Державний вищій навчальний заклад
“Запорізький національний університет”
Міністерства освіти і науки України

МЕТОДИ ОБЧИСЛЕНЬ

Модуль 1

Конспект лекцій

Запоріжжя

ВСТУП

Обчислювальна техніка й математичні методи розв'язання задач дозволяють замінити дорогі й трудомісткі натурні експерименти більш точними, швидкими й дешевими обчислювальними експериментами на математичних моделях із застосуванням ЕОМ. В основі обчислювального експерименту лежать розв'язки рівнянь математичної моделі обчислювальними (чисельними) методами. Чисельні методи – методи наближеного чи точного розв'язання задачі, що базуються на побудові скінченої послідовності дій над скінченою множиною чисел, результатами яких є числові значення. Для розв'язання конкретних практичних задач необхідно виконати мільйони, і навіть мільярди математичних операцій, що під силу тільки ЕОМ.

Серед чисельних методів розрізняють прямі й ітераційні. Прямі, чи точні, методи дають розв'язок за скінчене число дій, прості й найбільш універсальні, вони забезпечують обчислення за точними формулами. Проте отриманий розв'язок в результаті округлень втрачає точність і стає наближеним, причому похибка в результаті дій над округленими, тобто наближеними, числами, накопичується, стає неусувною.

Ітераційні (наближені) методи задаються у вигляді багатокрокових повторень певної послідовності дій, вихідними даними для яких є результати попереднього циклу обчислень, який називається ітерацією. Сама природа такого методу обумовлює наближеність одержуваного розв'язку, похибка якого регулюється кількістю виконаних ітерацій: чим більше ітерацій, тим менше похибка.

Не можна забувати, що отримані результати тільки тоді будуть досить достовірні, тобто будуть мати похибку в припустимих межах, якщо чисельний метод є стійким і збігається. Точність і збіжність застосовуваного чисельного методу треба досліджувати на рішеннях задач, що мають аналітичний розв'язок чи експериментальні результати.

Для складних задач розробляються чисельні методи і складаються обчислювальні програми, що утворюють бібліотеки стандартних і пакети прикладних програм, а також програмні комплекси.

РОЗДІЛ 1. ПРЯМІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

1.1. Метод Гауса

Цей метод є точним. Він заснований на зведенні матриці системи до трикутного вигляду.

Нехай потрібно розв'язати систему $A\bar{x}=\bar{b}$; тут $A=\lfloor a_{ij}\rfloor$ – матриця коефіцієнтів системи розмірності $n\times n$, $det\, A\neq 0$.

$\bar{x}=(x_1,x_2,...,x_n)^T$ і $\bar{b}=(b_1,b_2,...,b_n)^T$ – вектори.

Віднімемо від другого рівняння системи

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

перше, помножене на таке число, щоб обернувся на нуль коефіцієнт при x_1. Потім, у такий же спосіб, віднімемо перше рівняння з третього, четвертого і т.д. Тоді виключаться всі коефіцієнти першого стовпця, що лежать нижче головної діагоналі.

Потім, за допомогою другого рівняння виключимо з третього, четвертого тощо рівнянь коефіцієнти другого стовпця. Послідовно продовжуючи цей процес, виключимо з матриці A всі коефіцієнти, що лежать нижче головної діагоналі.

Запишемо загальні формули процесу. Нехай проведено виключення коефіцієнтів з $(k-1)$-го стовпця. Тоді залишилися такі рівняння з ненульовими елементами нижче головної діагоналі:

$$\sum_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k)}x_j=b_i^{(k)},\quad k\leq i\leq n\ . \tag{2}$$

Помножимо k-й рядок на число

$$C_{mk} = \frac{a_{mk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\ ,\ m > k \tag{3}$$

і віднімемо його від m-го рядка. Перший ненульовий елемент цього рядка обернеться на нуль, а інші зміняться за формулами

$$\begin{gathered} a_{m1}^{(k+1)} = a_{m1}^{(k)} - C_{mk} a_{k1}^{(k)}, \\ b_m^{(k+1)} = b_m^{(k)} - C_{mk} b_k^{(k)}, \\ k < m,\quad 1 \le n. \end{gathered} \tag{4}$$

Виконуючи обчислення за цими формулами при всіх зазначених індексах, виключимо елементи k-го стовпця. Назвемо таке виключення циклом процесу. Виконання всіх циклів називається прямим ходом виключення.

У результаті виконання прямого ходу одержимо систему з матрицею трикутного вигляду

$$\sum_{j=i}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j = b_i^{(i)},\quad 1 \le i \le n\ \cdot \tag{5}$$

Така система легко розв’язується за допомогою так званого зворотного ходу, суть якого така. З останнього рівняння визначаємо x_n. Підставляючи його в передостаннє рівняння, знаходимо x_{n-1} і т.д. Загальні формули зворотного ходу мають вигляд

$$x_i = \frac{1}{a_{ij}^{(i)}}\left[b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right],\quad i = n, n-1, \ldots, 1\ \cdot \tag{6}$$

Виключення за формулами прямого ходу (3)-(4) не можна проводити, якщо в ході розрахунку на головній діагоналі виявиться нульовий елемент $a_{kk}^{(k)} = 0$. Але в першому стовпці проміжної системи (2) всі елементи не можуть бути нулями: це означало б, що $\det A = 0$. Перестановкою рядків можна перемістити ненульовий елемент на головну діагональ і продовжити розрахунок.

Якщо елемент на головній діагоналі $a_{kk}^{(k)}$ малий, то цей рядок домножується на великі числа C_{mk}, що призводить до значних помилок округлення при обчисленнях. Щоб уникнути цього, кожен цикл завжди починають з перестановки рядків. Серед елементів стовпця $a_{mk}^{(k)},\quad m \geq k$ знаходять головний, тобто найбільший за модулем у k-ому стовпці, і перестановкою рядків переводять його на головну діагональ, після чого роблять виключення. У цьому суть методу Гауса з вибором головного елемента.

1.2. Метод Халецького

Розглянемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$A\bar{x} = \bar{b}\ , \tag{1}$$

де $A = \lfloor a_{ij} \rfloor$ – квадратна матриця порядку n і

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \bar{b} = \begin{bmatrix} a_{1,n+1} \\ \dots \\ a_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

– вектори-стовпці невідомих і вільних членів відповідно.

Представимо матрицю A у вигляді добутку нижньої трикутної матриці $B = \lfloor b_{ij} \rfloor$ і верхньої трикутної матриці $C = \lfloor c_{ij} \rfloor$ з одиничною діагоналлю, тобто

$$A = BC\ , \tag{2}$$

де $B = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix}$ і $C = \begin{bmatrix} 1 & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & c_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$.

Тоді елементи b_{ij} і c_{ij} визначаються за формулами:

$$\left.\begin{aligned} & b_{i1} = a_{i1}; \\ & b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} c_{kj} \quad (i \ge j > 1) \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

і

$$\left.\begin{aligned} & c_{1j} = \frac{a_{1j}}{b_{11}}; \\ & c_{ij} = \frac{1}{b_{ii}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} c_{kj}\right) (1 < i < j). \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

Звідси шуканий вектор $\bar{x}$ може бути знайдений з ланцюга рівнянь

$$B\bar{y} = \bar{b}\ ,\ C\bar{x} = \bar{y}. \qquad (5)$$

Оскільки матриці B і C – трикутні, то системи (5) легко розв'язуються, а саме:

$$\left.\begin{aligned} & y_1 = \frac{a_{1,n+1}}{b_{11}}; \\ & y_i = \frac{1}{b_{ii}}\left(a_{i,n+1} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} y_k\right) (i > 1) \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

і

$$\left.\begin{aligned} & x_n = y_n; \\ & x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^{n} c_{ik} x_k \quad (i < n). \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

З формули (6) бачимо, що числа y_i зручно обчислювати разом з коефіцієнтами c_{ij}.

Схема Халецького зручна для роботи на ЕОМ, тому що в цьому випадку операції «нагромадження» (3) і (4) можна проводити без запису проміжних результатів. Метод є точним.

РОЗДІЛ 2. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

2.1. Метод простих ітерацій

Цей найпростіший ітераційний метод розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь полягає в тому, що система рівнянь $A\bar{x} = \bar{b}$ перетворюється до вигляду

$$\bar{x} = B\bar{x} + \bar{c} \tag{1}$$

і її розв'язок знаходиться як границя послідовності

$$\bar{x}^{n+1} = B\bar{x}^{n} + \bar{c}, \quad n = 0,1,... \tag{2}$$

Ітераційний процес (2) збігається до розв'язку системи зі швидкістю геометричної прогресії, якщо норма матриці $\|B\| < 1$. При цьому, початкове наближення $\bar{x}^0$ можна вибирати довільно. На практиці за початкове наближення $\bar{x}^0$ беруть стовпець вільних членів $\bar{c}$.

Нагадаємо визначення основних норм у просторах векторів і матриць. Якщо в просторі векторів $\bar{x} = (x_1,..., x_m)^T$ введена норма $\|\bar{x}\|$, то погодженою з нею нормою в просторі матриць A називають норму

$$\|A\| = \sup_{X \neq 0} \|A\bar{x}\| / \|\bar{x}\| .$$

Найбільш вживані в просторі векторів наступні норми

$$\|\bar{x}\|_{\infty} = \max_{1 \le j \le m} |x_j|,$$

$$\|\bar{x}\|_{1} = \sum_{j=1}^{m} |x_j|,$$

$$\|\bar{x}\|_{2} = \sqrt{\sum_{j=1}^{m} |x_j|^2} = \sqrt{(\bar{x}, \bar{x})},$$

а погодженими з ними нормами в просторі матриць є відповідно норми

$$\|A\|_\infty = \max_{1\le i\le m}\left(\sum_{j=1}^{m}|a_{ij}|\right);$$

$$\|A\|_1 = \max_{1\le j\le m}\left(\sum_{i=1}^{m}|a_{ij}|\right);$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\max_{1\le i\le m}\lambda^i_{A^*A}}\,,$$

тут λ^i_D – власне значення матриці D, A^* – матриця, сполучена до матриці A.

Для приведення вихідної системи до вигляду (1) практично роблять наступне. Із заданої системи виділяють рівняння з коефіцієнтами при невідомих, модулі яких більші від суми модулів інших коефіцієнтів при невідомих у рівнянні. Кожне виділене рівняння вписують у такий рядок нової системи, щоб найбільший за модулем коефіцієнт виявився діагональним.

З останніх невикористаних і виділених рівнянь системи складають незалежні між собою лінійні комбінації з таким розрахунком, щоб був дотриманий зазначений вище принцип комплектування нової системи, й усі вільні рядки виявилися заповненими. При цьому треба подбати, щоб кожне невикористане раніше рівняння потрапило хоча б в одну лінійну комбінацію, що є рівнянням нової системи.

Якщо коефіцієнти й вільні члени даної системи є наближеними числами, написаними з p знаками, то для одержання розв’язку з m числом десяткових знаків $(m \le p)$ слід в значеннях послідовних наближень утримувати $m+1$ десяткових знаків і послідовні наближення обчислювати до їхнього збігу, після чого треба округлити результат на один знак.

Приклад.

Методом простої ітерації з точністю до двох вірних десяткових знаків після коми розв’язати систему рівнянь

$$\begin{cases} 2x_1 & +3x_2 & -4x_3 & +x_4 & -3 & =0, & (A) \\ x_1 & -2x_2 & -5x_3 & +x_4 & -2 & =0, & (\acute{A}) \\ 5x_1 & -3x_2 & +x_3 & -4x_4 & -1 & =0, & (\hat{A}) \\ 10x_1 & +2x_2 & -x_3 & +2x_4 & +4 & =0, & (\tilde{A}) \end{cases}$$

Розв'язок. У рівнянні $(\acute{A})$ коефіцієнт при x_3 за модулем більше від суми модулів інших коефіцієнтів при невідомих, тому його можна прийняти за третє рівняння нової системи. Коефіцієнт при x_1 в рівнянні $(\tilde{A})$ також більше від суми модулів інших коефіцієнтів рівняння $(\tilde{A})$, тому можна прийняти це рівняння за перше рівняння нової системи. Таким чином, нова система має такий вигляд:

$$\begin{cases} 10x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 + 4 = 0, & (I) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, & (II) \\ x_1 - 2x_2 - 5x_3 + x_4 - 2 = 0, & (III) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, & (IV) \end{cases}$$

Аналізуючи дану систему, легко помітити, що для одержання рівняння (II) з максимальним за модулем коефіцієнтом при x_2 досить скласти різницю $(A)-(\acute{A})$:

$$x_1 + 5x_2 + x_3 + 0 \cdot x_4 - 1 = 0 \;\; (II) \; .$$

Тепер у нову систему ввійшли рівняння $(A),(\acute{A})$ і $(\tilde{A})$, тому в рівняння (IV) обов'язково повинне ввійти рівняння $(\hat{A})$ даної системи. Підбором переконуємося, що за рівняння (IV) можна взяти лінійну комбінацію $2(A)-(\acute{A})+2(B)-(\tilde{A})$, тобто

$$3x_1 + 0 \cdot x_2 + 0 \cdot x_3 - 9x_4 - 10 = 0 \;\; (IV) \; .$$

У підсумку одержали перетворену систему рівнянь (I)-(IV) еквівалентну даній. Розв'язавши цю систему щодо діагональних невідомих, будемо мати систему:

$$\begin{cases} x_1 = & 0\cdot x_1 & -0{,}2x_2 & +0{,}1x_3 & -0{,}2x_4 & -0{,}4, \\ x_2 = & -0{,}2x_1 & +0\cdot x_2 & -0{,}2x_3 & +0\cdot x_4 & +0{,}2, \\ x_3 = & 0{,}2x_1 & -0{,}4x_2 & +0\cdot x_3 & +0{,}2x_4 & -0{,}4, \\ x_4 = & 0{,}333x_1 & +0\cdot x_2 & -0\cdot x_3 & +0\cdot x_4 & -1{,}111, \end{cases}$$

для знаходження розв'язку якої можна застосувати метод простої ітерації, тому що для неї виконується достатня умова збіжності. За нульове наближення коренів системи приймемо стовпець вільних членів, тобто $x_1^{(0)} = -0{,}4$; $x_2^{(0)} = 0{,}2$; $x_3^{(0)} = -0{,}4$; $x_4^{(0)} = -1{,}111$. Підставляючи ці значення в праві частини рівнянь останньої системи, одержимо перші наближення коренів:

$$x_1^{(1)} = -0{,}2\cdot 0{,}2 + 0{,}1(-0{,}4) - 0{,}2(-1{,}111) - 0{,}4 \approx -0{,}258;$$
$$x_2^{(1)} = -0{,}2(-0{,}4) - 0{,}2(-0{,}4) + 0{,}2 \approx 0{,}360;$$
$$x_3^{(1)} = 0{,}2(-0{,}4) - 0{,}4\cdot 0{,}2 + 0{,}2(-1{,}111) - 0{,}4 \approx -0{,}782;$$
$$x_4^{(1)} = 0{,}333(-0{,}4) - 1{,}111 \approx -1{,}244 \ .$$

Далі, підставляючи ці знайдені наближення знову в праві частини системи, одержимо другі наближення коренів:

$$x_1^{(2)} = -0{,}301\ ;\ x_2^{(2)} = 0{,}408;\ x_3^{(2)} = -0{,}844;\ x_4^{(2)} = -1{,}197.$$

Після нової підстановки будемо мати треті наближення коренів і т.д.

Для одержання коренів з необхідною точністю в одержуваних наближеннях утримуємо три знаки після коми й ітерації виконуємо доти, поки утримувані знаки в результатах перестануть змінюватися. Зведемо результати обчислень у таблицю

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$
0	-0,4	0,2	-0,4	-1,111
1	-0,258	0,360	-0,782	-1,244
2	-0,301	0,408	-0,844	-1,197

3	-0,327	0,429	-0,863	-1,212
4	-0,330	0,438	-0,879	-1,220
5	-0,332	0,442	-0,885	-1,221
6	-0,333	0,443	-0,887	-1,222
7	-0,333	0,444	-0,888	-1,222
8	-0,333	0,444	-0,889	-1,222
9	-0,333	0,444	-0,889	-1,222

Як видно з таблиці, на сьомому кроці ітерацій утримувані десяткові знаки в результатах перестали змінюватися. Округляючи отримані значення коренів на один знак, одержуємо $x_1 \approx -0{,}33$; $x_2 \approx 0{,}44$; $x_3 \approx -0{,}89$; $x_4 \approx -1{,}22$.

2.2. Метод Зейделя

Метод Зейделя являє собою певну модифікацію методу простої ітерації. Основна його ідея полягає в тому, що при обчисленні $(k+1)$-го наближення невідомої x_i враховуються вже обчислені раніше $(k+1)$-і наближення невідомих $x_1, x_2, x_3, .., x_{i-1}$.

Нехай дано зведену лінійну систему

$$x_i = c_i + \sum_{j=1}^{n} b_{ij} x_j \ , \ (i = 1,2,...,n).$$

Оберемо довільно початкові наближення коренів $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, ..., x_n^{(0)}$.

Далі, припускаючи, що k-і наближення $x_i^{(k)}$ коренів відомі, згідно Зейделю будемо будувати $(k+1)$-і наближення за наступними формулами:

$$x_i^{(k+1)} = c_i + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^{n} b_{ij} x_j^{(k)}, \ (i = 1,2,...,n), \ (k = 0,1,2,...). \quad (1)$$

Розглянемо розв’язання СЛАР методом Зейделя. Нехай система була зведена до вигляду

$$\begin{cases} x_1 = -0{,}4 + 0\cdot x_1 - 0{,}2x_2 + 0{,}1x_3 - 0{,}2x_{4,} \\ x_2 = 0{,}2 - 0{,}2x_1 + 0\cdot x_2 - 0{,}2x_3 + 0\cdot x_{4,} \\ x_3 = -0{,}4 + 0{,}2x_1 - 0{,}4x_2 + 0\cdot x_3 + 0{,}2x_{4,} \\ x_4 = -1{,}111 + 0{,}333x_1 + 0\cdot x_2 - 0\cdot x_3 + 0\cdot x_4. \end{cases}$$

Узявши за початкове наближення стовпець вільних членів, тобто

$$x_1^{(0)} = -0{,}4;\;\; x_2^{(0)} = 0{,}2;\;\; x_3^{(0)} = -0{,}4;\;\; x_4^{(0)} = -1{,}111,$$

згідно методу Зейделя, одержимо перші наближення коренів

$$x_1^{(1)} = -0{,}4 - 0{,}2\cdot 0{,}2 + 0{,}1(-0{,}4) - 0{,}2(-1{,}111) \approx -0{,}258;$$
$$x_2^{(1)} = 0{,}2 - 0{,}2(-0{,}258) - 0{,}2(-0{,}4) \approx 0{,}332;$$
$$x_3^{(1)} = -0{,}4 + 0{,}2(-0{,}258) - 0{,}4\cdot 0{,}332 + 0{,}2(-1{,}111) \approx -0{,}807;$$
$$x_4^{(1)} = -1{,}111 + 0{,}333(-0{,}258) \approx -1{,}197.$$

Виконуючи аналогічним чином наступні ітерації і зводячи результати обчислень у таблицю, одержимо

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$
0	-0,4	0,2	-0,4	-1,111
1	-0,258	0,332	-0,807	-1,197
2	-0,308	0,423	-0,870	-1,214
3	-0,329	0,440	-0,884	-1,221
4	-0,332	0,443	-0,888	-1,222
5	-0,333	0,444	-0,889	-1,222
6	-0,333	0,444	-0,889	-1,222

РОЗДІЛ 3. ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ І ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ ТА ЇХ СИСТЕМ

3.1. Загальні положення

Якщо алгебраїчне рівняння достатньо складне, то його корені рідко вдається знайти точно. Тому важливого значення набувають способи наближеного знаходження коренів рівняння й оцінки їхньої точності.

Нехай дано рівняння

$$f(x)=0 \;, \qquad (1)$$

де $f(x)$ визначена і неперервна в певному скінченому чи нескінченному інтервалі.

Усяке значення ξ, що перетворює функцію $f(x)$ на нуль, тобто таке, що $f(\xi)=0$, називається коренем рівняння (1) чи нулем функції $f(x)$.

Наближене знаходження дійсних коренів рівняння (1) звичайно складається з таких етапів:

1) відділення коренів, тобто встановлення проміжків $[\alpha,\beta]$, що містять один і тільки один корінь рівняння (1);

2) уточнення наближених коренів, тобто доведення їх до заданого ступеня точності.

Для відділення коренів корисна відома теорема з математичного аналізу. Відповідно до цієї теореми, якщо неперервна функція $f(x)$ на кінцях відрізка $[\alpha,\beta]$, приймає значення різних знаків, тобто $f(\alpha)f(\beta)<0$, то всередині цього відрізка міститься непарне число дійсних коренів. Ясно, що корінь виявиться єдиним, якщо всередині цього відрізка функція $f(x)$ крім того ще й монотонна, тобто її похідна існує і зберігає знак усередині інтервалу (α,β).

Таким чином, якщо існує неперервна похідна $f'(x)$ і її нулі легко обчислюються, то для відділення коренів рівняння (1) можна вчинити так:

1) знайти корені рівняння $f'(x)=0$, тим самим ми визначимо кінці інтервалів монотонності функції $f(x)$;

2) оцінити значення функції $f(x)$ на кінцях знайдених інтервалів монотонності й вибрати ті з них, на кінцях яких значення функції набуває різних знаків. Вони і будуть шуканими інтервалами.

Корисно пам'ятати, що алгебраїчне рівняння n-го ступеня $a_0x^n + a_1x^{n-1} + ... + a_n = 0, \quad (a_0 \neq 0)$ має не більше ніж n дійсних коренів. Тому якщо для такого рівняння ми одержимо $n+1$ зміну знаків, то всі його корені будуть відділеними.

Розглянемо кілька прикладів відділення коренів алгебраїчного рівняння:

Приклад 1. Відділити корені рівняння

$$f(x) = x^3 - 3x^2 + 3 = 0 \ .$$

Розв'язок. Область визначення даної функції $(-\infty;\infty)$.

Знайдемо корені рівняння $f'(x)=0$

$$f'(x) = 3x^2 - 6x = 3x(x-2) = 0 \Rightarrow x_1 = 0, x_2 = 2.$$

Одержуємо такі інтервали монотонності функції $f(x)$ – $(-\infty;0)$, $(0;2)$, $(2;\infty)$.

Визначимо знаки функції $f(x)$ на кінцях кожного з цих інтервалів:

$$f(-\infty) < 0 \ , \quad f(0) > 0, \quad f(2) < 0, \quad f(\infty) > 0.$$

На кінцях кожного з інтервалів монотонності значення даної функції набуває різних знаків, отже в кожному інтервалі міститься по одному дійсному кореню розглянутого рівняння.

Приклад 2. Відділити корені рівняння

$$f(x)=x^5+5x^4+15x^3-41=0 \ .$$

Розв'язок. Область визначення функції $(-\infty;\infty)$.

Функція $f'(x)=5x^4+20x^3+45x^2=5x^2(x^2+4x+9)$ набуває невід'ємного значення. Отже функція $f(x)$ монотонна у своїй області визначення. Визначаючи знаки функції $f(x)$ на кінцях інтервалу монотонності $f(-\infty)<0$, $f(\infty)>0$, робимо висновок, що вона має в цьому інтервалі дійсний корінь.

Уточнити розташування кореня можна за допомогою методів розв'язання, що будуть розглянуті нижче.

3.2. Метод Ньютона (дотичних)

Цей метод дуже ефективний для розв'язання алгебраїчних і трансцендентних рівнянь. Його основна перевага полягає в тому, що при порівняно простій схемі обчислень він має швидку збіжність.

Нехай єдиний корінь ξ рівняння

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

розташований усередині інтервалу $[\alpha,\beta]$, причому $f'(x)$ і $f''(x)$ неперервні і зберігають визначені знаки $\forall x\in[\alpha,\beta]$. Відповідно до методу Ньютона корінь вихідного рівняння відшукується як границя ітераційної послідовності

$$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)},\ \ (i=0,1,2,...). \tag{2}$$

Початкове наближення $x_0\in[\alpha,\beta]$ і повинне задовольняти умові

$$f(x_0)f''(x_0)>0 \ . \tag{3}$$

Геометрично метод Ньютона еквівалентний заміні рівняння кривої $y=f(x)$ рівнянням дотичної, проведеної до цієї кривої в точці $x=x_i$. За наближене значення кореня береться абсциса точки перетину цієї дотичної з віссю Ox.

Для оцінки точності наближення x_i можна скористатися формулою

$$|x_i - \xi| \le \frac{|f(x_i)|}{m_1}\ , \tag{4}$$

де $|f'(x)| \ge m_1 > 0$, $\forall x \in [\alpha, \beta]$, (5)

ξ – точне значення кореня.

Знайдемо, наприклад, з точністю $\varepsilon = 0{,}0001$ корінь рівняння $x^3 - 3x^2 + 3 = 0$. Виконавши процедуру відділення коренів так, як описано вище (див. Розділ 3. Загальні положення) одержимо три інтервали $(-\infty;0)$, $(0;2)$, $(2;+\infty)$, що містять корінь. Знайдемо корінь, розташований в інтервалі $(0;2)$. Цей інтервал методом бісекції зменшимо так, щоб його довжина була $\le 0{,}1$.

Маємо:

$$x_1 = \frac{0+2}{2} = 1, \quad f(x_1) = 1 > 0 \Rightarrow\ \xi \in [1;2];$$

$$x_2 = \frac{1+2}{2} = 1{,}5, \quad f(x_2) = -0{,}375 < 0 \Rightarrow\ \xi \in [1;1{,}5];$$

$$x_3 = \frac{1+1{,}5}{2} = 1{,}25, \quad f(x_3) = 0{,}2656 > 0 \Rightarrow\ \xi \in [1{,}25;1{,}5];$$

$$x_4 = \frac{1{,}25+1{,}5}{2} = 1{,}375, \quad f(x_4) = -0{,}0727 < 0 \Rightarrow$$

$\xi \in [1{,}25;1{,}375]$;

$$x_5 = \frac{1{,}25+1{,}375}{2} = 1{,}3125, \quad f(x_5) = 0{,}093 > 0 \Rightarrow$$

$\xi \in [1{,}3125;1{,}375]$.

Довжина отриманого інтервалу

$$|1{,}375 - 1{,}3125| = 0{,}0625 < 0{,}1\ .$$

Подальше уточнення кореня проведемо методом Ньютона.

Друга похідна $f''(x)$ на цьому інтервалі більше нуля, перша похідна $f'(x)$ – менше нуля. За початкове наближення x_0 візьмемо лівий кінець інтервалу, тобто $x_0 = 1{,}3125$. Тоді

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1{,}3125 - \frac{0{,}093}{(-2{,}707)} = 1{,}3469, \quad f(x_1) = 0{,}00115.$$

Обчислимо значення першої похідної $f'(x)$ на другому кінці інтервалу й оцінимо похибку отриманого наближення $f'(1{,}375) \approx 2{,}578$, тобто $m_1 = 2{,}578$.

$$|x_1 - \xi| \le \frac{|f(x_1)|}{m_1} = \frac{0{,}00115}{2{,}578} \approx 0{,}00445 > 0{,}0001 \ .$$

Точність, з якою обчислене перше наближення, недостатня. Тому робимо наступний крок

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 1{,}3496 - \frac{0{,}0015}{(-2{,}639)} = 1{,}3473, \quad f(x_2) = 2 \cdot 10^{-7} \ ,$$

$$|x_2 - \xi| \le \frac{|f(x_2)|}{m_1} = \frac{2 \cdot 10^{-7}}{2{,}578} \approx 7{,}76 \cdot 10^{-8} < 0{,}0001 \ .$$

Як видно з оцінки похибки другого наближення, ми одержали значення кореня з похибкою, що не перевищує задану.

Корені, розташовані в двох інших інтервалах $(-\infty;0)$, $(2;+\infty)$ знаходяться аналогічно.

3.3. Метод пропорційних частин (хорд)

Розрахункові формули цього методу отримані з таких міркувань. Інтервал $[\alpha, \beta]$, усередині якого розташований корінь рівняння

$$f(x)=0, \qquad (1)$$

ділимо у відношенні $f(\alpha)/f(\beta)$. Це дасть нам наближене значення кореня $x_i=\alpha+h_i$, де

$$h_i=-\frac{f(\alpha)}{f(\beta)-f(\alpha)}(\beta-\alpha)\ ,\ (i=0,1,\ldots). \qquad (2)$$

Далі, застосовуючи цей прийом до одного з відрізків $[\alpha,x_1]$ чи $[x_1,\beta]$, на кінцях якого функція $f(x)$ має протилежні знаки, одержимо друге наближення x_2 і т.д.

Геометрично спосіб пропорційних частин еквівалентний заміні рівнянь кривої $y=f(x)$ рівнянням хорди, що проходить через точки $A[\alpha,f(\alpha)]$ і $B[\beta,f(\beta)]$. За наближене значення кореня приймається абсциса точки перетину хорди з віссю Ox.

Уточнення кореня варто проводити доти, поки не буде досягнута задана точність. Для оцінки точності наближення можна скористатися формулою

$$|x_i-\xi|\le\frac{|f(x_i)|}{m_1}\ ,$$

де $|f'(x)|\ge m_1>0$, $\forall x\in[\alpha,\beta]$, (3)

ξ – точне значення кореня.

Наприклад, знайдемо з точністю до $\varepsilon=0{,}01$ корені рівняння $x^3-3x^2+3=0$. Виконавши процедуру відділення коренів так, як описано вище (див. Розділ 3. Загальні положення) одержимо три інтервали $(-\infty;0)$, $(0;2)$, $(2;+\infty)$, що містять корінь. Знайдемо корінь, розташований в інтервалі $(-\infty;0)$.

Маємо $f(0)=3>0$, $f'(x)=3x(x-2)$, $f''(x)=6x-6$.

Від нескінченного інтервалу перейдемо до скінченого, замінивши його ліву границю скінченим числом менше нуля, але таким, щоб значення функції в ньому було від'ємним. Інтервал $[-1{,}0]$ задовольняє цим вимогам: $f(-1) = -1 < 0$. Крім того, $f''(x)$ на цьому інтервалі знакопостійна і, отже, $f'(x)$ – монотонна й досягає найбільшого й найменшого значення на кінцях інтервалу. Використовуючи метод бісекції, зменшимо цей інтервал так, щоб його довжина була $\le 0{,}1$.

Маємо:

$x_1 = \dfrac{-1+0}{2} = -0{,}5, \quad f(x_1) \approx 2{,}125 > 0 \Rightarrow$ корінь $\in [-1; -0{,}5]$;

$x_2 = \dfrac{-1-0{,}5}{2} = -0{,}75, \quad f(x_2) \approx 0{,}89 > 0 \Rightarrow$ корінь $\in [-1; -0{,}75]$;

$x_3 = \dfrac{-1-0{,}75}{2} = -0{,}875, \quad f(x_3) \approx 0{,}033 > 0 \Rightarrow$ корінь $\in [-1; -0{,}875]$;

$x_4 = \dfrac{-1-0{,}875}{2} = -0{,}9375, \quad f(x_4) \approx -0{,}46 < 0 \Rightarrow$ корінь $\in [-09375; -0{,}875]$;

Довжина отриманого інтервалу $|-0{,}875 + 0{,}9375| = 0{,}0625 < 0{,}1$, тому надалі будемо працювати з цим інтервалом.

Обчислюючи значення першої похідної $f'(x)$ на кінцях інтервалу, одержуємо $f'(-0{,}9375) \approx 8{,}26$; $f'(-0{,}875) \approx 7{,}547$. Отже, у формулі для оцінки похибки як m_1 можна прийняти $m_1 = 7{,}547$.

Оскільки друга похідна на обраному інтервалі від'ємна, то як нерухомий кінець у формулі для обчислення кореня за методом хорд варто взяти лівий кінець інтервалу, тобто розрахункова формула набуде вигляду:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f(x_i) - f(\alpha)}(x_i - \alpha)\ ,\ (i = 0,1,2,...),$$

де $\alpha = -0{,}9375$, $x_0 = \beta = -0{,}875$.

Виконуючи розрахунок за цією формулою при $i = 0$, одержимо $x_1 \approx -0{,}87514$, $f(x_1) \approx 0{,}03215$.

Обчислимо похибку

$$|x_1 - \xi| \le \frac{|f(x_1)|}{m_1} = \frac{0{,}03215}{7{,}547} \approx 0{,}00426 < 0{,}01\ .$$

Таким чином, уже перше наближення дає значення кореня з потрібною точністю.

Корені, розташовані в двох інших інтервалах $(0;2)$, $(2;+\infty)$ знаходяться аналогічно.

3.4. Метод градієнтного спуску

Нехай маємо систему рівнянь

$$f_i(x_1, x_2, ..., x_n) = 0,\ \ (i = 1,2,...,n) \tag{1}$$

чи в матричній формі

$$F(\bar{x}) = 0\ , \tag{2}$$

де $F = (f_1, f_2, ..., f_n)^T$, $\bar{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$.

Припустимо, що функції $f_i(x_1, x_2, ..., x_n)$ дійсні й неперервно-диференційовані в їхній загальній області визначення. Розглянемо функцію

$$\Phi(\bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} \left[f_i(x_1, x_2, .., x_n) \right]^2 = (F(\bar{x}), F(\bar{x}))\ . \tag{3}$$

Очевидно, що кожний розв'язок системи (1) перетворює на нуль функцію $\Phi(\bar{x})$; навпаки, числа $x_1, x_2, ..., x_n$, для яких функція $\Phi(\bar{x})$ дорівнює нулю, є коренями системи (1). Таким чином, задача зводиться до знаходження мінімуму скалярної функції багатьох змінних $\Phi(\bar{x})$.

Одним з методів мінімізації функцій багатьох змінних є метод градієнтного спуску. Якщо $\bar{x}^{(k)}$ – деяке наближення до розв’язку системи, то в методі градієнтного спуску ми одержуємо нове наближення $\bar{x}^{(k+1)}$, рухаючись за напрямком найбільшої миттєвої швидкості зміни функції $\Phi(\bar{x})$ в точці $\bar{x}^{(k)}\left(grad\Phi\left(\bar{x}^{(k)}\right)\right)$ до точки, де значення $\Phi\left(\bar{x}^{(k+1)}\right)$ мінімальне, тобто

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} + \lambda_k grad\Phi\left(\bar{x}^{(k)}\right), \tag{4}$$

де λ_k вибирається з умови мінімуму $\Phi\left(\bar{x}^{(k+1)}\right)$.

Якщо λ – мала величина, квадратом і вищими ступенями якої можна знехтувати, то, розкладаючи функції $f_i(x_1, x_2, ..., x_n)$ за степенями λ з точністю до лінійних членів і виражаючи $grad\,\Phi(x)$ через матрицю Якобі $W(\bar{x})$, одержимо таке представлення розрахункової формули методу градієнтного спуску

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} - \mu_k W^T\left(\bar{x}^{(k)}\right)F\left(\bar{x}^{(k)}\right), \ (k = 0,1,2,...), \tag{5}$$

де $W(\bar{x}) = \dfrac{\partial F}{\partial \bar{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_2} \cdots \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x_1} \dfrac{\partial f_2}{\partial x_2} \cdots \dfrac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ .. \quad \cdots \\ \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1} \dfrac{\partial f_n}{\partial x_2} \cdots \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$ матриця Якобі вектор-функції $F(\bar{x})$.

$$\mu_k = \frac{\left(F\left(\bar{x}^{(k)}\right), W\left(\bar{x}^{(k)}\right)W^T\left(\bar{x}^{(k)}\right)F\left(\bar{x}^{(k)}\right)\right)}{\left(W\left(\bar{x}^{(k)}\right)W^T\left(\bar{x}^{(k)}\right)F\left(\bar{x}^{(k)}\right), \ W\left(\bar{x}^{(k)}\right)W^T\left(\bar{x}^{(k)}\right)F\left(\bar{x}^{(k)}\right)\right)}. \tag{6}$$

Слід зазначити, що ітераційний процес, побудований за методом градієнтного спуску, збігається до точного розв’язку, якщо початкове наближення $x^{(0)}$ обране з досить малого околу кореня.

Приклад.

Методом градієнтного спуску приблизно обчислити корені системи

$$\begin{cases} x + x^2 - 2yz = 0{,}1; \\ y - y^2 + 3xz = -0{,}2; \\ z + z^2 + 2xy = 0{,}3, \end{cases}$$

розташовані в околі початку координат.

Розв'язок. Маємо $\bar{x}^{(0)} = (0{,}0{,}0)^T$.

Тут $F = \begin{pmatrix} x + x^2 - 2yz - 0{,}1 \\ y - y^2 + 3xz + 0{,}2 \\ z + z^2 + 2xy - 0{,}3 \end{pmatrix}$ і $W = \begin{pmatrix} 1+2x & -2z & -2y \\ 3z & 1-2y & 3x \\ 2y & 2x & 1+2z \end{pmatrix}$.

Підставляючи нульове наближення, будемо мати:

$$F\left(\bar{x}^{(0)}\right) = (-0{,}1;0{,}2;-0{,}3)^T \ \text{ і } \ W\left(\bar{x}^{(0)}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E$$

За формулами (5) і (6) одержуємо перше наближення

$$\mu_0 = \frac{\left(F\left(\bar{x}^{(0)}\right), F\left(\bar{x}^{(0)}\right)\right)}{\left(F\left(\bar{x}^{(0)}\right), F\left(\bar{x}^{(0)}\right)\right)} = 1 \ \text{ і}$$

$$\bar{x}^{(1)} = \bar{x}^{(0)} - 1 \cdot E \cdot F\left(\bar{x}^{(0)}\right) = (0{,}1;-0{,}2;0{,}3)^T.$$

Аналогічно знаходимо друге наближення $\bar{x}^{(2)}$.

Маємо:

$$F\left(\bar{x}^{(1)}\right) = \begin{pmatrix} 0{,}13 \\ 0{,}05 \\ 0{,}05 \end{pmatrix}, \ W\left(\bar{x}^{(1)}\right) = \begin{pmatrix} 1{,}2 & -0{,}6 & 0{,}4 \\ 0{,}9 & 1{,}4 & 0{,}3 \\ -0{,}4 & 0{,}2 & 1{,}6 \end{pmatrix}.$$

Звідси:

$$W^T\left(\overline{x}^{(1)}\right)F\left(\overline{x}^{(1)}\right)=\begin{pmatrix}0{,}181\\0{,}002\\0{,}147\end{pmatrix} \quad \text{та} \quad W\left(\overline{x}^{(1)}\right)W^T\left(\overline{x}^{(1)}\right)F\left(\overline{x}^{(1)}\right)=\begin{pmatrix}0{,}2748\\0{,}2098\\0{,}1632\end{pmatrix}$$

Отже,

$$\mu_1=\frac{0{,}13\cdot 0{,}2748+0{,}05\cdot 0{,}2098+0{,}05\cdot 0{,}1632}{0{,}2748^2+0{,}2098^2+0{,}1632^2}=\frac{0{,}054374}{0{,}14619797}=0{,}3719$$

і

$$\overline{x}^{(2)}=\begin{pmatrix}0{,}1\\-0{,}2\\0{,}3\end{pmatrix}-0{,}3719\begin{pmatrix}0{,}181\\0{,}002\\0{,}147\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0{,}0327\\-0{,}2007\\0{,}2453\end{pmatrix}.$$

Для контролю обчислимо відхил

$$F\left(\overline{x}^{(2)}\right)=\begin{pmatrix}0{,}032\\-0{,}017\\-0{,}007\end{pmatrix}.$$

РОЗДІЛ 4. ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ І ВЛАСНІ ВЕКТОРИ МАТРИЦЬ

4.1. Проблема власних значень

При розв’язанні теоретичних і практичних задач часто виникає потреба визначити власні значення матриці A.

Нехай дана квадратна матриця $A=[a_{ij}]$. Розглянемо лінійне перетворення

$$\overline{y}=A\overline{x} \qquad (1)$$

де $\overline{x}$ і $\overline{y}$ – n-мірні вектори якогось n-мірного простору.

Вектор $\overline{x}\neq\overline{0}$ називається власним вектором матриці A, якщо

$$A\overline{x}=\lambda\overline{x}\ . \qquad (2)$$

Число λ називається власним значенням чи характеристичним числом матриці A, що відповідає даному власному вектору $\bar{x}$. Власні вектори матриці A є ненульовими розв'язками матричного рівняння

$$A\bar{x} = \lambda\bar{x} \text{ чи } (A-\lambda E)\bar{x} = \bar{0}, \tag{3}$$

де матриця $(A-\lambda E)$ називається характеристичною матрицею. Рівняння (3) являє собою однорідну систему, що має ненульові розв'язки тоді й тільки тоді, коли визначник системи дорівнює нулю, тобто

$$\det(A-\lambda E) = 0. \tag{4}$$

Визначник (4) називається характеристичним (віковим) визначником матриці A, а рівняння (4) називається характеристичним (віковим) рівнянням матриці A.

Для знаходження власних значень і власних векторів можна розгорнути характеристичний визначник (4) у рівняння n-го ступеня й розв'язати це рівняння одним із чисельних методів, або використати ітераційний метод для обчислення коренів характеристичного рівняння і власних векторів без попереднього розгортання характеристичного визначника.

4.2. Пошук власних значень і власних векторів матриць методом простих ітерацій

Приклад 1. Обчислити власні числа і власні вектори матриці

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}.$$

Розв'язок. Складемо характеристичне рівняння

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 & 0 \\ 2 & 4-\lambda & -2 \\ 0 & -2 & 5-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda^3 - 12\lambda^2 + 39\lambda - 28 = 0 \ .$$

Розв’язавши це рівняння, одержимо:

$$\lambda_1 = 1; \ \ \lambda_2 = 4; \ \ \lambda_3 = 7 \ \text{– власні числа.}$$

Знайдемо власні вектори. Підставимо $\lambda = 1$ в (3) і, розписавши його, одержимо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} (3-1)x_1 & +2x_2 & +0x_3 & =0 \\ 0x_1 & -2x_2 & +(5-1)x_3 & =0 \\ 2x_1 & +(4-1)x_2 & -2x_3 & =0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2x_1 & +2x_2 & & =0 \\ & -2x_2 & +4x_3 & =0 \\ 2x_1 & +3x_2 & -2x_3 & =0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 & +x_2 & & =0 \\ & -2x_2 & +4x_3 & =0 \\ 2x_1 & +3x_2 & -2x_3 & =0 \end{cases}$$

Нехай $x_1 = 1$, тоді $x_2 = -1$; $x_3 = -1/2$;

$$\bar{x}^1 = \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1/2 \end{Bmatrix}$$

$$\lambda = 4$$

$$\begin{cases} (3-4)x_1 & +2x_2 & +0x_3 & =0 \\ 2x_1 & +0x_2 & -2x_3 & =0 \\ 0x_1 & -2x_2 & +x_3 & =0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -x_1 & +2x_2 & & =0 \\ 2x_1 & & -2x_3 & =0 \\ & -2x_2 & +x_3 & =0 \end{cases}$$

Нехай $x_1 = 1$, тоді $x_2 = 1/2$; $x_3 = -1$

$$\bar{x}^2 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

$$\lambda = 7$$

$$\begin{cases} (3-7)x_1 & +2x_2 & +0x_3 & =0 \\ 2x_1 & +(4-7)x_2 & -2x_3 & =0 \\ 0x_1 & -2x_2 & +(5-7)x_3 & =0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4x_1 & +2x_2 & & =0 \\ 2x_1 & -3x_2 & -2x_3 & =0 \\ & -2x_2 & -2x_3 & =0 \end{cases}$$

$$x_1 = 1;\ x_2 = -1;\ x_3 = 2$$

$$\bar{x}^3 = \begin{Bmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{Bmatrix}$$

Приклад 2. Використати метод ітерацій для визначення найбільшого за модулем власного числа матриці $A = \begin{pmatrix} 1{,}6 & 2{,}3 & 1{,}2 \\ 2{,}3 & 0{,}6 & 1{,}5 \\ 1{,}2 & 1{,}5 & 3{,}8 \end{pmatrix}$ і відповідного йому власного вектора.

Розв'язок. 1. Будуємо послідовність векторів $\bar{y}^{k+1} = A\bar{y}^k \quad (k = 0,1,2,\ldots)$, де $\bar{y}^0$ – довільний вектор; тоді

$\lambda_1 \approx y_i^{(k+1)} / y_i^{(k)}$, де $y_i^{(k+1)}$ і $y_i^{(k)}$ – однойменні координати двох послідовних векторів.

Всі обчислення наведені у таблиці.

A				$\dfrac{y_1^{(k+1)}}{y_1^{(k)}}$	$\dfrac{y_2^{(k+1)}}{y_2^{(k)}}$	$\dfrac{y_3^{(k+1)}}{y_3^{(k)}}$
	1,6	2,3	1,2			
	2,3	0,6	1,5			
	1,2	1,5	3,8			
$\bar{y}^0$	1	1	1			
$\bar{y}^1$	5,1	4,4	6,5	5,11	5,48	5,76
$\bar{y}^2$	26,08	24,12	37,42	5,45	5,41	5,60
$\bar{y}^3$	142,108	130,586	209,672	5,484	5,511	5,548
$\bar{y}^4$	$7{,}793 \cdot 10^2$	$7{,}197 \cdot 10^2$	$1{,}163 \cdot 10^3$	5,5151	5,5148	5,5321
$\bar{y}^5$	$42{,}98 \cdot 10^3$	$3{,}969 \cdot 10^3$	$6{,}434 \cdot 10^3$	5,5205	5,5225	5,5267
$\bar{y}^6$	$2{,}372 \cdot 10^4$	$2{,}191 \cdot 10^4$	$3{,}556 \cdot 10^4$	5,5233	5,5235	5,5251
$\bar{y}^7$	$1{,}310 \cdot 10^5$	$1{,}210 \cdot 10^5$	$1{,}964 \cdot 10^5$	5,5240	5,5241	5,5246
$\bar{y}^8$	$7{,}239 \cdot 10^5$	$6{,}688 \cdot 10^5$	$10{,}85 \cdot 10^2$	5,5242	5,5243	5,5244
$\bar{y}^9$	$3{,}999 \cdot 10^6$	$3{,}694 \cdot 10^6$	$5{,}996 \cdot 10^6$	5,5243	5,5243	5,5244
$\bar{y}^{10}$	$2{,}209 \cdot 10^7$	$2041 \cdot 10^7$	$2{,}312 \cdot 10^7$	5,5243	5,5243	5,5243
$\bar{y}^{11}$	$1{,}220 \cdot 10^8$	$1{,}127 \cdot 10^8$	$1{,}830 \cdot 10^8$			

Отже, $\lambda_1 = 5{,}5243$.

2. Власний вектор $\bar{x}^1$ визначається з рівності $\bar{x}^1 \approx \bar{y}^k$. Отже, $\bar{x}^1 \approx \bar{y}^{11} = \left(1{,}2047 \cdot 10^8; \quad 1{,}12753 \cdot 10^8; \quad 1{,}830184 \cdot 10^8\right)$

РОЗДІЛ 5. ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ

5.1. Постановка задачі інтерполяції

При розв’язанні багатьох практичних задач, що виникають у різних областях, постає необхідність у використанні теорії наближення функцій або теорії апроксимації функцій.

Суть задачі апроксимації така. Нехай дана деяка невідома в аналітичному сенсі функція $y = f(x)$ і відома лише її поведінка (наприклад, дискретні значення в точках $f(x_i)$) на певному відрізку $[a,b]$. Таку функцію надалі будемо називати апроксимованою функцією. Треба побудувати іншу функцію $y = F(x)$, апроксимуючу функцію, яка б була близька до функції $y = f(x)$ з певною похибкою. При цьому потрібне виконання таких вимог: наявність дискретних значень функції $y_i = f(x_i)$; визначення класу апроксимуючих функцій, з яких конструюється функція $y = F(x)$; вид критерію згоди між функціями $y = f(x)$ і $y = F(x)$; оцінка похибки апроксимації.

Вид функції $y = F(x)$ залежить від класу розв'язуваних задач. Наприклад, при дослідженні напружено-деформованого стану методом скінченних елементів у задачах механіки деформованого тіла апроксимуючі функції представляються комбінацією функцій $1, x, \ldots, x^n$, або сплайнами. Експонентні функції мають широке застосування у фізиці при вивченні явищ типу розпаду і нагромадження, а тригонометричні функції – у механіці при коливальних процесах.

Критерій згоди або близькості апроксимованої й апроксимуючої функцій визначається з умови мінімуму відстаней між ними. Наприклад, найпоширенішим критерієм є критерій Чебишева:

$$\rho = \max_{0 \le i \le n} \left| f(x_i) - F(x_i) \right| \to \min \to 0 \ .$$

Інший критерій може бути записаний у вигляді:

$$\rho = \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) - F(x_i) \right]^2 \to \min \ .$$

Метод апроксимації, заснований на другому критерії, має назву методу найменших квадратів.

Якщо при використанні критерію Чебишева прийняти $\rho = 0$, то це буде означати, що значення апроксимованої й апроксимуючої функцій у вузлових точках відрізка $[a,b]$ збігаються. Цей спосіб апроксимації називається інтерполюванням або інтерполяцією.

Питання оцінки похибки апроксимації безумовно залежать від попередніх трьох вимог і розглядаються окремо для конкретного процесу апроксимації.

5.2. Наближене відновлення функції за допомогою інтерполяційного многочлена Лагранжа

Нехай відомі значення деякої функції f в $n+1$ різних точках $x_0, x_1, ..., x_n$. Введемо позначення:

$$f_i = f(x_i), \quad i = 0,1,...,n.$$

Наприклад, ці значення отримані з експерименту чи знайдені за допомогою досить складних обчислень.

Виникає задача наближеного відновлення функції f в довільній точці x. Часто для розв'язання цієї задачі будується алгебраїчний многочлен $L_n(x)$ ступеня n, що у точках x_i приймає задані значення, тобто

$$L_n(x_i) = f_i, \quad i = 0,1,...,n$$

і називається інтерполяційним. Точки x_i, $i = 0,1,...n$ називаються вузлами інтерполяції.

Наближене відновлення функції f за формулою

$$f(x) \approx L_n(x)$$

називається інтерполяцією функції f. Якщо x розташований поза мінімальним відрізком, що містить усі вузли інтерполяції, то заміну функції f за зазначеною формулою називають також екстраполяцією.

Приклад. Нехай задані такі значення функції $f(x)$: $f(1)=4$, $f(2)=2$, $f(3)=4$, $f(4)=16$.

Для заданої таблиці значень функції $f(x)$ побудуємо інтерполяційний многочлен Лагранжа у вигляді

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f(x_k)\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)} .$$

Розв'язок. Тут $\omega(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)=(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$.

Ясно, що $\omega'(x_k)=\prod_{i\neq k}(x_k-x_i)$.

Для нашого прикладу $\omega(x)=(x-1)(x-2)(x-3)(x-4)$.

$$\omega'(1)=(1-2)(1-3)(1-4)=-6\ ;\ \omega'(2)=2\,;\ \omega'(3)=-2\,;\ \omega'(4)=6\,.$$

Тоді

$$L_3(x)=-\frac{4}{6}(x-2)(x-3)(x-4)+(x-1)(x-3)(x-4)-2(x-1)(x-2)(x-4)+$$
$$+\frac{16}{6}(x-1)(x-2)(x-3)=x^3-4x^2+3x+4\,.$$

РОЗДІЛ 6. ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ФУНКЦІЙ ЗА ДОПОМОГОЮ ІНТЕРПОЛЯЦІЇ КУБІЧНИМ СПЛАЙНОМ

Один з основних підходів чисельного диференціювання полягає в тому, що формули для апроксимації похідних різного порядку точності отримують у результаті диференціювання різних інтерполяційних многочленів.

Дійсно, нехай відомі значення певної функції $f(x)$ в точках $x_0, x_1, \ldots, x_n$ і треба обчислити $f^{(k)}(\bar{x})$. Для цього побудуємо функцію $\varphi(x)$, що інтерполює $f(x)$, і наближено припустимо $f^{(k)}(\bar{x}) \approx \varphi^{(k)}(\bar{x})$. Якщо для функції $\varphi(x)$ відома похибка $R(x) = f(x) - \varphi(x)$ (чи її оцінка), то похибка $\varphi^{(k)}(x)$ похідної може бути виражена формулою $r(x) = f^{(k)}(x) - \varphi^{(k)}(x) = R^{(k)}(x)$.

Сплайном $S_m(x)$ порядку m називають функцію, що є многочленом ступеня m **окремо на кожному із відрізків** $[x_{n-1}, x_n]$ $(n = 1,2,\ldots,N)$, на які розбитий вихідний відрізок $[a,b]$, тобто $S_m(x) = P_{nm}(x) = a_{n0} + a_{n1} + \ldots a_{nm}x^m$ при $x \in [x_{n-1}, x_n]$, і яка, крім того, задовольняє умовам неперервності похідних до порядку $m-1$ в точках $x_1, x_2, \ldots, x_{N-1}$:

$$P_{nm}^{(k)}(x_n) = P_{n+1,m}^{(k)}(x_n) \text{ при } k = 0,\ldots,m-1; n = 1,\ldots,N-1.$$

Кубічний сплайн $S_3(x) = P_{n3}(x)$, що задовольняє умові інтерполяції, тобто співпадає з функцією $f(x)$ в точках $x_0, \ldots, x_N$, можна записати у вигляді

$$P_{n3}(x) = a_n + b_n(x - x_n) + \frac{c_n}{2}(x - x_n)^2 + \frac{d_n}{6}(x - x_n)^3 \ , \tag{1}$$

$$x \in [x_{n-1}, x_n] \ , \ n = 1,.., N \ .$$

За умови, що $f''(a) = f''(b) = 0$ (один із варіантів задання крайових умов), коефіцієнти c_n визначаються із системи рівнянь

$$h_n c_{n-1} + 2(h_n + h_{n+1})c_n + h_{n+1}c_{n+1} = 6\left(\frac{f_{n+1} - f_n}{h_{n+1}} - \frac{f_n - f_{n-1}}{h_n}\right) , \qquad (2)$$

$$c_0 = c_N = 0, n = 1,..., N - 1 \ .$$

Тут $h_n = x_n - x_{n-1}, \ f_n = f(x_n).$

За знайденими числами c_n коефіцієнти b_n і d_n визначаються за формулами

$$d_n = \frac{c_n - c_{n-1}}{h_n} \ , \ b_n = \frac{h_n}{2}c_n - \frac{h_n^2}{6}d_n + \frac{f_n - f_{n-1}}{h_n}, \ a_n = f_n , \qquad (3)$$

$$n = 1,2,..., N \ .$$

Для нашого прикладу $x_0 = 1, \quad f_0 = 4, \quad x_1 = 2, \quad f_1 = 2, \quad x_2 = 3, \quad f_2 = 4, \quad x_3 = 4, \quad f_3 = 16,$ тобто сітка рівномірна $h_n = x_n - x_{n-1} = 1 = const$, що трохи спрощує обчислення. Система рівняння (2) набуває вигляду (за умови $f''(x_0) = f''(x_3) = 0$)

$$c_{n-1} + 4c_n + c_{n+1} = 6\left(f_{n+1} + f_{n-1} - 2 f_n\right) \ , \quad n = 1,2,,$$

$$c_0 = c_3 = 0.$$

У розгорнутому вигляді маємо:

$$\begin{cases} c_0 + 4c_1 + c_2 = 6\left(f_2 + f_0 - 2 f_1\right), \\ c_1 + 4c_2 + c_3 = 6\left(f_3 + f_1 - 2 f_2\right), \\ c_0 = c_3 = 0. \end{cases}$$

Підставляючи в систему вхідні дані та враховуючи, що $c_0 = c_3 = 0,$ перетворимо її до вигляду:

$$\begin{cases} 4c_1 + c_2 = 24, \\ c_1 + 4c_2 = 60. \end{cases}$$

Розв'язуючи останню систему, знаходимо:

$$c_1 = \frac{12}{5} \ ; \qquad c_2 = \frac{72}{5}.$$

Далі за формулами (3) одержуємо:

$$d_1 = \frac{12}{5};\ d_2 = 12;\ d_3 = -\frac{72}{5};$$
$$b_1 = -\frac{6}{5};\ b_2 = \frac{36}{5};\ b_3 = \frac{72}{5};$$
$$a_1 = 2;\ a_2 = 4;\ a_3 = 16.$$

Таким чином, шуканий сплайн має вигляд

$$S_3(x) = \begin{cases} P_{13}(x) = 2 - \frac{6}{5}(x-2) + \frac{6}{5}(x-2)^2 + \frac{2}{5}(x-2)^3, x \in [1;2]; \\ P_{23}(x) = 4 + \frac{36}{5}(x-3) + \frac{36}{5}(x-3)^2 + 2(x-3)^3, x \in [2;3]; \\ P_{33}(x) = 16 + \frac{72}{5}(x-4) + 0(x-4)^2 - \frac{12}{5}(x-4)^3, x \in [3;4]. \end{cases}$$

Тоді $f''(1{,}5) \approx P''(1{,}5) = \frac{12}{5} + \frac{12}{5}\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{6}{5}.$