

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
“ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до лабораторних робіт
«Числові методи обробки результатів експерименту»
з дисципліни «Обчислювальна техніка і програмування»
для студентів спеціальності 6.090102 «Фізичне матеріалознавство»

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 1 від 20.01.05

Харків НТУ «ХПІ» 2005

Методичні вказівки до лабораторних робіт «Числові методи обробки результатів експерименту» з дисципліни «Обчислювальна техніка і програмування» для студентів спеціальності 6.090102 «Фізичне матеріалознавство»/ Укладачі А.В. Меріуц, В.І. Шкалето. Харків НТУ «ХПІ», 2005. – 36 с.

Укладачі: А.В. Меріуц,
В.І. Шкалето

Рецензент доц. Копач Г.І.

Кафедра Фізичного матеріалознавства для електроніки та
геліоенергетики

ВСТУП

Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни «Обчислювальна техніка і програмування» до розділу «Числові методи обробки результатів експерименту» містять три лабораторні роботи: «Числові методи розв'язання рівнянь з однією змінною», «Числове диференціювання та інтегрування», «Числові методи розв'язання систем лінійних алгебричних рівнянь».

Задачі, які розв'язуються за допомогою числових методів, запропонованих для вивчення, зустрічаються у різних галузях науки. Практично всі задачі з різних дисциплін: фізики, хімії, біології і т.д., – а також задачі оптимізації, які часто зустрічаються в технології, в кінцевому підсумку формуються як математичні задачі розв'язання різноманітних рівнянь або систем рівнянь. Можливість отримання аналітичних рішень реальних задач є скоріше винятком, ніж правилом. Тому володіння числовими методами їх розв'язання є важливою складовою підготовки сучасного інженера.

Кожна із запропонованих лабораторних робіт містить стислі теоретичні дані про відповідні числові методи та кінцеві формули і умови у вигляді нерівностей для розрахунків. Але методичні вказівки не призначені для їхнього окремого використання без спеціальної математичної літератури при вивченні методів.

Після вивчення теоретичної частини робіт та отримання індивідуального завдання, яке визначає викладач, необхідно скласти алгоритм або блок-схему, користуючись наведеними в тексті формулами. Після цього можна приступати до роботи безпосередньо на комп'ютері і виконувати завдання згідно з пунктом «Порядок виконання роботи». Звітом про виконання роботи є вихідний код з текстом програми та робочий файл з розширенням «.exe», після запуску якого можна виконати всі розрахунки, передбачені в лабораторній роботі.

Методичні вказівки призначені для студентів технічних спеціальностей.

ЧИСЛОВІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ З ОДНІЄЮ ЗМІННОЮ

Мета роботи – навчитися розробляти алгоритми та програми для реалізації числових методів розв'язання рівнянь з однією змінною.

1.1. Загальні теоретичні відомості

Як відомо, далеко не кожне рівняння можна розв'язати точно. У першу чергу це стосується більшості трансцендентних рівнянь, тобто рівнянь, в яких невідома величина x знаходиться під знаком трансцендентної функції. Доведено також, що не можна побудувати формулу, яка б давала рішення довільного алгебричного рівняння вище четвертого степеня.

Однак точне рішення рівняння не є безумовно необхідним. Задача пошуку коренів може вважатися практично вирішеною, якщо ми зможемо визначити корені з необхідним ступенем точності та вказати межі можливої похибки.

Більшість наближених методів чисельного розв'язання рівнянь по суті є методами уточнення коренів, тобто для їх використання необхідне знання приблизного значення кореня або настільки малого інтервалу $[a, b]$, що в ньому знаходиться тільки один корінь рівняння. Такий інтервал $[a, b]$ є інтервалом ізоляції кореня і на ньому функція $f(x)$ повинна задовольняти таким умовам:

1. Функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[a, b]$ разом зі своїми похідними першого та другого порядків.
2. Значення $f(x)$ на кінцях інтервалу $[a, b]$ мають різні знаки – $f(a)f(b) < 0$.
3. Перша та друга похідні $f'(x)$ і $f''(x)$ зберігають знак на всьому інтервалі.

Ці умови гарантують, що корінь рівняння $f(x)=0$ міститься в інтервалі $[a, b]$ й інших коренів на цьому відрізку немає.

Перш ніж перейти до опису методів, відзначимо, що можна збудувати досить стійку процедуру, яка дозволить знайти майже всі корені, якщо їх більше одного, на достатньо широкому, але все ж обмеженому інтервалі. Для цього, наприклад, можна спочатку ділити вихідний інтервал та обчислювати функцію $f(x)$ в проміжних точках, рахуючи кількість змін знака. Процес поділу інтервалу завершується, коли кількість змін знака функції стає постійною, після чого починається пошук коренів із заданою точністю на кожному з інтервалів, на кінцях яких отримано зміну знака функції в процесі поділу.

1.2. Принципи методів

1.2.1. Метод дихотомії. Цей метод найбільш стійкий та простий для програмування і полягає в наступному. Спочатку обчислюються значення функції $f(x)$ на кінцях відрізка $[a, b]$ та перевіряється виконання умови $f(a)f(b) < 0$. Наступним кроком знаходимо середину відрізка:

$$c = (a + b)/2$$

Обчислюючи значення функції в цій точці $f(c)$, перевіряємо виконання умов $f(a)f(c) < 0$ і $f(c)f(b) < 0$ та визначаємо ту половину відрізка $[a, b]$, на якій значення функції мають різні знаки. Цю половину відрізка, тобто $[a, c]$ або $[c, b]$, надалі приймаємо за новий відрізок $[a, b]$ та повторюємо всю процедуру знову, до тих пір, поки розміри відрізка не стануть меншими за потрібну точність.

Недоліком цього методу можна вважати достатньо велику кількість повторів, яка може знадобитися для отримання кореня з необхідною точністю при широкому інтервалі ізоляції. Скорочення кількості повторів можна досягти при використанні наступного методу.

1.2.2. Метод “золотого перерізу”. Цей метод можна вважати певною модифікацією методу дихотомії, оскільки він відрізняється тільки способом поділу інтервалу ізоляції. Інтервал ізоляції розбивають таким чином, щоб постійно виконувалися такі співвідношення:

$$\begin{aligned} |ab| &= |ac| + |cb| \text{ та} \\ |ab|/|ac| &= |ac|/|cb| = \tau - \text{ на непарному кроці,} \\ |ab|/|cb| &= |cb|/|ac| = \tau - \text{ на парному кроці.} \end{aligned} \quad (1.1)$$

Тобто на кожному кроці інтервал ізоляції розбивають на дві частини так, щоб відношення цілого до більшої частини було таким же, як відношення більшої частини до меншої.

З (1.1) маємо: $\tau^2 - \tau - 1 = 0$, звідки $\tau = (1 + 5^{1/2})/2 = 1,618033989$ – так званий “золотий переріз”, від якого іде назва методу. Використовуючи τ , наближене значення кореня, або координату точки x_c , можна записати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} x_c &= x_a + |ab|/\tau - \text{ на непарному кроці;} \\ x_c &= x_b - |ab|/\tau - \text{ на парному кроці.} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Визначення нового інтервалу ізоляції та кількості повторів проводиться так само, як і в попередньому методі.

1.2.3. Метод хорд. Ідея цього методу полягає в тому, що на достатньо малому відрізку $[a, b]$ можна використати лінійну апроксимацію функції $f(x)$.

У такому разі крива $y = f(x)$ на інтервалі $[a, b]$ може бути замінена хордою і як наближене значення кореня приймається точка, в якій хорда пересікає вісь абсцис.

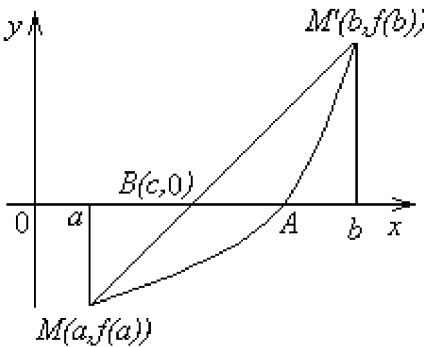


Рисунок 1.1 – Схема використання методу хорд

Для наглядного пояснення алгоритму методу звернемося до рисунка. Припустимо, що графік функції $y = f(x)$ на інтервалі $[a, b]$ має такий вигляд, як на рис. 1.1. Істинний корінь рівняння $f(x) = 0$ є абсцисою точки A . Замінюючи криву MM' хордою MM' , прийемо як наближене значення кореня абсцису точки B , в якій хорда пересікає вісь Ox . Запишемо рівняння прямої, яка проходить через точки $M(a, f(a))$ і $M'(b, f(b))$:

$$\frac{y - f(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{x - a}{b - a}. \quad (1.3)$$

Абсциса точки B , яка є наближеним коренем s рівняння $f(x) = 0$, може бути знайдена, якщо в (1.3) прийняти $y = 0$. Тоді маємо

$$c = a - \frac{(b - a)f(a)}{f(b) - f(a)}. \quad (1.4)$$

Отримане значення c можна знову використовувати для подальшого уточнення кореня, розглядаючи інтервал $[c, b]$ як новий інтервал ізоляції. Звичайно, вигляд функції, зображений на рис. 1.1, не є єдиним, і інтервалом ізоляції в інших випадках може виявитися інтервал $[a, c]$. Аналіз різних можливостей буде проведено далі.

1.2.4. Метод Ньютона (метод дотичних). Звернемося знову до рівняння $f(x) = 0$. Проведемо дотичну до функції $f(x)$ в точці $M'[b, f(b)]$ (рис.1.2). Рівняння дотичної має вигляд

$$y - f(b) = f'(b)(x - b). \quad (1.5)$$

Як наближений корінь рівняння $f(x) = 0$ приймаємо абсцису точки B , в якій дотична пересікає вісь Ox , тобто $y = 0$. Тоді абсцисою точки B є

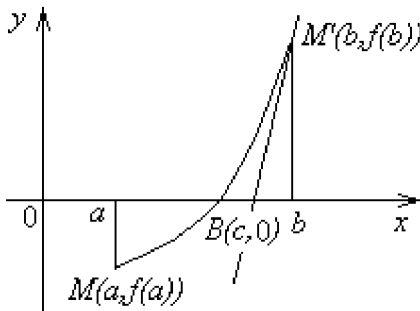


Рисунок 1.2 - Схема використання методу Ньютона

$$c = b - \frac{f(b)}{f'(b)}. \quad (1.6)$$

Розглядаючи інтервал $[a, c]$ як новий інтервал ізоляції, можна проводити подальше уточнення кореня.

Як початкова точка була обрана точка M' з абсцисою $x = b$. У цьому разі $f(b) > 0$ і $f'(b) > 0$, оскільки крива вгнута. Вибір стартової точки в методі Ньютона проводиться з огляду на те, в якій з

точок знак функції збігається зі знаком другої похідної, тобто повинна виконуватися умова $f(x)f''(x) > 0$. При виконанні цієї умови, як буде показано нижче, можна гарантувати, що наближене значення кореня завжди знаходиться в обраному інтервалі, у даному випадку – в інтервалі $[a, c]$.

У зв'язку з формулою (1.6) слід зупинитися на наступному. Може трапитися, що похідна $f'(x_0) = 0$ при значенні x рівному кореню рівняння або близькому до нього. При цьому часто буває зручно спочатку знайти корінь рівняння $f'(x_0) = 0$. Припустимо, що цим коренем є $x = x_0$. Якщо $f(x_0) = 0$, то $x = x_0$ є подвійним коренем рівняння $f(x) = 0$. Якщо ж $f(x_0) \neq 0$, то потрібно досліджувати знак добутку $f(x_0)f''(x_0)$. У випадку $f(x_0)f''(x_0) > 0$ і функція має позитивний мінімум $f(x_0) > 0$, $f''(x_0) > 0$, або негативний максимум $f(x_0) < 0$, $f''(x_0) < 0$, так, що рівняння $f(x) = 0$ не може мати коренів поблизу точки x_0 . Навпаки, якщо $f(x_0)f''(x_0) < 0$, то функція має негативний мінімум або позитивний максимум, і поблизу точки x_0 слід очікувати наявність двох коренів рівняння. Наближені значення цих коренів можна отримати за допомогою розкладення функції $f(x)$ в ряд Тейлора поблизу точки x_0 . Обмежившись двома членами розкладу, маємо:

$$x_{1,2} = x_0 \pm \sqrt{-\frac{2f(x_0)}{f''(x_0)}}.$$

Кожне з цих наближених значень можна уточнювати далі, розглядаючи інтервали $[x_1, x_0]$ і $[x_0, x_2]$, змістивши точку x_0 в потрібний бік, щоб $f'(x_0) \neq 0$.

1.2.5. Комбінований метод (метод хорд та дотичних). Розглянуті вище приклади показують, що спосіб хорд та спосіб дотичних дають наближення до кореня з різних боків (більше і менше істинного кореня). Такий характер наближення зберігається завжди, тому зазвичай буває вигідним одночасне використання обох цих методів, що дає можливість швидше отримувати значення кореня з необхідною точністю.

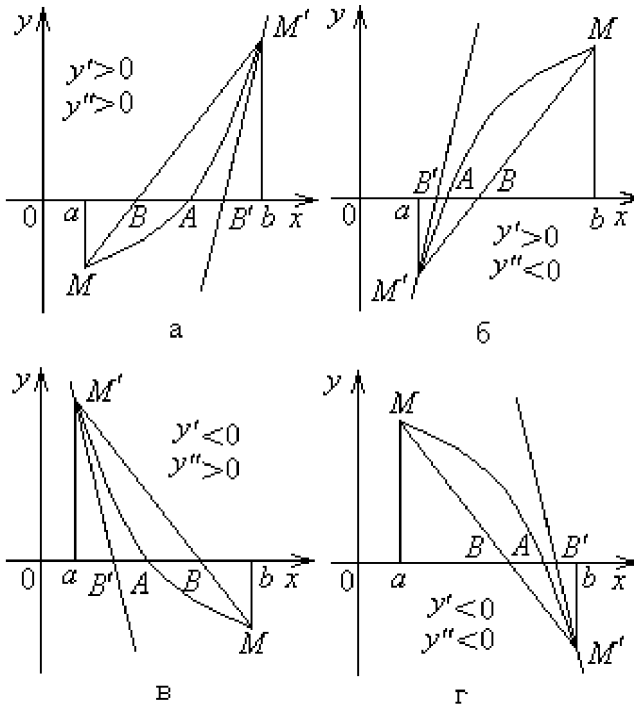


Рисунок 1.3 – Можливі випадки поведінки функції

– через x_2 . З рисунка 1.3, а видно, що у випадку, коли $y' > 0$ і $y'' > 0$, мають місце нерівності

$$a < x_1 < x_0 < x_2 < b.$$

Такі ж нерівності мають місце і для випадку $y' < 0$ і $y'' < 0$, рис. 1.3, г. Якщо ж $y' > 0$, а $y'' < 0$, рис. 1.3, б, або навпаки $y' < 0$, а $y'' > 0$, рис. 1.3, в, тоді маємо такі нерівності:

$$a < x_2 < x_0 < x_1 < b.$$

При цьому в усіх випадках дотична проводиться відповідно до п.1.2.4.

Обмеження, що накладаються на функцію $f(x)$ (див. розд.1.1) призводять до того, що можливі лише чотири різних випадки її поведінки на відрізку $[a, b]$, залежно від знаків похідних. Ці випадки зображені на рис. 1.3, де точка A – істинний корінь, що лежить між точками B і B' , які зображують наближені значення по способу хорд та способу дотичних відповідно. Призначимо абсцису точки A через x_0 , точки B – через x_1 і точки B'

Практичне застосування комбінованого методу починається з визначення знаків похідних. Визначивши знаки похідних, можна характеризувати розташування коренів в усіх чотирьох випадках за допомогою таблиці (табл. 1.1).

Таблиця 1.1 – Правила визначення розташування коренів

Знак добутку похідних	Метод хорд	Метод дотичних
$y'y'' > 0$	<i>з недостатчею</i>	<i>з надлишком</i>
$y'y'' < 0$	<i>з надлишком</i>	<i>з недостатчею</i>

Припустимо, наприклад, що $y'y'' > 0$. Тоді метод хорд дає значення кореня з недостатчею, і для його знаходження потрібно скористатися формулою (1.4), записаною у вигляді

$$a_1 = a + \Delta a, \text{ де } \Delta a = -\frac{(b-a)f(a)}{f(b)-f(a)}. \quad (1.7)$$

Для способу дотичних при $y'y'' > 0$ слід обирати $c = b$, при цьому формула (1.6) записується у вигляді

$$b_1 = b + \Delta b, \text{ де } \Delta b = -\frac{f(b)}{f'(b)}. \quad (1.8)$$

Оскільки метод дотичних, у даному випадку, дає значення кореня з надлишком, то істинний корінь знаходиться в інтервалі $[a_1, b_1]$. Тому можна продовжувати подальше уточнення кореня, отримуючи новий інтервал ізоляції за допомогою формул (1.7) і (1.8), в яких a і b змінюються на a_1 і b_1 , і так далі, доки не буде досягнуто потрібної точності.

Якщо ж $y'y'' < 0$, то хід рішення залишається тим же, з тією тільки різницею, що у формулах (1.7) і (1.8) a і b слід поміняти місцями.

Відзначимо, що зазвичай середнє арифметичне наближених коренів, отриманих способом хорд та способом дотичних, дає краще наближення, ніж кожен з коренів окремо.

1.2.6. Метод ітерацій. Для використання цього методу вихідне рівняння необхідно записати у вигляді

$$x = \varphi(x). \quad (1.9)$$

Якщо вже визначено інтервал ізоляції кореня, то як нульове наближення кореня можна взяти точку x_0 цього інтервалу. Для отримання наступного наближення x_1 в праву частину рівняння (1.9) замість x треба підставити x_0 , так, що

$$x_1 = \varphi(x_0).$$

Наступні наближення отримують за схемою: $x_2 = \varphi(x_1)$, $x_3 = \varphi(x_2)$, ..., $x_n = \varphi(x_{n-1})$...

Якщо послідовність $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ має границю $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \bar{x}$, то $\bar{x}$ є коренем рівняння (1.9), а значить і вихідного рівняння. Тому одне зі значень x_n з достатньо великим номером може бути прийнято за наближене значення кореня. Умови, при яких послідовність $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ має границю, визначає наступна теорема.

Теорема. Припустимо, що інтервал $[a, b]$ є інтервалом ізоляції кореня рівняння $x = \varphi(x)$ і в усіх точках цього інтервалу похідна $\varphi'(x)$ задовольняє нерівності

$$|\varphi'(x)| \leq M < 1. \quad (1.10)$$

Якщо при цьому виконується умова $a \leq \varphi(x) \leq b$, то ітераційний процес збігається, причому за нульове наближення x_0 можна обирати будь-яку точку інтервалу $[a, b]$.

Для приведення рівняння $f(x) = 0$ до вигляду $x = \varphi(x)$ так, щоб отримати ітераційний процес, що збігається, часто використовують такий спосіб: до рівняння $f(x) = 0$, яке рівноцінно рівнянню $\lambda f(x) = 0$; в лівій і правій частині додають x , отримуючи рівняння

$$\lambda f(x) + x = x, \quad (1.11)$$

в якому вже можна покласти $\lambda f(x) + x = \varphi(x)$, так що (1.11) має вигляд (1.9).

Параметр λ залишається вільним, і його можна підібрати таким чином, щоб $\varphi'(x) = \lambda f'(x) + 1$ було менше одиниці по абсолютній величині, тобто щоб було виконано умову (1.10), що гарантує збігання ітераційного процесу.

1.3. Порядок виконання роботи

1. Розробити алгоритм або блок-схему методу розв'язання рівняння згідно з варіантом індивідуального завдання.

2. Створити проєкт Standard.EXE, користуючись будь-яким з відомих пакетів, призначених для створення програм, наприклад: «Visual Basic», «BP», «C++».

3. Створити форму, яка повинна містити такі елементи: 1) Picture Box для виводу графіка функції, для якої проводиться пошук коренів; 2) текстові

вікна для вводу інтервалу пошуку та похибки, з якою необхідно отримати значення кореня; 3) текстові вікна для виводу результатів – значення кореня та кількість кроків, які знадобилися для його отримання.

4. За розробленим алгоритмом та блок-схемою створити модуль з процедурами для пошуку рішення рівняння.

5. Відлагодити програму та перевірити її роботу на контрольному прикладі.

6. Отримати рішення рівняння для різних величин похибки, кожного разу фіксуючи кількість кроків, які знадобилися для отримання рішення.

7. Побудувати та проаналізувати графік залежності кількості кроків від величини похибки.

1.4. Приклади індивідуальних завдань

1. Метод дихотомії. Рівняння: 1) $x - \sin(x) - 1 = 0$; $[0, \pi]$;
2) $2\operatorname{sh}(x) - \operatorname{ch}(x) = 0$, $[0, \pi]$; 3) $\ln(x) - \cos(x) = 0$, $[0,01, \pi]$.
2. Метод “золотого перерізу”. Рівняння: 1) $\cos(x) - \operatorname{th}(x) = 0$, $[0, \pi]$;
2) $1 - \exp(x) + 3\cos(x) = 0$, $[0, \pi]$; 3) $-\operatorname{tg}(x) + \operatorname{ch}(x) = 0$, $[0, \pi/2]$.
3. Метод хорд. Рівняння: 1) $x - \cos(x) = 0$, $[0, \pi]$;
2) $1 - \exp(x) + \cos(x) = 0$, $[0, \pi]$; 3) $x^2 - \operatorname{ch}(x) = 0$, $[0, 2]$.
4. Метод дотичних. Рівняння: 1) $x - \arccos(x) = 0$, $[0, 1]$; 2) $x - \operatorname{ctg}(x) = 0$, $[0,01, \pi/2]$; 3) $\exp(x) + \ln(x) = 0$, $[0,01, \pi]$; 4) $x - \cos^2(x) = 0$, $[0, \pi]$.
5. Комбінований метод хорд та дотичних. Рівняння: 1) $cx - \exp(-x) = 0$, $[0, 5\pi]$; $c > 2$; 2) $\exp(x) - \operatorname{tg}(x) = 0$, $[0, \pi/2]$; 3) $x^2 - \cos(x) = 0$, $[0, \pi]$;
4) $\operatorname{tg}(x) + \ln(x) = 0$, $[0,01, \pi/2]$.
6. Метод ітерацій. Рівняння: 1) $x + \ln(x) = 0$, $[0,001, 10]$;
2) $\operatorname{sh}(x) - \cos(x) = 0$, $[0, \pi]$; 3) $1 - \exp(-x) + \cos(x) = 0$, $[0, \pi]$.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА 2

ЧИСЛОВЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ТА ІНТЕГРУВАННЯ

Мета роботи – навчитися розробляти алгоритми та програми для реалізації числового диференціювання та інтегрування функцій, які задані за допомогою таблиць.

2.1. Числове диференціювання

З числовим диференціюванням та інтегруванням ми зустрічаємося на практиці, коли потрібно знайти похідну або інтеграл, маючи в своєму розпорядженні тільки табличні значення функції, наприклад, експериментальні дані.

Задача числового знаходження похідної та інтеграла функції, заданої за допомогою таблиці, тісно пов'язана з задачами інтерполювання й екстраполювання функцій.

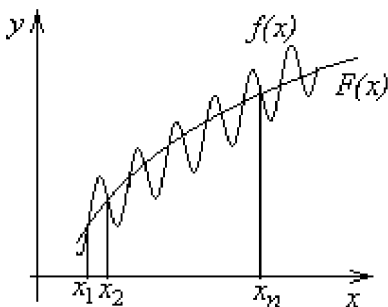


Рисунок 2.1 – Можлива поведінка функції та інтерполяційного багаточлена

Якщо інтерполяційний багаточлен на інтервалі, який розглядається, з достатньою точністю збігається з заданою функцією, а сама функція достатньо плавно змінюється на цьому інтервалі, то можна вважати, що похідна інтерполяційного багаточлена також буде мало відрізнятися від похідної функції. При цьому слід припустити, що відстань між вузлами інтерполяції достатньо мала, щоб функція не мала між ними екстремумів. У протилежному випадку може виявитися (рис. 2.1), що

різниця між значеннями функції $f(x)$ та інтерполяційного багаточлену $F(x)$ мала, тоді як їх похідні не мають між собою нічого спільного.

Побудова інтерполяційних багаточленів проводиться з використанням кінцевих різниць.

Кінцевими різницями функції $y = f(x)$ називають різниці виду:

$$\begin{aligned} \Delta y_i &= y_{i+1} - y_i && \text{— кінцеві різниці першого порядку,} \\ \Delta^2 y_i &= \Delta y_{i+1} - \Delta y_i && \text{— кінцеві різниці другого порядку,} \\ \Delta^k y_i &= \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i && \text{— кінцеві різниці } k\text{-го порядку.} \end{aligned}$$

Так, наприклад, перша та друга інтерполяційні формули Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції ($x_{i+1} - x_i = \Delta x_i = h = \text{const}$, $i = 0, 1, \dots, n$) мають вигляд

$$y(x) = P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0, \quad (2.1)$$

$$y(x) = P_n(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1)\dots(q+n-1)}{n!} \Delta^n y_0. \quad (2.2)$$

Число n бажано обирати таким чином, щоб різниці $\Delta^n y_i$ були практично незмінними.

Перша формула використовується для інтерполювання та екстраполювання в точках, близьких до початку таблиці, при цьому $q = (x - x_0)/h$, друга – в точках, близьких до кінця таблиці, при цьому $q = (x - x_n)/h$.

Таким чином, для знаходження похідної функції, яка плавно змінюється між вузлами інтерполяції, її слід замінити інтерполяційним багаточленом.

Оскільки в інтерполяційному багаточлені роль незалежної змінної відіграє змінна q , яка пов'язана з x співвідношенням $x = x_0 + qh$, то правила диференціювання при зміні функції $f(x)$ на функцію $F(x_0 + qh)$ дають

$$\frac{dF}{dq} = \frac{dP}{dx} \frac{dx}{dq}, \text{ або } \frac{dF}{dq} = f'(x) \frac{dx}{dq}. \quad (2.3)$$

З (2.3) витікає, що для знаходження похідної від функції, заданої за допомогою таблиці, необхідно продиференціювати інтерполяційний багаточлен, побудований для цієї функції, по q і поділити результат диференціювання на крок таблиці.

Для значень аргументу, які є в таблиці, знаходження похідних може бути виконано ще простіше. Їх можна знайти без використання інтерполяційних багаточленів, якщо виразити похідні безпосередньо за допомогою кінцевих різниць. Потрібні формули можна отримати, порівнюючи представлення функції за допомогою кінцевих різниць і степеневого ряду.

Так, наприклад, розташувавши члени ряду першої інтерполяційної формули Ньютона (2.1) по зростаючим степеням q , маємо:

$$\begin{aligned} y &= y_0 + \frac{q}{1} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \dots \right] + \\ &\frac{q^2}{2!} \left[\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \dots \right] + \frac{q^3}{3!} \left[\Delta^3 y_0 - \frac{3}{2} \Delta^4 y_0 + \dots \right] \\ &+ \frac{q^4}{4!} \left[\Delta^4 y_0 - \dots \right] + \dots \end{aligned}$$

Порівнюючи коефіцієнти при однакових степенях q в отриманій формулі з такими, що є в розкладанні в ряд Маклорена тієї ж функції

$$y = F(q) = F(0) + \frac{q}{1} F'(0) + \frac{q^2}{2!} F''(0) + \frac{q^3}{3!} F'''(0) + \dots,$$

отримуємо:

$$F'(0) = \Delta y_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 y_0 - \frac{1}{4} \Delta^4 y_0,$$

$$F''(0) = \Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \dots,$$

$$F'''(0) = \Delta^3 y_0 - \frac{3}{2} \Delta^4 y_0 + \dots,$$

$$F^{IV}(0) = \Delta^4 y_0 - \dots$$

Згідно з (2.3), маємо $f'(x) = y' = F'(q)/h$, аналогічно $y'' = F''(q)/h^2$ і т.д. Таким чином, якщо аргумент $x \in$ в таблиці, то призначаючи $x = x_0$, похідні в цій точці можна обчислити за формулами

$$y' = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 y_0 - \frac{1}{4} \Delta^4 y_0 + \dots \right],$$

$$y'' = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \dots \right],$$

$$y''' = \frac{1}{h^3} \left[\Delta^3 y_0 - \frac{3}{2} \Delta^4 y_0 + \dots \right],$$

$$y^{IV} = \frac{1}{h^4} \left[\Delta^4 y_0 - \dots \right]$$

Відзначимо, що більш точні результати можна отримати, якщо користуватися центральними різницями ($\Delta y_i = y_{i+1} - y_{i-1}$, ...).

2.1.1. Формули числового диференціювання:

а) засновані на першій інтерполяційній формулі Ньютона:

$$y'(x) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6} \Delta^3 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} \Delta^4 y_0 + + \frac{5q^4-40q^3+105q^2-100q+24}{120} \Delta^5 y_0 + \dots \right],$$

$$y''(x) \approx \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 y_0 + (q-1) \Delta^3 y_0 + \frac{6q^2-18q+11}{12} \Delta^4 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{2q^3-12q^2+21q-10}{12} \Delta^5 y_0 + \dots \right);$$

б) засновані на першій інтерполяційній формулі Гаусса:

$$y' \approx \frac{1}{h} \left(\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{3q^2-1}{3!} \Delta^3 y_{-1} + \frac{2q^3-3q^2-q+1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right),$$

$$y'' \approx \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 y_{-1} + q \Delta^3 y_{-1} + \frac{6q^2-6q+1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right);$$

в) засновані на другій інтерполяційній формулі Гаусса:

$$y' \approx \frac{1}{h} \left(\Delta y_{-1} + \frac{2q+1}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{3q^2-1}{3!} \Delta^3 y_{-2} + \frac{2q^3+3q^2-q-1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right),$$

$$y'' \approx \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 y_{-1} + q \Delta^3 y_{-2} + \frac{6q^2-6q+1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right);$$

г) засновані на першій інтерполяційній формулі Стірлінга:

$$y' \approx \frac{1}{h} \left(\frac{\Delta y_0 + \Delta y_{-1}}{2} + q \Delta^2 y_{-1} + \frac{3q^2-1}{3!} \frac{\Delta^3 y_{-1} + \Delta^3 y_{-2}}{2} + \frac{3q^2-q}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right)$$

$$y'' \approx \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 y_{-1} + q \frac{\Delta^3 y_{-1} + \Delta^3 y_{-2}}{2} + \frac{6q^2-1}{12} \Delta^4 y_{-2} + \dots \right);$$

д) засновані на першій інтерполяційній формулі Бесселя:

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

$$\left. + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} \Delta^4 y_0 + \frac{5q^4-40q^3+105q^2-100q+24}{120} \Delta^5 y_0 + \dots \right),$$

$$y''(x) \approx \frac{1}{h^2} \left(\frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_0}{2} + \frac{2q-1}{2} \Delta^3 y_{-1} + \frac{6q^2-6q-1}{12} \frac{\Delta^4 y_{-1} + \Delta^4 y_{-2}}{2} + \dots \right).$$

2.2. Числове інтегрування

Якщо замінити підінтегральну функцію якимсь з інтерполяційних багаточленів, можна отримати квадратурні формули виду

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) + R, \quad (2.4)$$

де x_k – обрані вузли інтерполяції; A_k – коефіцієнти, що залежать тільки від вибору вузлів; R – залишковий член, або похибка квадратурної формули, який зазвичай може бути представлений у вигляді $R = Bh^{n+1}f^{(n+1)}(\xi)$, де точка ξ належить інтервалу $[a, b]$, $f^{(n+1)}(\xi)$ – $n+1$ похідна в цій точці, а B – коефіцієнт, який залежить від виду обраного інтерполяційного багаточлена. Відкидаючи залишковий член R , ми робимо похибку зрізання. При розрахунках до неї ще додаються похибки заокруглення.

Розбиваючи відрізок інтегрування $[a, b]$ на n рівних частин системою точок $x_i = x_0 + ih$ ($i=0, 1, \dots, n$), $x_0 = a$, $x_n = b$, $h = (b - a)/n$ і розраховуючи підінтегральну функцію в отриманих вузлах $y_i = f(x_i)$ ($i=0, 1, \dots, n$), згідно з формулою (2.4) можна обчислити наближене значення інтеграла.

Квадратурні формули для рівновіддалених вузлів називають формулами Ньютона – Кортеса. Ці формули розрізняють за степенями інтерполяційних багаточленів, що використовуються для їх побудови. Щоб не мати справи з багаточленами високих степенів, зазвичай розбивають інтервал інтегрування на менші частки, для яких використовують формули Ньютона – Кортеса з низькими степенями, а після складають отримані результати (що дає так звані складові формули).

Важливою задачею при інтегуванні є вибір кроку h , що забезпечив би задану точність ε для обраної формули числового інтегрування. Розглянемо два способи її розв'язання.

2.2.1. Вибір кроку інтегрування: а) *По залишковому члену.* Нехай потрібно обчислити інтеграл з точністю ε . Використовуючи формулу для залишкового члена R , обирають h таким чином, щоб була виконана нерівність $|R| < \varepsilon/2$. Причому для розрахунків використовують максимальне значення відповідної похідної на інтервалі $[a, b]$. Після цього обчислюють інтеграл за наближеною формулою з визначеним кроком. Причому розрахунки слід проводити з такою кількістю знаків, щоб похибка заокруглення не перевищувала $\varepsilon/2$.

Слід відзначити, що бувають випадки, коли допустиму похибку ε ділять не порівну між похибкою зрізання і похибкою заокруглення. Наприклад, якщо обчислення значень підінтегральної функції потребують багато труда, але можуть бути проведені з будь-якою точністю, то може

виявитися доцільним обирати крок h з умови $|R| < \varepsilon$. Інший крайній випадок може бути для експериментально визначених функцій, коли складно забезпечити велику точність значень функції.

б) *Подвійний перерахунок*. Оскільки пошук $\max|f^{(k)}(x)|$ часто призводить до вельми громіздких обчислень, на практиці зазвичай використовують такий захід.

Обчислюють інтеграл I за обраною квадратурною формулою двічі: спочатку з деяким кроком h , а потім з кроком $h/2$, тобто подвоюють кількість вузлів n . Позначивши результати розрахунків через I_n і I_{2n} відповідно, порівнюють їх. Якщо $|I_n - I_{2n}| < \varepsilon$, де ε – допустима похибка, то приймають, що $I \approx I_{2n}$, і розрахунки припиняють. Якщо ж виявляється, що $|I_n - I_{2n}| \geq \varepsilon$, то розрахунки повторюють з кроком $h/4$. (Як початковий крок іноді можна рекомендувати число, близьке до $\varepsilon^{1/m}$, де $m = 2$ для формули трапецій і $m = 4$ для формули Сімпсона.)

Вказаний спосіб обрання кроку широко використовується, оскільки дозволяє здійснити автоматичний вибір кроку при заданій точності з одночасним контролем розрахунків.

2.2.2. Найпростіші квадратурні формули інтегрування:

а) формула трапецій:

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

де $y_i = f(x_i)$ ($i=0, 1, \dots, n$), а залишковий член має вигляд

$$R_1 = -\frac{nh^3}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi), \quad a < \xi < b.$$

Формула трапецій дає точне значення інтеграла, коли підінтегральна функція $f(x)$ лінійна або коли $f''(x) \equiv 0$;

б) формула Сімпсона (формула парабол):

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} [y_0 + y_{2m} + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2m-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2m-1})],$$

де $h = (b-a)/n = (b-a)/2m$, а залишковий член має вигляд

$$R_2 = -\frac{nh^5}{90} f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{90} f^{IV}(\xi), \quad a < \xi < b.$$

Формула Сімпсона буде точною для багаточленів до третього ступеня включно, оскільки в, цьому випадку $f^{(4)}(x) \equiv 0$. Слід також відзначити, що у формулі Сімпсона кількість вузлів обов'язково повинна бути парною $n = 2m$; в) формула Ньютона (правило трьох восьмих):

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8} \left[y_0 + y_{3m} + 2(y_3 + y_6 + \dots + y_{3m-3}) + 3(y_1 + y_2 + y_4 + y_5 + \dots + y_{3m-2} + y_{3m-1}) \right],$$

де $h = (b - a)/n = (b - a)/3m$, а залишковий член має вигляд

$$R_3 = -\frac{3mh^5}{80} f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{80} f^{IV}(\xi), \quad a < \xi < b.$$

У цій формулі кількість вузлів обов'язково повинна дорівнювати $3m+1$, тобто $n = 3m$.

Якщо функція $y = f(x)$ задана за допомогою таблиці, то в припущенні її гладкості на інтервалах інтегрування можна користуватися наближеними формулами для похибок, які представляють через кінцеві різниці

$$R_1 \approx -\frac{b-a}{12} \overline{\Delta^2 y}, \quad R_2 \approx -\frac{b-a}{180} \overline{\Delta^4 y}, \quad R_3 \approx -\frac{b-a}{80} \overline{\Delta^4 y},$$

де під $\overline{\Delta^2 y}$, $\overline{\Delta^4 y}$ слід розуміти арифметичні середні значення кінцевих різностей відповідного порядку.

2.3. Порядок виконання роботи

1. Розробити алгоритм та блок-схему методу згідно з варіантом індивідуального завдання.

2. Відкрити проект, який був створений на попередній лабораторній роботі.

3. Модифікувати форму, створивши меню, яке дозволить обирати виконання розрахунків по першій або по другій лабораторній роботі. Одночасно провести уніфікацію текстових вікон для вводу вихідних даних і виводу результатів розрахунків. Додати нові вікна, якщо потрібно.

4. За розробленим алгоритмом створити новий модуль в проєкті з процедурами створення таблиці значень функції та процедурами для пошуку похідної й інтеграла.

5. Відлагодити програму та перевірити її роботу на контрольному прикладі.

6. Отримати похідну та інтеграл для різних величин похибки для функції, згідно з варіантом.

2.4. Приклади індивідуальних завдань

1. Обчислити інтеграл за допомогою формули трапецій на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою кінцевих різниць в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = -\operatorname{tg}(x) + \operatorname{ch}(x)$, інтервал $[0, \pi/2]$, першу похідну в точці $d = 1$;

2) $f(x) = x^2 - \cos(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = \pi$;

3) $f(x) = x - \operatorname{ctg}(x)$, інтервал $[0,01, \pi/2]$, першу похідну в точці $d = 0,8$;

4) $f(x) = x - \cos(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = 1$.

2. Обчислити інтеграл за допомогою формули Ньютона на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою формули Бесселя в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = \operatorname{tg}(x) + \ln(x)$, інтервал $[0,01, \pi/2]$, другу похідну в точці $d = 1,1$;

2) $f(x) = x - 1/\operatorname{ch}(x)$, інтервал $[0, \pi]$, першу похідну в точці $d = 1$;

3) $f(x) = 1 - \exp(x) + \cos(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = 1,5$.

3. Обчислити інтеграл за допомогою формули Сімпсона на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою першої формули Стірлінга в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = \exp(x) + \ln(x)$, інтервал $[0,01, \pi]$, першу похідну в точці $d = 1$;

2) $f(x) = x^2 - \operatorname{ch}(x)$, інтервал $[0, 2]$, другу похідну в точці $d = 0,7$;

3) $f(x) = x - \sin(x) - 1$, інтервал $[0, \pi]$, першу похідну в точці $d = 1$.

4. Обчислити інтеграл за допомогою формули трапецій на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою другої формули Гауса в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = x - \cos^2(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = 1,5$;

2) $f(x) = 2\operatorname{sh}(x) - \operatorname{ch}(x)$, інтервал $[0, \pi]$, першу похідну в точці $d = 1$;

3) $f(x) = x + \ln(x)$, інтервал $[0,001, 10]$, першу похідну в точці $d = 5,3$.

5. Обчислити інтеграл за допомогою формули Сімпсона на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою першої формули Ньютона в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = 1 - \exp(-x) + \cos(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = 1,1$;

2) $f(x) = x - \arccos(x)$, інтервал $[0, 1]$, другу похідну в точці $d = 0,5$;

3) $f(x) = \exp(x) - \operatorname{tg}(x)$, інтервал $[0, \pi/2]$, першу похідну в точці $d = 1,1$.

6. Обчислити інтеграл за допомогою формули Ньютона на заданому інтервалі $[a, b]$ з точністю $\varepsilon = 0,0001$ та похідну за допомогою першої формули Гауса в заданій точці d для таких функцій:

1) $f(x) = cx - \exp(-x)$; $c > 2$, інтервал $[0, 5\pi]$, першу похідну в точці $d = 3$;

2) $f(x) = \operatorname{sh}(x) - \cos(x)$, інтервал $[0, \pi]$, другу похідну в точці $d = 1,3$;

3) $f(x) = \ln(x) - \cos(x)$, інтервал $[0,01, \pi]$, першу похідну в точці $d = 2$.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА 3

ЧИСЛОВІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРИЧНИХ РІВНЯНЬ

Мета роботи – навчитися розробляти алгоритм і програму для числового розв'язання систем лінійних рівнянь, обчислення детермінантів і обернених матриць.

3.1. Загальні теоретичні відомості

Одним із джерел задач, що приводять до розв'язання систем лінійних рівнянь (СЛАУ), є задачі згладжування результатів вимірювань. Оскільки експериментально отримані значення будь-якої фізичної величини завжди містять випадкові похибки, то неможливо очікувати, що інтерполяційні функції типу (2.1), (2.2) вирішують задачу пошуку найбільш простої функції, яка найкращим чином описує експериментальну залежність між деякими фізичними величинами. Більше того, бажано провести по вимірних точках таку криву, щоб деяка задана міра для відхилень виявилася мінімальною.

Остання задача є основною задачею вирівнювання (згладжування) результатів вимірювань та виводу емпіричних формул.

Найбільш розповсюджений метод вирівнювання був розроблений Гаусом і носить назву *метод найменших квадратів*.

Нехай задана множина пар дійсних чисел (x_i, y_i) , $(i=1 \dots N)$ і треба знайти таку функцію $f(x, a_1, \dots, a_n)$, $(a_i$ – вільні параметри $(n < N)$), щоб критерій вирівнювання

$$\rho_{\min}(f(x_i) - y_i) = \sum_{i=1}^N (f(x_i) - y_i)^2,$$

який є мірою відхилень (похибок) $e_i = f(x_i) - y_i$, приймав найменше значення. Якщо похибки підпорядковуються нормальному розподілу, то цей критерій може розглядатися як статистичний.

У простому випадку, коли параметри a_i входять до f лінійно, тобто $f(x, a_1, \dots, a_n) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \dots + a_n f_n(x)$, маємо:

$$\frac{\partial \rho}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=1}^N \left(\sum_{k=1}^n a_k f_k(x_i) - y_i \right) f_j(x_i).$$

Необхідними умовами екстремуму ρ є рівності

$$\sum_{k=1}^n a_k \sum_{i=1}^N f_k(x_i) f_j(x_i) = \sum_{i=1}^N y_i f_j(x_i), \quad (j=1, \dots, n).$$

Якщо ввести позначення $\sum_{i=1}^N f(x_i) = [f(x)]$, то ці *нормальні рівняння*,

що являють собою систему лінійних алгебричних рівнянь, можна записати більш компактно:

$$\sum_{k=1}^n a_k [f_k(x) f_j(x)] = [y f_j(x)], \quad (j=1, \dots, n).$$

У частинному випадку $f_k(x) = x^{k-1}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) маємо згладжуючий багаточлен і нормальні рівняння приймають вигляд

$$\sum_{k=1}^n a_k [x^{k+j-2}] = [y x^{j-1}] \quad (j=1, \dots, n)$$

На практиці намагаються використовувати мінімальну, наскільки це можливо, кількість параметрів. Для цього спочатку візуально перевіряють, чи лежать точки вимірювань, наприклад, біля константи, прямої, параболи і т.д., і відповідно до цього роблять те чи інше припущення.

Наведемо для прикладу вигляд системи нормальних рівнянь, яка виходить при параболічному вирівнюванні: $y = ax^2 + bx + c$.

У цьому випадку характеристична величина $\frac{\Delta(\Delta y_i / \Delta x_i)}{x_{i+2} - x_i} = \text{const}$,

тобто другі розділені різниці мають бути постійними. Тоді нормальні рівняння мають вигляд

$$\begin{cases} cN + b[x] + a[x^2] = [y] \\ c[x] + b[x^2] + a[x^3] = [xy] \\ c[x^2] + b[x^3] + a[x^4] = [x^2y] \end{cases}.$$

Розглянемо методи розв'язання СЛАУ.

3.2. Методи розв'язання систем лінійних алгебричних рівнянь

Методи розв'язання (СЛАУ) можна розбити на дві групи: точні і наближені.

Точними методами називаються такі методи, які в припущенні, що розрахунки проводяться точно (без заокруглень), приводять до точних значень невідомих x_i . Оскільки насправді всі розрахунки проводяться з заокругленнями, то і значення невідомих, отримані точним методом, обов'язково будуть містити похибки. До точних методів належать, наприклад, метод Гауса, метод квадратних коренів.

Наближеними методами називаються такі методи, які навіть в припущенні, що розрахунки проводяться без заокруглень, дозволяють отримати рішення системи $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ тільки з заданою точністю. Точне рішення системи в таких випадках може бути отримано теоретично як результат нескінченного процесу. До наближених методів належать, наприклад, метод простої ітерації, метод Зейделя. Кожен з цих методів не завжди збігається при застосуванні до конкретного класу систем лінійних рівнянь.

3.2.1. Метод Гауса. Найбільш поширеним методом розв'язання систем алгебричних лінійних рівнянь є метод Гауса, в основі якого лежить ідея послідовного виключення невідомих. Існують різні обчислювальні схеми, які реалізують цей метод. Розглянемо одну з них – *схему єдиного ділення*.

Розглянемо цю схему на прикладі системи з чотирьох рівнянь з чотирма невідомими:

$$\left. \begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 &= a_{15} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 &= a_{25} \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 &= a_{35} \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 &= a_{45} \end{aligned} \right\}. \quad (3.1)$$

Нехай $a_{11} \neq 0$ (провідний елемент). Розділивши перше рівняння системи (3.1) на a_{11} , маємо:

$$x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 + b_{14}x_4 = b_{15}, \quad (3.2)$$

де $b_{1j} = a_{1j} / a_{11}$, ($j = 2, 3, 4, 5$).

Користуючись рівнянням (3.2), можна виключити невідоме x_1 з другого, третього і четвертого рівнянь системи (3.1). Для цього слід помножити рівняння (3.2) на a_{21} , a_{31} і a_{41} та відняти результати відповідно з другого, третього і четвертого рівнянь системи.

У результаті отримаємо систему трьох рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 + a_{24}^{(1)} x_4 &= a_{25}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 + a_{34}^{(1)} x_4 &= a_{35}^{(1)} \\ a_{42}^{(1)} x_2 + a_{43}^{(1)} x_3 + a_{44}^{(1)} x_4 &= a_{45}^{(1)} \end{aligned} \right\}, \quad (3.3)$$

де коефіцієнти $a_{ij}^{(1)}$ обчислюються за формулою

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1} b_{1j} \quad (i=2,3,4; j=2,3,4,5). \quad (3.4)$$

Далі перше рівняння системи (3.3) ділимо на $a_{22}^{(1)}$, отримуємо

$$x_2 + b_{23}^{(1)} x_3 + b_{24}^{(1)} x_4 = b_{25}^{(1)}, \quad (3.5)$$

де $b_{2j}^{(1)} = a_{2j}^{(1)} / a_{22}^{(1)}$, ($j = 3, 4, 5$).

Виключаючи тепер x_2 так само, як виключали x_1 , отримаємо систему рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} a_{33}^{(2)} x_3 + a_{34}^{(2)} x_4 &= a_{35}^{(2)} \\ a_{43}^{(2)} x_3 + a_{44}^{(2)} x_4 &= a_{45}^{(2)} \end{aligned} \right\}, \quad (3.6)$$

де

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)} b_{2j}^{(1)} \quad (i = 3, 4; j = 3, 4, 5). \quad (3.7)$$

Зробивши ту ж процедуру ще двічі, ми зведемо систему (3.1) в кінцевому рахунку до еквівалентної системи з трикутною матрицею:

$$\left. \begin{aligned} x_1 + b_{12} x_2 + b_{13} x_3 + b_{14} x_4 &= b_{15} \\ x_2 + b_{23}^{(1)} x_3 + b_{24}^{(1)} x_4 &= b_{25}^{(1)} \\ x_3 + b_{34}^{(2)} x_4 &= b_{35}^{(2)} \\ a_{44}^{(3)} x_4 &= a_{45}^{(3)} \end{aligned} \right\}. \quad (3.8)$$

Звідси послідовно знаходимо

$$\left. \begin{aligned} x_4 &= a_{45}^{(3)} / a_{44}^{(3)} \\ x_3 &= b_{35}^{(2)} - b_{34}^{(2)} x_4 \\ x_2 &= b_{25}^{(1)} - b_{24}^{(1)} x_4 - b_{23}^{(1)} x_3 \\ x_1 &= b_{15} - b_{14} x_4 - b_{13} x_3 - b_{12} x_2 \end{aligned} \right\}. \quad (3.9)$$

Таким чином, розв'язання системи розпадається на два етапи:
прямий хід – зведення системи (3.1) до трикутного вигляду (3.8);
обернений хід – визначення невідомих за формулами (3.9).

Розглянутий метод можна використовувати при умові, що всі «провідні елементи» не дорівнюють нулю. Якщо ж якийсь з них обертається на нуль, то у відповідній системі достатньо провести перестановку рівнянь з тим, щоб зробити «провідний елемент» відмінним від нуля (зрозуміло, в припущенні, що матриця **A** невласна).

3.2.2. Схема Гауса з вибором головного елемента. Сенс вибору головного елемента полягає в тому, щоб зробити меншими числа m_i і тим самим зменшити похибку закруглень. Тому при реалізації методу Гауса на ЕОМ зазвичай використовують саме цю схему.

Розглянемо лінійну систему рівнянь

$$\left. \begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= a_{1,n+1} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= a_{2,n+1} \\ \dots &\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= a_{n,n+1} \end{aligned} \right\}. \quad (3.10)$$

Розширена прямокутна матриця коефіцієнтів цієї системи

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{1q} & a_{1n} & a_{1,n+1} \\ a_{p1} & a_{pq} & a_{pn} & a_{p,n+1} \\ a_{n1} & a_{nq} & a_{nn} & a_{n,n+1} \end{pmatrix}.$$

Серед елементів матриці a_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$) оберемо найбільший по модулю – *головний елемент*. Нехай ним буде, наприклад, елемент a_{pq} . Рядок з номером p , який містить головний елемент, називається *головним рядком*. Далі обчислюємо множники $m_i = a_{iq}/a_{pq}$ для всіх $i \neq p$.

Після цього перетворюємо матрицю таким чином: з кожного i -го неголовного рядка віднімаємо почленно головний рядок, помножений на m_i . У результаті отримуємо матрицю, у якій всі елементи q -го стовпця, за винятком a_{pq} дорівнюють нулю. Відкидаючи цей стовпець і головний рядок, отримуємо нову матрицю $\mathbf{M}_1$ з меншою на одиницю кількістю рядків і стовпців.

Над матрицею $\mathbf{M}_1$ повторюємо ті ж операції, після чого отримуємо матрицю $\mathbf{M}_2$ і т. д. Такі перетворення продовжуємо до тих пір, поки не отримаємо матрицю, яка містить один рядок з двох елементів, який вважаємо також головним. Далі об'єднуємо всі головні рядки, починаючи з останнього. Після деякої перестановки вони утворюють трикутну матрицю, еквівалентну вихідній матриці. На цьому закінчується етап обчислень по *прямому ходу*. Потім, на *оберненому ході*, розв'язуємо систему з трикутною матрицею коефіцієнтів, послідовно визначаємо невідомі x_i ($i = 1, 2, \dots, n$).

Відзначимо, що вибір головного елемента може виявитися достатньо трудомісткою задачею, якщо кількість рівнянь системи велика. Тому практично як головний рядок обирають перший, а як головний елемент – найбільший по модулю елемент цього рядка.

Якщо потрібно обчислити детермінант матриці $\mathbf{A}$, то можна скористатися тим, що він дорівнює добутку «провідних» (або головних) елементів у відповідній схемі Гауса:

$$\Delta = \det \mathbf{A} = a_{11}a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{(n-1)}. \quad (3.11)$$

Таким чином, для обчислення детермінанта $\det \mathbf{A}$ необхідно провести обчислення по прямому ходу в методі Гауса для системи $\mathbf{A}\mathbf{x} = 0$ і знайти добуток «провідних» елементів. Обчислювальна схема в цьому випадку така ж, як і для розв'язання системи лінійних рівнянь, тільки без стовпця вільних членів.

3.2.3. Обчислення елементів оберненої матриці методом Гауса.
Оберненою до матриці $\mathbf{A}$ називають таку матрицю $\mathbf{A}^{-1}$, для якої $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{E}$, де $\mathbf{E}$ – одинична матриця:

$$\mathbf{E} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hdashline & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Квадратна матриця $\mathbf{A}$ називається *невласною* або *невиродженою*, якщо її детермінант $\det \mathbf{A}$ відмінний від нуля. Будь-яка невласна матриця має обернену матрицю.

Нехай дана невласна матриця

$$\mathbf{A} = (a_{ij}) = \left(\begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{2n} \\ \hdashline & & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{nn} \end{array} \right).$$

Для обчислення елементів оберненої матриці

$$\mathbf{A}^{-1} = \left(\begin{array}{cc|c} x_{11} & x_{12} & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & x_{2n} \\ \hdashline x_{n1} & x_{n2} & x_{nn} \end{array} \right)$$

використовуємо співвідношення $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{E}$.

Помножуючи матрицю $\mathbf{A}$ на $\mathbf{A}^{-1}$ і дорівнюючи кожний елемент добутку відповідному елементу матриці $\mathbf{E}$, отримаємо систему з n^2 рівнянь з n^2 невідомими x_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$).

Так, помножуючи почленно кожний рядок матриці $\mathbf{A}$ на перший стовпець матриці $\mathbf{A}^{-1}$ і кожен раз дорівнюючи отриманий добуток відповідному елементу першого стовпця матриці $\mathbf{E}$, отримуємо систему

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_{11} + a_{12}x_{21} + \dots + a_{1n}x_{n1} = 1 \\ a_{21}x_{11} + a_{22}x_{21} + \dots + a_{2n}x_{n1} = 0 \\ \hdashline a_{n1}x_{11} + a_{n2}x_{21} + \dots + a_{nn}x_{n1} = 0 \end{array} \right\}.$$

Аналогічно при почленному множенні рядків матриці $\mathbf{A}$ на другий стовпець матриці $\mathbf{A}^{-1}$ утворюється ще одна система

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_{12} + a_{12}x_{22} + \dots + a_{1n}x_{n2} = 0 \\ a_{21}x_{12} + a_{22}x_{22} + \dots + a_{2n}x_{n2} = 1 \\ \hdashline a_{n1}x_{12} + a_{n2}x_{22} + \dots + a_{nn}x_{n2} = 0 \end{array} \right\}$$

і т. д.

Таким чином, система з n^2 рівнянь з n^2 невідомими розпадається на n систем рівнянь з n невідомими. Всі ці системи мають одну й ту ж матрицю $\mathbf{A}$ і відрізняються тільки вільними членами. Оскільки при розв'язанні системи методом Гауса основні обчислення припадають на матрицю, коефіцієнти, рішення всіх цих систем можна об'єднати в одній схемі, розглядаючи одночасно n стовпців вільних членів.

3.2.4. Схема Галецького. Розглянемо систему лінійних рівнянь, записану в матричному вигляді: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, де $\mathbf{A} = (a_{ij})$ – квадратна матриця ($i, j = 1, 2, \dots, n$) і $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$, $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ або для розширеної матриці $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_{1,n+1} \\ \vdots \\ a_{n,n+1} \end{pmatrix}$ – вектори-стовпці.

Представимо матрицю $\mathbf{A}$ у вигляді добутку $\mathbf{A} = \mathbf{BC}$, де

$$\mathbf{B} = \left(\begin{array}{ccc|c} b_{11} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 \\ \hdashline b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & b_{nn} \end{array} \right), \quad \mathbf{C} = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & c_{12} & c_{1n} \\ 0 & 1 & c_{2n} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array} \right).$$

Тоді елементи b_{ij} і c_{ij} будуть визначатися за формулами

$$\left. \begin{aligned} b_{i1} &= a_{i1} \\ b_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} c_{kj} \quad (i \geq j > 1) \end{aligned} \right\} i \quad \left. \begin{aligned} c_{1j} &= \frac{a_{1j}}{b_{11}} \\ c_{ij} &= \frac{1}{b_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} c_{kj} \right) \quad (1 < i < j) \end{aligned} \right\}. \quad (3.12)$$

Таким чином, невідомий вектор $\mathbf{x}$ може бути обчислений з ряду рівнянь

$$\mathbf{B}\mathbf{y} = \mathbf{b}, \mathbf{C}\mathbf{x} = \mathbf{y}. \quad (3.13)$$

Оскільки матриці $\mathbf{B}$ і $\mathbf{C}$ трикутні, то системи (3.12) розв'язуються легко, а саме:

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= a_{1,n+1} / b_{11} \\ y_i &= \left(a_{i,n+1} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} y_k \right) / b_{ii} \quad (i > 1) \end{aligned} \right\} i \quad \left. \begin{aligned} x_n &= y_n \\ x_i &= y_i - \sum_{k=i+1}^n c_{ik} x_k \quad (i < n) \end{aligned} \right\}. \quad (3.14)$$

З формул (3.14) видно, що числа y_i вигідно обчислювати разом з коефіцієнтами c_{ij} . Ця схема обчислень називається *схемою Гаусового*.

3.2.5. Метод квадратних коренів. Метод квадратних коренів використовується для розв'язання лінійної системи

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (3.15)$$

у якій матриця $\mathbf{A}$ симетрична, тобто $a_{ij} = a_{ji}$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$).

Цей метод є більш економним і зручним порівняно з методами розв'язання систем загального вигляду, які були розглянуті вище.

Розв'язання системи здійснюється у два етапи.

Прямий хід. Представимо матрицю $\mathbf{A}$ у вигляді добутку двох взаємно транспонованих трикутних матриць:

$$\mathbf{A} = \mathbf{T}'\mathbf{T}, \quad (3.16)$$

$$\text{де } \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1n} \\ 0 & t_{22} & \dots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & t_{nn} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}' = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & \dots & 0 \\ t_{12} & t_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1n} & t_{2n} & \dots & t_{nn} \end{pmatrix}.$$

Перемножуючи матриці $\mathbf{T}'$ і $\mathbf{T}$ і дорівнюючи матриці $\mathbf{A}$, отримаємо такі формули для визначення елементів t_{ij} :

$$t_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad t_{1j} = \frac{a_{1j}}{t_{11}} \quad (j > 1), \quad t_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki}^2} \quad (1 < i \leq n),$$

$$t_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} t_{kj}}{t_{ii}} \quad (i < j), \quad t_{ij} = 0 \quad \text{при } i > j. \quad (3.17)$$

Після того, як матриця **T** знайдена, систему (3.16) заміняємо двома еквівалентними їй системами з трикутними матрицями:

$$\mathbf{T}'\mathbf{y} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{T}\mathbf{x} = \mathbf{y}. \quad (3.18)$$

Обернений хід. Запишемо в розгорнутому вигляді системи (3.18):

$$\left. \begin{array}{l} t_{11}y_1 = b_1 \\ t_{12}y_1 + t_{22}y_2 = b_2 \\ \dots \\ t_{1n}y_1 + t_{2n}y_2 + \dots + t_{nn}y_n = b_n \end{array} \right\}, \quad \left. \begin{array}{l} t_{11}x_1 + t_{12}x_2 + \dots + t_{1n}x_n = y_1 \\ \dots \\ t_{22}x_2 + \dots + t_{2n}x_n = y_2 \\ \dots \\ t_{nn}x_n = y_n \end{array} \right\}, \quad (3.19)$$

звідси послідовно знаходимо

$$y_1 = \frac{b_1}{t_{11}}, \quad y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} y_k}{t_{ii}} \quad (i > 1), \quad (3.20)$$

$$x_n = \frac{y_n}{t_{nn}}, \quad x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^n t_{ik} x_k}{t_{ii}} \quad (i < n). \quad (3.21)$$

Відзначимо, що при дійсних a_{ij} , t_i можуть виявитися чисто уявними. Метод може бути використаний і в цьому випадку.

Якщо потрібно обчислити детермінант симетричної матриці **A**, то для цього також можна скористатися методом квадратних коренів, з якого витікає, що

$$\det \mathbf{A} = \det \mathbf{T} \det \mathbf{T}' = (\det \mathbf{T})^2 = (t_{11} t_{22} \dots t_{nn})^2, \quad (3.22)$$

числа t_{ij} ($i = 1, 2, \dots, n$) знаходимо за формулами (3.17).

3.2.6. Метод простої ітерації розв'язання СЛАУ. Нехай система лінійних рівнянь $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ якимось чином приведена до вигляду

$$\mathbf{x} = \mathbf{Cx} + \mathbf{f}, \quad (3.23)$$

де $\mathbf{C}$ – деяка матриця, а $\mathbf{f}$ – вектор-стовпець.

Виходячи з довільного вектора $\mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \dots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$, будуємо ітераційний процес

$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{f}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$), або в розгорнутій формі

$$\left. \begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= c_{11}x_1^{(k)} + c_{12}x_2^{(k)} + \dots + c_{1n}x_n^{(k)} + f_1 \\ x_n^{(k+1)} &= c_{n1}x_1^{(k)} + c_{n2}x_2^{(k)} + \dots + c_{nn}x_n^{(k)} + f_n \end{aligned} \right\}. \quad (3.24)$$

Проводячи ітерації, отримуємо послідовність векторів $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}, \dots$

Доказано, що в разі виконання однієї з умов накладених на елементи матриці $\mathbf{C}$:

$$\text{а) } \sum_{j=1}^n |c_{ij}| \leq \alpha < 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \text{ або б) } \sum_{i=1}^n |c_{ij}| \leq \beta < 1 \quad (j = 1, 2, \dots, n), \quad (3.25)$$

процес ітерації збігається до точного рішення системи $\mathbf{x}$ при будь-якому початковому векторі $\mathbf{x}^{(0)}$, тобто $\mathbf{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)}$.

Таким чином, точне рішення системи виходить лише в результаті нескінченного процесу, і будь-який вектор $\mathbf{x}^{(k)}$ з отриманої послідовності є наближеним рішенням. Оцінка похибки цього наближеного рішення $\mathbf{x}^{(k)}$ дається однією з таких формул:

$$\left| x_i - x_i^{(k)} \right| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \max_{j=1, 2, \dots, n} \left| x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)} \right|, \quad (3.26)$$

якщо виконана умова (3.25, а), або

$$\left| x_i - x_i^{(k)} \right| \leq \frac{\beta}{1 - \beta} \sum_{j=1}^n \left| x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)} \right|, \quad (3.27)$$

якщо виконана умова (3.25, б).

Процес ітерацій закінчується, коли вказані оцінки свідчать про досягнення заданої точності.

Початковий вектор $\mathbf{x}^{(0)}$ може бути обраним, взагалі кажучи, довільно. Іноді беруть $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{f}$. Однак найбільш доцільно як компонент вектора $\mathbf{x}^{(0)}$ обрати наближені значення невідомих, отримані грубою оцінкою.

Приведення системи до вигляду (3.23) можна здійснити різними способами, важливо тільки, щоб виконувалася одна з умов (3.25). Можна скористатися, наприклад, таким способом.

Якщо діагональні елементи матриці $\mathbf{A}$ відмінні від нуля, тобто $a_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), то систему можна записати у вигляді

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - \dots - a_{1n}x_n) \\ x_2 &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n) \\ &\dots\dots\dots \\ x_n &= \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1 - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}) \end{aligned} \right\}. \quad (3.28)$$

У такому разі елементи матриці $\mathbf{C}$ визначають так:
 $c_{ij} = -a_{ij}/a_{ii} \quad (i \neq j), \quad c_{ii} = 0$ і тоді умови (3.25) відповідно приймають вигляд

$$\text{a) } \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq \alpha < 1, (i = 1, 2, \dots, n), \text{ б) } \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq \beta < 1, (j = 1, 2, \dots, n). \quad (3.29)$$

Нерівності (3.29) будуть виконані, якщо діагональні елементи матриці **A** задовольняють умові

$$|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}| \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.30)$$

тобто якщо модулі діагональних коефіцієнтів для кожного рівняння системи більше суми модулів усіх останніх коефіцієнтів (не враховуючи вільних членів).

Взагалі, для будь-якої системи з невивродженою матрицею існують ітераційні методи рішення, що збігаються, але далеко не завжди вони зручні для практичних розрахунків.

Якщо метод ітерацій збігається, він дає наступні переваги порівняно з методами, розглянутими вище.

Якщо ітерації збігаються достатньо швидко, тобто якщо для розв'язання системи потрібно менше n ітерацій, то отримуємо вигравш в часі, оскільки кількість арифметичних операцій, необхідних для однієї ітерації, пропорційна n , а загальна кількість арифметичних операцій, наприклад, в методі Гауса, пропорційна n^2 .

Похибки закруглення в методі ітерацій даються взнаки значно менше, ніж в методі Гауса. Крім того, метод ітерацій може самостійно виправлятися, тобто окрема помилка, допущена в розрахунках, не відбивається на заключному результаті, оскільки помилкове наближення можна розглядати як новий початковий вектор. Остання обставина часто використовується для уточнення значень невідомих, отриманих методом Гауса.

Метод ітерацій стає особливо вигідним при розв'язанні систем, у яких значна кількість коефіцієнтів дорівнює нулю. Такі системи з'являються, наприклад, при розв'язанні рівнянь в частинних похідних.

Процес ітерацій приводить до виконання одноманітних операцій і порівняно легко програмується на ЕОМ.

3.2.7. Метод Зейделя є модифікацією методу простої ітерації. Він полягає в тому, що при обчисленні $(k+1)$ -го наближення невідомого x_i при $i > 1$ використовується вже обчислене раніше $(k+1)$ -ше наближення невідомих $x_1, x_2, \dots, x_{i-1}$. Таким чином, для системи (3.23) обчислення методом Зейделя проводять за формулами

$$\left. \begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= c_{11}x_1^{(k)} + c_{12}x_2^{(k)} + \dots + c_{1n}x_n^{(k)} + f_1 \\ x_2^{(k+1)} &= c_{21}x_1^{(k+1)} + c_{22}x_2^{(k)} + \dots + c_{2n}x_n^{(k)} + f_2 \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} &= c_{n1}x_1^{(k+1)} + c_{n2}x_2^{(k+1)} + \dots + c_{nn}x_n^{(k)} + f_n \end{aligned} \right\}. \quad (3.31)$$

Вказані умови збіжності для методу простої ітерації залишаються справедливими і для методу Зейделя. Зазвичай метод Зейделя дає кращу збіжність, ніж метод простої ітерації, хоча це буває не завжди. Крім того, метод Зейделя може виявитися більш зручним при програмуванні, оскільки при обчисленні $x_i^{(k+1)}$ немає необхідності зберігати значення $x_1^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$.

3.2.8. Уточнення елементів оберненої матриці методом ітерації. Нехай для невласної матриці $\mathbf{A}$ отримано наближені значення елементів оберненої матриці $\mathbf{A}^{-1}$. Позначимо матрицю з такими елементами через $\mathbf{D}_0 \approx \mathbf{A}^{-1}$; для уточнення елементів оберненої матриці будемо такий ітераційний процес:

$$\mathbf{F}_{k-1} = \mathbf{E} - \mathbf{A}\mathbf{D}_{k-1} \quad (k=1,2,\dots), \quad (3.32)$$

$$\mathbf{D}_k = \mathbf{D}_{k-1}(\mathbf{E} + \mathbf{F}_{k-1}) \quad (k = 1, 2, \dots). \quad (3.33)$$

Доказано, що ітерації збігаються, якщо початкова матриця $\mathbf{D}_0$ достатньо близька до матриці $\mathbf{A}^{-1}$.

Матриця $\mathbf{F}_{k-1}$ на кожному кроці характеризує в деякому сенсі ступінь близькості матриці $\mathbf{D}_{k-1}$ до матриці $\mathbf{A}^{-1}$.

Зазвичай ітерації продовжують до тих пір, поки елементи матриці F_k по модулю не стануть менше заданого числа ε , і тоді наближено кладуть $A^{-1} \approx D_k$.

Вказаний ітераційний процес виявляється вельми корисним, оскільки точні методи обчислення оберненої матриці часто приводять до помітних похибок, обумовлених неминучими похибками заокруглення і великою кількістю арифметичних операцій при розрахунках.

3.3. Порядок виконання роботи

1. Розробити алгоритм та блок-схему методу розв'язання СЛАУ згідно з варіантом індивідуального завдання.

2. Створити проект Standard.EXE, користуючись будь-яким з відомих пакетів, призначених для створення програм, наприклад: «Visual Basic», «BP», «C++».

3. Створити форму, яка повинна містити текстові вікна для вводу елементів матриці і виводу результатів розрахунків та інші елементи для забезпечення зручності роботи з програмою.

4. За розробленим алгоритмом та блок-схемою створити модуль з процедурами для обчислень згідно з завданням.

5. Відлагодити програму за допомогою контрольного прикладу, для чого скористатися довільною матрицею коефіцієнтів і довільними значеннями невідомих, для яких обчислити стовпець вільних членів системи. Після цього ввести матрицю та отриманий стовпець вільних членів у створену програму та обчислити з її допомогою невідомі. Якщо вони збігаються з тими, що були задані при розрахунках стовпця вільних членів, то програма працює правильно. (В разі використання ітераційних методів, точність повинна бути 0,01% по кожній змінній.)

6. Виконати розрахунки згідно з варіантом завдання.

3.4. Приклади індивідуальних завдань

Розв'язати СЛАУ з коефіцієнтами з табл. 3.1 згідно з варіантом, обчислити детермінант і знайти обернену матрицю.

У першому рядку таблиці вказані номери варіанта. Варіанти 1, 7, 11 – використовують метод Зейделя; 3, 8, 17 – метод простої ітерації; 2, 9, 18 – метод квадратних коренів; 4, 10, 16 – схему Галєцького; 5, 12, 15 – схему Гауса з вибором головного елемента; 6, 13, 14 – метод Гауса.

Обчислення детермінанта матриці проводити розкладанням по першому рядку з використанням алгебричних доповнень, якщо для розв'язання СЛАУ не використовується метод Гауса або квадратних коренів. Пошук оберненої матриці проводити тим методом, яким проводиться розв'язання СЛАУ.

Таблиця 3.1 – Матричні коефіцієнти для систем рівнянь

Коефіцієнти СЛАУ	Номер варіанту								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
a_{11}	0,13	1,0	2,0	0,11	0,17	0,2	0,18	0,11	1,32
a_{12}	0,22	0,55	-0,17	1,13	-0,13	0,05	0,11	-0,17	-0,84
a_{13}	-0,14	0,13	0,11	-0,17	-0,11	-0,31	0,13	0,72	-0,44
a_{14}	0,15	0,34	-0,15	0,18	-0,12	-0,11	-0,22	-0,34	0,62
b_1	1,0	0,13	0,17	1,0	0,22	0,21	0,22	0,17	0,68
a_{21}	0,22	0,55	0,14	0,13	1,0	0,1	0,33	-0,17	0,83
a_{22}	-0,31	-0,17	0,21	-1,17	-1,0	-0,2	-0,22	0,12	0,42
a_{23}	3,32	0,33	-0,33	0,18	-0,13	0,32	-0,1	-0,91	-0,56
a_{24}	-0,1	-0,12	0,11	0,14	0,13	0,05	0,17	0,17	0,77
b_2	2,01	0,11	1,0	0,13	0,11	0,18	0,11	1,0	1,24
a_{31}	0,32	0,13	0,22	0,11	0,35	0,17	-0,1	0,72	0,58
a_{32}	-0,14	0,33	3,44	-1,05	0,33	0,39	0,11	-0,91	-0,37
a_{33}	0,25	-0,22	-0,11	-0,17	0,12	-0,2	0,2	1,0	1,24
a_{34}	-0,26	-0,11	0,12	-0,18	0,13	-0,17	-0,45	0,99	-0,62
b_3	0,11	1,0	2,0	0,11	0,12	0,17	1,0	0,21	0,87
a_{41}	0,12	0,34	0,11	0,15	0,13	0,33	0,3	-0,34	0,35
a_{42}	0,13	-0,12	0,13	-0,05	0,11	-0,07	-0,13	3,17	0,66
a_{43}	0,14	-0,11	0,12	0,18	-0,13	0,33	-4,22	-0,99	-1,38
a_{44}	0,45	0,22	0,14	-0,11	-0,11	0,2	0,33	0,35	-0,93
b_4	0,16	0,18	0,13	1,0	1,0	0,17	0,21	2,71	-1,08

Продовження таблиці 3.1

Коефіцієнти СЛАУ	Номер варіанту								
	10	11	12	13	14	15	16	17	18
a_{11}	0,73	2,42	0,164	0,209	1,15	3,01	-1	0,17	4,51
a_{12}	1,24	0,32	0,172	-0,19	0,62	-0,14	0,13	0,75	0,17
a_{13}	-0,38	-0,42	-0,28	0,249	-0,83	1	-2	-0,18	3,75
a_{14}	-1,43	0,85	0,42	-0,38	0,92	-0,15	-0,14	0,21	-0,28
b_1	0,58	1,32	2,23	0,46	2,15	1	0,15	0,11	0,75
a_{21}	1,07	0,63	0,158	0,25	0,62	-1,75	0,75	0,75	4,52
a_{22}	-0,77	-0,43	-0,28	0,211	-0,54	1,11	0,18	0,13	2,11
a_{23}	1,25	1,27	0,343	-0,26	1,15	0,13	-0,21	5,11	-0,11
a_{24}	0,66	-0,58	-0,06	0,244	-0,81	-0,75	-0,77	1	-0,12
b_2	-0,66	-0,44	1,71	1,5	0,62	0,13	0,11	2	1,11
a_{31}	1,56	0,84	0,386	0,286	-0,83	0,17	0,28	-0,33	-2,11
a_{32}	0,66	-2,23	0,177	-0,14	1,15	-2,11	-0,17	0,11	3,17
a_{33}	1,44	-0,52	-0,08	0,262	-0,33	0,71	0,39	3,01	0,12
a_{34}	-0,87	0,47	0,288	0,208	1,27	-1,71	0,48	-2,01	-0,15
b_3	1,24	0,64	-0,54	-0,12	-0,62	1	0,12	0,11	0,21
a_{41}	0,75	0,27	0,272	0,248	0,92	0,21	1	0,11	3,17
a_{42}	1,22	1,37	-0,15	0,205	-0,81	0,21	3,14	1,12	1,81
a_{43}	-0,83	0,64	-0,37	-0,26	1,27	0,35	-0,21	1,11	-3,17
a_{44}	0,37	-1,27	0,192	-0,21	-0,67	0,35	-1	-1,13	0,22
b_4	0,92	0,85	0,65	0,35	0,88	0,17	-0,11	0,13	0,05

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Волков Е.А. Численные методы. – М.: Наука, 1982.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Наука, 1987.
3. Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырский П.И. Начала вычислительных методов. Линейная алгебра и нелинейные уравнения. – Минск: Наука и техника, 1982.
4. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс. – М.: Радио и связь, 1988.

ВСТУП.....	3
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА 1. Числові методи розв’язання рівнянь з однією змінною.....	4
1.1. Загальні теоретичні відомості.....	4
1.2. Принципи числових методів розв’язання рівнянь з однією змінною.....	5
1.2.1. Метод дихотомії.....	5
1.2.2. Метод “золотого перерізу”.....	5
1.2.3. Метод хорд.....	5
1.2.4. Метод Ньютона (метод дотичних).....	6
1.2.5. Комбінований метод.....	8
1.2.6. Метод ітерацій.....	9
1.3. Порядок виконання роботи.....	10
1.4. Приклади індивідуальних завдань.....	11
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА 2. Числове диференціювання та інтегрування.....	11
2.1. Числове диференціювання.....	11
2.1.1. Формули числового диференціювання.....	14
2.2. Числове інтегрування.....	16
2.2.1. Вибір кроку інтегрування.....	16
2.2.2. Найпростіші квадратурні формули інтегрування.....	17
2.3. Порядок виконання роботи.....	18
2.4. Приклади індивідуальних завдань.....	19
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА 3. Числові методи розв’язання систем лінійних алгебричних рівнянь.....	20
3.1. Загальні теоретичні відомості.....	20
3.2. Методи розв’язання систем лінійних алгебричних рівнянь.....	22
3.2.1. Метод Гауса.....	22
3.2.2. Схема Гауса з вибором головного елемента.....	24
3.2.3. Обчислення елементів оберненої матриці методом Гауса.....	25
3.2.4. Схема Галекського.....	26
3.2.5. Метод квадратних коренів.....	27
3.2.6. Метод простої ітерації розв’язання СЛАУ.....	28
3.2.7. Метод Зейделя.....	31
3.2.8. Уточнення елементів оберненої матриці методом ітерації.....	31
3.3. Порядок виконання роботи.....	32
3.4. Приклади індивідуальних завдань.....	32
Список літератури.....	34

Навчальне видання

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до лабораторних робіт
«Числові методи обробки результатів експерименту»
з дисципліни «Обчислювальна техніка і програмування»
для студентів спеціальності 6.090102 «Фізичне матеріалознавство»

Укладачі: МЕРІУЦ Андрій Володимирович
ШКАЛЕТО Володимир Іванович

Відповідальний за випуск Б.Т. Бойко

Роботу до видання рекомендував А.Ф. Сук

Редактор О.Ю. Цигіпова

План 2005 р., поз. 15 / ____.

Підписано до друку ____, Формат 60×84 1/16. Папір друк. №2.
Друк – ризографія. Гарнітура Times New Roman. Ум. друк. арк. 1,8
Обл.-вид. 2,2. Тираж 50 прим. Зам. № ____, Ціна договірна.

Видавничий центр НТУ “ХПІ”. 61002, Харків, вул. Фрунзе, 21.
Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 116 від 10.07.2000 р.

Друкарня НТУ “ХПІ”. 61002, Харків, вул. Фрунзе, 21.