Екзаменаційний білет № 19

I. Теоретична частина

1. Чисельне диференцювання.

2. Чисельне диференціювання

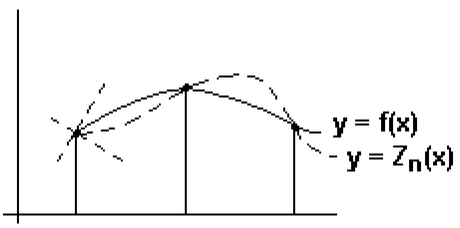
Часто виникає необхідність диференціювання функції наданих у вигляді таблиць (наприклад, для визначення швидкості, прискорення та інш.). Іноді таке диференціювання виявляється корисним при функціях з досить складною аналітичною формулою.

Інтерполяційні формули чисельного диференціювання ґрунтуються на заміні функції *f(x)* інтерполяційним багаточленом (ІБ) $Z_n(x)$:

$$f^{(k)}(x) = Z_n^{(k)}(x), \ k = 0, 1, 2, \dots, n \geq k \qquad (1)$$

Задаючись певними вузлами, а також фіксуючи ступень і вид багаточлена $Z_n(x)$, отримуємо з (1) наближену формулу для $f^k(x)$, а її похибка дорівнює $R_n^{(k)}(x)$, тобто *похибка k-ї похідної збігається з k-ю похідною залишкового члена інтерполяції.* Зазначимо, що з малості залишкового члена інтерполяції зовсім не витікає малість похибки його похідної.

Загалом кажучи, наближене диференціювання являє собою операцію менш точну, ніж інтерполяція. Близькості ординат кривих $y = f(x)$ і $y = Z_n(x)$ на відрізку [a;b] ще не гарантує близькості на цьому відрізку похідних $f`(x)$ і $Z_n`(x)$, тобто малої розбіжності кутових коефіцієнтів дотичних до цих кривих.



Розглянемо тепер, наприклад, наближену формулу для обчислення $f`(x)$ за значеннями функції у вузлах x_0, x_1, x_2 й оцінимо її похибку:

$$f(x) = f_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} +$$
$$+ \frac{f^{\text{III}}(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

Звідси:

$$f'(x_1) = Z_2'(x_1) = f_0 \frac{x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f_1 \frac{2x_1 - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + f_0 \frac{x_1 - x_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

Похибка цієї формули дорівнює

$$-\frac{f'''(\xi)}{6}(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)$$

Якщо функція задана для рівновіддалених вузлів формула спрощується:

$$f'(x_1) = \frac{f_2 - f_0}{2h},$$

а її похибка дорівнює

$$-\frac{f'''(\xi)}{3}h^2.$$

Більш зручними для практичного використання є формули, що використають кінцеві різниці. Візьмемо, наприклад, інтерполяційний поліном Ньютона:

$$y(x) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{t(t-1)(t-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \ldots \quad ,$$

де $t = \frac{x - x_0}{h}$; h = $x_{xi+1} - x_i$.

Перемножуючи поліноми, одержимо:

$$y(q) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q^2 - q}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{q^3 - 3q^2 + 2q}{6}\Delta^3 y_0 \ldots$$

Оскільки:

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

то

$$y'(x) = \frac{1}{h}(\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6}\Delta^3 y_0 ... \qquad (2)$$

Аналогічно, оскільки

$$y''(x) = \frac{d(y')}{dx} = \frac{d(y')}{dq} \cdot \frac{dq}{dx},$$

то

$$y''(x) = \frac{1}{h^2}(\Delta^2 y_0 + (q-1)\Delta^3 y_0 + ...$$

При цьому відзначимо, що оскільки похибка різниць швидко зростає з ростом їхнього порядку, то не має сенсу втримувати в цих формулах багато доданків.

2. Порівняльний аналіз методів розв'язку СЛАР.

2. Метод виключення Гауса.

Розглянемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР)

$$\left.\begin{array}{l} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 + a_{14}^{(0)}x_4 = a_{15}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)}x_1 + a_{22}^{(0)}x_2 + a_{23}^{(0)}x_3 + a_{24}^{(0)}x_4 = a_{25}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)}x_1 + a_{32}^{(0)}x_2 + a_{33}^{(0)}x_3 + a_{34}^{(0)}x_4 = a_{35}^{(0)} \\ a_{41}^{(0)}x_1 + a_{42}^{(0)}x_2 + a_{43}^{(0)}x_3 + a_{44}^{(0)}x_4 = a_{45}^{(0)} \end{array}\right\} \qquad (1)$$

При умові, що $a_{11} \neq 0$, то поділивши перше рівняння на a_{11}, отримаємо

$$x_1 + b_{12}^{(0)} x_2 + b_{13}^{(0)} x_3 + b_{14}^{(0)} x_4 = b_{15}, \qquad (2)$$

де $b_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{a_{11}}$ $(j > 1)$

Тепер змінна x_1 може бути виключена із системи. Для цього від 2-го рівняння вихідної системи віднімемо рівняння (2), помножене на a_{21}, від 3-го - рівняння (2), помножене на a_{31} й т.д. Тоді маємо

$$\left.\begin{aligned} a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 + a_{24}^{(1)} x_4 &= a_{25}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 + a_{34}^{(1)} x_4 &= a_{35}^{(1)} \\ a_{42}^{(1)} x_2 + a_{43}^{(1)} x_3 + a_{44}^{(1)} x_4 &= a_{45}^{(1)} \end{aligned}\right\}, \qquad (1')$$

де $a_{ij}^{(1)}$ $(i, j \geq 2)$ обчислюються як

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - a_{i1}^{(0)} \cdot b_{1j}^{(0)}$$

При умові, що $a_{22}^{(1)} \neq 0$, поділимо перше рівняння (1') на $a_{22}^{(1)}$ і отримаємо

$$x_2 + b_{23}^{(1)} x_3 + b_{24}^{(1)} x_4 = b_{25}^{(1)}, \qquad (2')$$

де $b_{2j}^{(1)} = \dfrac{a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{1}}$ $(j > 2)$

Виключимо тепер x_2 із системи (1')

$$\left.\begin{aligned} a_{33}^{(2)} x_3 + a_{34}^{(2)} x_4 &= a_{35}^{(2)} \\ a_{43}^{(2)} x_3 + a_{44}^{(2)} x_4 &= a_{45}^{(2)} \end{aligned}\right\}, \qquad (1'')$$

де

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)} b_{2j}^{(1)} \quad (i, j \geq 3)$$

При умові, що $a_{33}^{(2)} \neq 0$, поділимо перше рівняння (1’’) на $a_{33}^{(2)}$

$$x_3 + b_{34}^{(2)} x_4 = b_{35}^{(2)}, \qquad (2’’)$$

де

$$b_{3j}^{(2)} = a_{3j}^{(2)} / a_{33}^{(2)} \quad (j > 3)$$

Виключивши x_3 із (1’’) будемо мати:

$$a_{44}^{(3)} x_4 = a_{45}^{(3)},$$

де

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - a_{i3}^{(2)} b_{3j}^{(2)} \qquad (i, j \geq 4)$$

Тоді

$$x_4 = a_{44}^{(3)} / a_{45}^{(3)} \qquad (2’’’)$$

Отже, якщо *головні* елементи $a_{11}^{(0)}, a_{22}^{(1)}, a_{33}^{(2)}, a_{44}^{(3)}$ відмінні від нуля, вихідна система еквівалентна наступній системі із трикутною матрицею

$$
\begin{aligned}
&x_1 + b_{12}^{(0)} x_2 + b_{13}^{(0)} x_3 + b_{14}^{(0)} x_4 = b_{15}^{(0)} \\
&x_2 + b_{23}^{(1)} x_3 + b_{24}^{(1)} x_4 = b_{25}^{(1)} \\
&x_3 + b_{34}^{(2)} x_4 = b_{35}^{(2)} \\
&x_4 = b_{45}^{(2)}
\end{aligned}
,
$$

яка отримана об'єднанням рівнянь (2), (2'), (2'') і (2'''). З останнього рівняння системи отримуємо x_4 . Інші невідомі обчислюються послідовно з рівнянь (2''), (2') і (2) відповідно.

$$
\begin{aligned}
&x_3 = b_{35}^{(2)} - b_{34}^{(2)} x_4 \\
&x_2 = b_{25}^{(1)} - b_{24}^{(1)} x_4 - b_{23}^{(1)} x_3 \\
&x_1 = b_{15} - b_{14} x_4 - b_{13} x_3 - b_{12} x_2
\end{aligned}
$$

Необхідною і достатньою умовою застосовності методу є відмінність від нуля всіх головних елементів. Процес обчислення коефіцієнтів $b_{ij}^{(j-1)}$ системи з трикутною матрицею називається *прямим ходом*, обчислення значень невідомих – *зворотним ходом*.

Для прямого ходу потрібно виконати наступне число алгебраїчних множень

$$
n(n+1) + (n-1)n + \ldots + 1 \cdot 2 = (1^2 + 2^2 + \ldots + n^2) + (1 + 2 + \ldots + n) = \frac{n(n+1)(n+2)}{3}
$$

Для виконання зворотного ходу потрібно $n(n-1)/2$ алгебраїчних множень.

Тоді загальна кількість операцій алгебраїчного множення

$$
N = \frac{2n(n+1)(n+2)}{3} + n(n-1) < n^3
$$

Тобто загальна обчислювальна складність методу Гауса становить $O(n^3)$.

У загальному випадку маємо система порядку n

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{0} x_j = a_{i,n+1}^{(0)} ; \qquad i = 1,2,\ldots,n \qquad (3)$$

Якщо $a_{11}^{(0)} \neq 0$, а також всі головні елементи $a_{ii}^{(i-1)}$ i = 2, 3, ..., n інших рядків у процесі обчислень, відмінні від нуля, то система (3) може бути перетворена на систему з трикутною матрицею

$$x_i + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j = a_{i,n+1}^{(i)} \qquad i = 1,2,\ldots,n \qquad (3^*)$$

Головні елементи $a_{ii}^{(i-1)}$ і коефіцієнти системи (3*) обчислюються за формулами

$$a_{kj}^{(k)} = a_{kj}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)};$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} \cdot a_{kj}^{(k)},$$

де $k+1 \leq j \leq n+1$, $k+1 \leq i \leq n+1$; $k = 1,2,\ldots,n$

Зворотний хід виконується згідно з формулами

$$x_n = a_{n,n+1}^{(n)}$$

$$x_i = a_{i,n+1}^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Розглянутий варіант методу Гауса називається *схемою єдиного поділу* і має наступні недоліки. Якщо головний елемент деякого рядка дорівнює нулю, схема формально непридатна, притому, що система може мати єдиний розв’язок.

3. Схема з вибором головного елемента

Цього недоліку позбавлена *схема з вибором головного елемента*. Крім того, ця схема менш чутлива до помилок округлення.

Нехай є система

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= a_{1,n+1} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= a_{2,n+1} \\ &\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= a_{n,n+1} \end{aligned}\right\} \qquad (1)$$

Розглянемо розширену матрицю M з коефіцієнтів системи і вільних членів

$$M = \begin{vmatrix} a_{11}a_{12}\dots a_{1j}\dots a_{1q}\dots a_{1n}a_{1,n+1} \\ a_{21}a_{22}\dots a_{2j}\dots a_{2q}\dots a_{2n}a_{2,n+1} \\ \dots \\ a_{p1}a_{p2}\dots a_{pj}\dots a_{pq}\dots a_{pn}a_{p,n+1} \\ \dots \\ a_{n1}a_{n2}\dots a_{nj}\dots a_{nq}\dots a_{nn}a_{n,n+1} \end{vmatrix}$$

Виберемо ненульовий і найбільший за модулем коефіцієнт a_{pq}, що не належить до стовпчика вільних членів $(q \neq n+1)$ й обчислимо множники

$$m_i = -a_{iq} / a_{pq} \qquad i \neq p$$

Рядок з номером p матриці M називається головним рядком. Далі до кожного неголовного рядка додамо головний, помножений на m_i для цього рядка. У результаті отримаємо матрицю, у якої p-й стовпець складається з нулів. Відкидаючи цей стовпчик і головний рядок, одержимо матрицю $M^{(1)}$ з меншим на 1 числом рядків і стовпчиків. З матриці $M^{(1)}$ таким самим чином отримаємо $M^{(2)}$ й т.д.

$$M, M^{(1)}, M^{(2)}, \dots, M^{(n-1)},$$

де остання є двочленна матриця-рядок, її також вважаємо головним рядком. Для визначення невідомих x_i поєднуємо в систему всі головні рядки, починаючи з останньої

$M^{(n-1)}$.

Метод завжди знаходить розв’язок, якщо визначник системи

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11}...a_{n1} \\ ... \\ a_{n1}...a_{nn} \end{vmatrix} \neq 0 .$$

Далі невідомі обчислюються із трикутної матриці, так само, як у попередньому методі. Після належної зміни нумерації невідомих отримуємо розв’язок вихідної системи.

Метод Гауса може бути також використаний для обчислення зворотної матриці

Припустимо є неособлива матриця

$$A = \lfloor a_{ij} \rfloor \quad (i, j = 1,2,...,n)$$

Для знаходження її зворотної матриці

$$A^{-1} = [x_{ij}]$$

використаємо співвідношення $AA^{-1} = E$, де E - одинична матриця. Перемножуючи матриці A й A^{-1} одержимо n систем рівнянь щодо n^2 невідомих x_{ij}

$$\sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_{kj} = \delta_{ij} \quad (i, j = 1,2,...,n),$$

де $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, \text{при } i = j \\ 0, \text{при } i \neq 0 \end{cases}$

Отримані n систем лінійних рівнянь для $j = 1,2,...,n$, що мають одну й ту саму матрицю A і різні вільні члени, можна вирішити методом Гауса.

Нарешті, метод Гауса дозволяє обчислювати визначник матриці. Можна знаходити, що для матриці

$$A = \begin{bmatrix} a_{11}...a_{1n} \\ ... \\ a_{n1}...a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\det A = a_{11}^{(0)} \cdot a_{22}^{(1)} \cdot ... \cdot a_{nn}^{(n-1)},$$

тобто детермінант дорівнює добутку головних елементів схеми Гауса.

4. Метод простої ітерації

Маємо СЛАР:

$$\begin{aligned} &a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ &a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \qquad (4) \\ &\qquad ..... \; . \; . \; . \; . \\ &a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{aligned}$$

Уведемо позначення:

$$A = \begin{matrix} a_{11}\ a_{12} \ldots a_{1n} \\ a_{21}\ a_{22} \ldots a_{2n} \\ \ldots \\ a_{n1}a_{n2} \ldots a_{nn} \end{matrix}, \qquad X = \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{matrix}, \qquad B = \begin{matrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_n \end{matrix}$$

Тоді система (4) набуває вигляду

$$AX = B \qquad (4')$$

Якщо $a_{ij} \neq 0\ (i = 1, 2, \ldots n)$, надамо кожне з її рівнянь у вигляді

$$x_1 = \beta_1 + \alpha_{12}x_1 + \alpha_{13}x_2 + \ldots + \alpha_{1n}x_n$$
$$x_2 = \beta_2 + \alpha_{21}x_1 + \alpha_{23}x_2 + \ldots + \alpha_{2n}x_n \qquad (5)$$
$$\ldots\ldots$$
$$x_n = \beta_n + \alpha_{n1}x_1 + \alpha_{n2}x_2 + \ldots + \alpha_{n,n-1}x_{n-1},$$

де $\beta_i = b_i/a_{ii}$, $\alpha_{ij} = a_{ij}/a_{ii}$, *при* $i \neq j$

$\alpha_{ij} = 0$, *при* $i=j$; $i,j = 1,2, \ldots n$

Водячи матрицю α і вектор

$$\alpha = \begin{matrix} \alpha_{11}\ \alpha_{12}\ldots\ \ldots\alpha_{1n} \\ \alpha_{21}\alpha_{22}\ldots\ldots\alpha_{2n} \\ \ldots \\ \alpha_{n1}\alpha_{n2}\ldots\alpha_{nn} \end{matrix} \qquad \beta = \begin{matrix} \beta_1 \\ \beta_2, \\ \ldots \\ \beta_n \end{matrix}$$

Перепишемо (5) у матричній формі

$$X = \beta + \alpha X \qquad (5')$$

Приймемо за нульове наближення $X^{(0)} = \beta$ і будемо розв’язувати (5’) методом послідовних наближень:

$$X^{(1)} = \beta + \alpha X^{(0)}$$
$$X^{(2)} = \beta + \alpha X^{(1)} \qquad (6),$$
$$\ldots$$
$$X^{(k+1)} = \beta + \alpha X^{(k)}$$

k = 1, 0, ...

Якщо існує границя послідовності $X^{(1)}, X^{(2)}, \dots X^{(k)}, \dots$

$$x = \lim_{k\to\infty} X^{(k)},$$

то ця границя є точним розв'язком системи (6).

Отже,

$$x_i^{(0)} = \beta_i$$

$$\dots$$

$$x_i^{(k+1)} = \beta_i + \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij}\, x_{ij}^{(k)} \qquad (6')$$

$\alpha_{ii} = 0;\ i = 1, 2, \dots n;\ k = 0, 1, 2, \dots$

Збіжність процесу ітерації залежить лише від властивостей матриці α, тому $X^{(0)}$ може бути довільним. Отже, процес має властивість самокорегованності, тобто окрема помилка не відбивається на остаточному результаті.

Достатня умова збіжності визначається наступною теоремою:

Теорема 1.

Якщо для системи (5’) виконано щонайменше одну з умов:

1) $\sum_{j=1}^{n} |\alpha_{ij}| < 1\ (i = 1, 2, \dots n)$

або

2) $\sum_{i=1}^{n} |\alpha_{ij}| < 1\ \ (j = 1, 2, \dots n),$

те процес ітерації (6') сходиться до єдиного розв'язку цієї системи, незалежно від вибору початкового наближення.

Наслідок.

Для системи

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \quad i = 1, 2, \ldots n$$

метод простої ітерації збігається, якщо виконані нерівності

$$|a_{ij}| > \sum_{i \neq j}^{n} |a_{ij}| \quad i = 1, 2, \ldots n$$

тобто, якщо модулі коефіцієнтів діагональних елементів більше суми модулів елементів, що залишилися.

7. Метод ітерації Зейделя

Основна ідея методу полягає в тому, що при обчисленні *(k + 1)*-го наближення невідомого $x_i^{(k+1)}$ враховуються вже обчислені раніше *(k +1)*-ші наближення $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \ldots x_{i-1}^{(k+1)}$...

Вважаючи, що *k*-і наближення $x_i^{(k)}$ кореня відомі, будемо обчислювати *(k + 1)* наближення за формулами

$$x_1^{(k+1)} = \beta_1 + \sum_{j=1}^{n} \alpha_{1j} x_j^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} = \beta_1 + \alpha_{21} x_1^{(k+1)} + \sum_{j=2}^{n} \alpha_{2j} x_j^{(k)}$$

$$x_i^{(k+1)} = \beta_i + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^{n} \alpha_{ij} x_j^{(k)}$$

$$x_n^{(k+1)} = \beta_n + \sum^{n-1} \alpha_{nj} x_j^{(k+1)} + \alpha_{nn} x_n^{(k)}$$

$j=1$

$k = 0, 1, 2, \ldots n$

Теорема 2.

Якщо для лінійної системи

$$X = \alpha X + \beta \qquad (9)$$

виконано умову

$$\| \alpha \|_m > 1,$$

де $\|\alpha\|_m = \max_i \sum_{j=1}^{n} |\alpha_{ij}|, \qquad i = 1, 2, \ldots, n$

то процес ітерації для системи (9) збігається до єдиного її розв'язку, при будь-якому виборі початкового вектора $X^{(0)}$.

Наведена теорема про збіжність справедлива й для ітерації Зейделя. Як правило метод Зейделя дає кращу збіжність, ніж проста ітерація. Процес Зейделя може навіть збігатися, коли проста ітерація розбігається.

Оцінка точності отриманих наближень

$$\left\| x - x^{(k)} \right\|_m \le \frac{\mu^k}{1-\mu} \left\| x^{(1)} - x^{(0)} \right\|_m ,$$

де

$$\mu = \max_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} |\alpha_{ij}|}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} |\alpha_{ij}|} \le \|\alpha\|_m$$

Спробуємо оцінити обчислювальну складність ітераційних методів. Виконання однієї ітерації для системи з *n* невідомими, вочевидь, потребує n^2 операцій алгебраїчного множення. Отже, якщо для досягнення потрібної точності слід виконати не менш, ніж *к* ітерацій, загальна обчислювальна складність буде

$$O(\, n^2 к \,)$$

Згадаємо, що обчислювальна складність прямих методів складає

$$O(\, n^3 \,)$$

Таким чином, якщо $k < n$, обчислювальна складність ітераційних методів менша за складність прямих методів. На практиці порядок системи (*n*) зазвичай складає кілька сотень, або навіть, тисяч. У той же час для отримання досить високої точності розв'язку треба не більше кількох десятків ітерацій. Отже, у такому випадку ітераційні методи набагато більш економні в сенсі обчислювальної складності.

II. Практична частина

Побудувати таблицю інтегральної кривої звичайного диференціального рівняння

$$y' - 3y/x = x$$

з початковими умовами $y(1) = 1$ на проміжку $a = 1$, $b = 5$ з кроком $(b - a)/5$ і з точністю не гірше за 10^{-4}.