змінні, й підставляється в усі інші рівняння. Це можна зробити, якщо коефіцієнт a_{11} відмінний від нуля. У випадку, якщо він нульовий, можна вибрати інше рівняння, оскільки перестановка рівнянь у системі дає еквівалентну систему. В результаті утворюється нова система рівнянь, в якій рівнянь на одне менше. З цією системою рівнянь можна поступити так само, виключаючи ще одне рівняння. Продовжуючи так, отримують одне лінійне рівняння, з якого можна визначити одну із змінних, а інші, виключені, виразити через неї.

- **Метод Гауса** — метод, найчастіше застосовуваний при ручному розв'язку систем .

- **Метод Гауса-Жордана** - модифікація методу Гауса.

- **Метод Крамера (за формулами Крамера)** — чисто теоретичний метод, непридатний до практичного використання через обчислювальну складність і малу точність, оскільки вимагає обчислення визначників, а тільки в одному визначнику $n!$ доданків. Метод Крамера може застосовуватися для матриць 2×2 , або, щонайбільше, 3×3 .
- **Матричний метод (за допомогою оберненої матриці)** - певна теоретична абстракція всіх інших точних методів.
- **Метод квадратного кореня** — квадратичний метод, який вимагає симетричної матриці системи.
- **Метод прогонки** — зручний для розв'язку систем з три діагональною матрицею, які часто виникають в задачах математичної фізики.

В зв'язку з тим, що метод Гауса вивчався на другому курсі в дисципліні «Математичний аналіз», перераховані методи, окрім метод обертань (Гівенса) та метод відбиття (Хаусхолдера), виносяться на самостійне вивчення.

Для кращого опанування матеріалу, надаю посилання на джерела [1,3].

5.3. Порівняння прямих та ітераційних методів

Як правило, великі розріджені системи пов'язані з деякою різницевою сіткою. Нехай $1/m$ – величина кроку сітки. Тоді у тривимірному випадку типовою є стрічкова матриця із шириною стрічки $\approx m^2 = n^{\frac{2}{3}} \Rightarrow n = m^3$. Оцінювана кількість операцій із числами з плаваючою комою (флопів) при застосуванні методу Гауса в типовому випадку дорівнює $O(nm^4) \approx n^{\frac{2}{3}}$.

1. Для двовимірної ситуації ширина стрічки дорівнює $\approx n^{1/2}$, так що число флопів для прямого методу змінюється як n^2 . Якщо потрібно розв'язувати велику кількість систем з різними правими частинами, треба лише один раз привести матрицю до трикутного вигляду, отже кількість операцій при розв'язанні кожної системи змінюється як $n^{5/3}$ для тривимірної задачі та $n^{3/2}$ для 2-вимірної задачі.

2. Для симетричної позитивно визначеної системи зменшення похибки за одну ітерацію методу спряжених градієнтів приблизно дорівнює $\frac{\sqrt{k}-1}{\sqrt{k}+1}$, де $k = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$. При дискретизації диференціальних рівнянь в частинних похідних другого порядку на сітці з кроком $\frac{1}{m}$, як правило, $k \approx m^2$. Отже, для 3-вимірної

задачі ми отримуємо $k \approx n^{\frac{2}{3}}$, а для 2- вимірних задач: $k \approx n$. Для зменшення похибки до рівня ε необхідно, щоб:

$$\left(\frac{1 - \frac{1}{\sqrt{k}}}{1 + \frac{1}{\sqrt{k}}} \right)^j \approx \left(1 - \frac{2}{\sqrt{k}} \right)^j \approx e^{-\frac{2j}{\sqrt{k}}} < \varepsilon,$$

де j – номер ітерації.

Для тривимірної задачі:

$$j \approx -\frac{\ln \varepsilon}{2} \sqrt{k} \approx -\frac{\ln \varepsilon}{2} n^{\frac{1}{3}},$$

а для 2-вимірної задачі:

$$j \approx -\frac{\ln \varepsilon}{2} n^{\frac{1}{2}}.$$

Якщо ми припустимо, що кількість флопів на одну ітерацію приблизно дорівнює f_n (де f – кількість ненульових елементів в рядку матриці), то кількість флопів, яка потрібна для зменшення похибки до значення, меншого ε , дорівнює:

1) для тривимірної задачі:

$$f_\varepsilon \approx -f n^{\frac{4}{3}} \ln \varepsilon;$$

2) для двовимірної задачі:

$$f_\varepsilon \approx -f n^{\frac{2}{3}} \ln \varepsilon.$$

Отже, маємо висновок:

- якщо ми повинні розв'язувати одну систему, то при великому n , або маленькому f , або помірному ε ітераційні методи можуть бути більш привабливими;
- якщо ми маємо розв'язувати подібні системи із різними правими частинами і якщо ми припускаємо, що їх кількість настільки велика, що кількість операцій для декомпозиції A відносно мала, то для 2-вимірного випадку прямі методи можуть бути більш ефективними. В той же час, для 3-вимірного випадку це є сумнівним, оскільки кількість флопів для прямого розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь є величиною порядку $\approx n^{5/3}$, а для ітераційного розв'язання порядку $\approx n^{4/3}$.

Приклад.

Horst Simon оцінив час, який потрібен для розв'язання системи з $5 \cdot 10^9 \times$ невідомими найбільш ефективним і економічним прямим методом, відомим на даний час, як 520040 років при обчисленнях із швидкістю 1 TFLOP/сек.

З іншого боку, при використанні перед обумовленого методу спряжених градієнтів з тією ж швидкістю обчислень оцінюваний час дорівнює 575 сек.

Крім того, вимоги до розмірів пам'яті при використанні ітераційних методів, як правило, менше. Часто це є аргументом для використання ітераційних методів в 2- вимірних задачах, коли кількість флопів для обох класів методів є приблизно однаковими.

Зауваження

При відповідному перед обумовленні ми можемо отримати $\sqrt{k} \approx n^{\frac{1}{6}}$, і тоді кількість флопів може стати рівною $\sim n^{\frac{7}{6}} \ln \varepsilon$. Для спектральних задач найшвидшими можуть бути спеціальні методи, наприклад, багатосіткові. Вимоги до пам'яті роблять ітераційні методи більш привабливими.

Для матриць, які не є симетричними позитивно визначеними, ситуація може бути більш проблематичною: часто важко знайти відповідний і придатний ітераційний метод або перед обумовлення. Проте, проекційні методи, такі як GMRES, Bi-CG, CGS і Bi-CGSTAB часто мають кількість флопів, яка близька до CG.

Ітераційні методи можуть бути привабливими навіть для щільних матриць. Якщо матриця є симетричною, позитивно визначеною і число обумовленості дорівнює $n^{2-2\varepsilon}$, то кількість флопів на ітерацію дорівнює $\approx n^2$, а кількість ітераційних кроків $\approx n^{1-\varepsilon}$.

Отже, загальна кількість флопів грубо оцінюється як $n^{3-\varepsilon}$ і це є асимптотично менше, ніж в методі Холецького, де $f_\varepsilon \approx n^3$.

Контрольні питання і завдання

2. В чому принципова різниця між прямими та ітераційними методами розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь?
3. В чому полягає прямий та зворотний хід методу виключення Гауса?
4. Чому в прямому ході метода Гауса доцільно так переставити рівняння, щоб ведучий елемент мав найбільше значення?
5. Для рішення яких систем застосовується метод прогонки?
6. В чому відмінність ітераційного процесу метода Зейделя від аналогічного процесу методу Якобі?
7. Назвіть достатні умови збіжності ітераційних методів Якобі й Зейделя.
8. В чому сенс методу релаксації? Назвіть умову завершення ітераційного процесу?
9. Сформулюйте визначення норми вектору та запишіть співвідношення для її знаходження.
10. Дайте визначення норми матриці. Які вам відомі властивості норми матриці?
11. Яку матрицю називають позитивно визначеною?
12. Дайте визначення відносно числа обумовленості матриці. Яку систему рівнянь називають погано зумовленою?
13. Поясніть процедуру LU - розкладання (LU - факторизації) матриці?
14. Сформулюйте необхідні та достатні умови збіжності ітераційного процесу.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Андруник В.А., Висоцька В.А., Пасічник В.В., Чирун Л.Б., Чирун Л.В. Чисельні методи в комп'ютерних науках: навчальний посібник – Львів: Видавництво «Новий світ – 2000», 2017. – 472 с.
[Andrunik_P1_2017_470.pdf \(vntu.edu.ua\)](#)
2. Гончаров О.А. Чисельні методи розв'язання прикладних задач : навч. посіб. /О.А. Гончаров, Л.В. Васильєва, А.М. Юнда. – Суми: Сумський державний університет, 2020. – 142 с. ISBN 978-966-657-828-3
3. Фельдман Л.П., Петренко А.І., Чисельні методи в інформатиці, – Київ: Видавнича група BHV, 2006. – 480 с. ISBN 966 – 552 – 155 – 1
<https://do.ipu.kpi.ua/course/view.php?id=437>