

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

С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова, А. М. Шахновський

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ ТА ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

Підручник

Затверджено Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як підручник для здобувачів ступеня бакалавра
за спеціальністю 161 Хімічні технології та інженерія

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2024

УДК 519.6 + 519.2+517.9 + 66 (075.8)

Б81

Автори: *Бондаренко Сергій Григорович*, канд. техн. наук, доц.
Сангінова Ольга Вікторівна, канд. техн. наук, доц.
Шахновський Аркадій Маркусович, канд. техн. наук, доц.

Рецензенти: *Петров, С.В.*, д.т.н., с. н. с.,
Інститут газу НАН України
Орлик, С.М., д.х.н., професор, чл.-кор. НАН України,
Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського
Савченко, Д.В., д.ф.-м.н.,
КПІ ім. Ігоря Сікорського

Відповідальний редактор *Джигирей, І.М.*, к.т.н., доцент

*Гриф надано Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 5 від 13.05.2024 р.)*

Бондаренко С.Г.
Б81 Чисельні методи в хімії і хімічній технології [Електронний ресурс] : підруч. для здобувачів ступеня бакалавра за спец. 161 Хімічні технології та інженерія / С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова, А. М. Шахновський ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. –Електрон. текст. дані (1 файл). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 567 с.

Підручник призначений для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти, які навчаються за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія». Представлені матеріали мають за мету поглиблення та закріплення теоретичних знань з навчальної дисципліни «Чисельні методи в хімії та хімічній технології»; вивчення чисельних методів, які застосовуються для розв'язання типових інженерних задач хімії та хімічної технології, та комп'ютерні засоби їх реалізації.

У підручнику викладено теоретичні відомості з навчальної дисципліни «Чисельні методи в хімії та хімічній технології», наведено завдання до виконання комп'ютерних практикумів та розрахункової роботи, рекомендації щодо комп'ютерної реалізації наближених методів, а також містить питання для самопідготовки та посилання на літературу. Досвід, набутий здобувачами вищої освіти в процесі вивчення навчальної дисципліни «Чисельні методи в хімії та хімічній технології», буде також корисним при вивченні освітніх компонентів циклу професійної підготовки, в рамках яких передбачена обробка та аналіз результатів експериментальних досліджень, оцінка похибок при виконанні інженерних розрахунків та застосування чисельних методів для розв'язання практичних занять.

УДК 519.6 + 519.2+517.9 + 66 (075.8)

Реєстр. № П 23/24-032. Обсяг 28,3 авт. арк.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Берестейський, 37, м. Київ, 03056
<https://kpi.ua>

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

© С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова, А. М. Шахновський
© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024

ЗМІСТ

ВСТУП.....	9
1 ПОХИБКИ ВИМІРЮВАНЬ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ	11
1.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 1.....	11
1.2 ОЦІНЮВАННЯ (ПОРІВНЯННЯ) ПОХИБОК ВИМІРЮВАНЬ ТА РОЗРАХУНКІВ. АБСОЛЮТНА ТА ВІДНОСНА ПОХИБКИ	13
1.3 ДОСТОВІРНІСТЬ ЗАПИСУ ЧИСЕЛ	16
1.3.1 Правило округлення чисел	16
1.3.2 Значущі цифри числа. Правильні та сумнівні цифри чисел.....	18
1.3.3 Зв'язок між кількістю правильних значущих цифр і похибкою наближеного числа	23
1.4 ОЦІНЮВАННЯ ПОХИБОК, ЩО ВИНИКАЮТЬ ПІД ЧАС ВИМІРЮВАНЬ	26
1.4.1 Загальні правила представлення результатів вимірювань	26
1.5 ОЦІНЮВАННЯ ПОХИБОК, ЩО ВИНИКАЮТЬ ПІД ЧАС РОЗРАХУНКУ ДОВІЛЬНОГО ВИРАЗУ	27
1.5.1 Похибки простих арифметичних операцій.....	27
1.5.2 Похибки розрахунків за довільною формулою	30
1.5.3 Похибки при обчисленні функції.....	33
КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 1	35
2 РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ.....	39
2.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 2.....	39
2.2 МЕТОДИ ЛОКАЛІЗАЦІЇ КОРЕНІВ РІВНЯННЯ.....	42
2.3 МЕТОДИ УТОЧНЕННЯ КОРЕНІВ РІВНЯННЯ.....	49
2.3.1 Метод половинного поділу	50
2.3.2 Метод ітерацій	53
2.3.3 Метод Ньютона.....	58
КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 2	62
3 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ	66
3.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 3.....	66
3.2 ПРЯМІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ.....	72
3.2.1 Метод оберненої матриці	72
3.2.2 Метод Крамера	74
3.2.3 Метод Гауса	75
3.3 ІТЕРАЦІЙНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ.....	81
3.3.1 Метод простої ітерації	81
3.3.2 Ітераційний метод Гауса-Зейделя	85
3.4 МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ СПЕЦІАЛЬНОГО ВИГЛЯДУ. МЕТОД ТОМАСА	90
КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 3	95

4	РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ	98
4.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 4.....	98
4.2	ІТЕРАЦІЙНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ	101
4.2.1	<i>Метод простої ітерації</i>	<i>102</i>
4.2.2	<i>Метод Ньютона-Рафсона</i>	<i>107</i>
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 4	112
5	НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ.....	115
5.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 5.....	115
5.2	ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ.....	116
5.2.1	<i>Інтерполяційна формула Лагранжа.....</i>	<i>118</i>
5.2.2	<i>Інтерполяційні формули Ньютона</i>	<i>126</i>
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 5	150
6	НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЇ СПЛАЙНАМИ.....	154
6.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 6.....	154
6.2	ПРИНЦИПИ ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ КУБІЧНОГО СПЛАЙНУ	156
6.3	АЛГОРИТМ ОБЧИСЛЕННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ КУБІЧНОГО СПЛАЙНУ МЕТОДОМ ТОМАСА	158
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 6	164
7	НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ	167
7.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 7	167
7.2	ТОЧКОВЕ КВАДРАТИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ	168
7.2.1	<i>Вибір виду апроксимуючої функції.....</i>	<i>169</i>
7.2.2	<i>Визначення коефіцієнтів апроксимуючої функції</i>	<i>171</i>
7.3	ЛІНІЙНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ	172
7.4	КВАДРАТИЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ	177
7.5	КУБІЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ	183
7.6	НЕПОЛІНОМІАЛЬНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ	185
7.6.1	<i>Лінеаризація нелінійних залежностей</i>	<i>186</i>
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 7	202
8	ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ФУНКЦІЙ	205
8.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 8.....	205
8.2	ФОРМУЛИ ЧИСЕЛЬНОГО ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ, ЩО БАЗУЮТЬСЯ НА ПОНЯТТІ ПОХІДНОЇ.....	205
8.3	ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ПРИ ВИКОРИСТАННІ ІНТЕРПОЛЯЦІЙНИХ ФОРМУЛ	210
8.3.1	<i>Чисельне диференціювання на основі першої формули Ньютона.....</i>	<i>211</i>
8.3.2	<i>Чисельне диференціювання на основі другої формули Ньютона</i>	<i>216</i>
8.3.3	<i>Чисельне диференціювання на основі інтерполяційного багаточлена Лагранжа.....</i>	<i>219</i>
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 8	228

9	ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ	233
9.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 9	233
9.2	МЕТОД ПРЯМОКУТНИКІВ	235
9.2.1	Метод лівих прямокутників	236
9.2.2	Метод правих прямокутників	237
9.2.3	Метод середніх прямокутників	239
9.3	МЕТОД ТРАПЕЦІЙ	244
9.4	МЕТОД СІМПСОНА (МЕТОД ПАРАБОЛ)	249
9.5	ОБЧИСЛЕННЯ ІНТЕГРАЛА З ЗАДАНОЮ ТОЧНІСТЮ (ПОДВІЙНИЙ ПЕРЕРАХУНОК, ПРАВИЛО РУНГЕ)	254
9.6	ПОРІВНЯННЯ МЕТОДІВ ВИЗНАЧЕННЯ ІНТЕГРАЛА	257
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 9	257
10	РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ	261
10.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 10	261
10.2	ЗАГАЛЬНИЙ ПРИНЦИП РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧІ КОШІ ЧИСЕЛЬНИМИ МЕТОДАМИ. МЕТОД ЕЙЛЕРА	265
10.3	ШЛЯХИ ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ. УДОСКОНАЛЕННЯ МЕТОДУ ЕЙЛЕРА	270
10.4	МЕТОДИ РУНГЕ-КУТТИ	275
10.5	ПРИНЦИПИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ДИФЕРЕНЦІЙНОГО РІВНЯННЯ ДРУГОГО ТА БІЛЬШ ВИСОКИХ ПОРЯДКІВ	284
10.6	ПОНЯТТЯ ПРО ЖОРСТКІ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ	285
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 10	290
11	РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ	292
11.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 11	292
11.2	ЛІНІЙНА КРАЙОВА ЗАДАЧА	296
11.3	МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ	300
11.3.1	Зведення крайової задачі до задачі Коші. Метод стрільби	301
11.3.2	Методи скінченних різниць	305
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 11	321
12	ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ	327
12.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 12	327
12.2	ЗАГАЛЬНА КОНЦЕПЦІЯ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ. МЕТОД СІТОК	334
12.2.1	Особливості знаходження сіткової функції за явною схемою	341
12.2.2	Особливості знаходження сіткової функції за неявною схемою	342
12.3	ПОНЯТТЯ ПРО МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ	345
	КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 12	348
13	ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА ПРАВИЛА ТЕОРІЇ ІМОВІРНОСТЕЙ	350
13.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 13	350

13.1.1	Випадкові події.....	350
13.1.2	Основні правила теорії імовірностей	354
13.1.3	Імовірність появи хоча б однієї події з n незалежних подій.....	360
13.1.4	Формула повної імовірності.....	363
13.1.5	Формули Байєса	364
13.2	ПОВТОРЕННЯ ВИПРОБУВАНЬ.....	366
13.2.1	Формула Бернуллі	366
13.2.2	Найімовірніша кількість появи подій.....	367
13.2.3	Асимптотична формула Лапласа.....	368
13.2.4	Формула Пуассона для малоімовірних випадкових подій	371
13.3	ВИПАДКОВІ ВЕЛИЧИНИ	372
13.4	ЧИСЛОВІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН	378
13.5	ЗАКОНИ РОЗПОДІЛУ ДИСКРЕТНИХ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН	382
13.5.1	Біноміальний розподіл	382
13.5.2	Розподіл Пуассона	383
13.6	ЗАКОНИ РОЗПОДІЛУ НЕПЕРЕРВНИХ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН.....	384
13.6.1	Показниковий розподіл.....	384
13.6.2	Рівномірний розподіл.....	385
13.6.3	Нормальний розподіл.....	386
13.6.4	Правило трьох сігм	389
КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 13		390
14	ОСНОВИ МАТЕМАТИЧНОЇ СТАТИСТИКИ	394
14.1	ЗБІР СТАТИСТИЧНИХ ДАНИХ.....	394
14.2	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 14.....	396
14.3	ЧИСЛОВІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТАТИСТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ	400
14.4	СТАТИСТИЧНІ ОЦІНКИ ПАРАМЕТРІВ РОЗПОДІЛУ	407
14.5	ЗАСТОСУВАННЯ СТАТИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ ДО ІНТЕРПРЕТАЦІЇ ДАНИХ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ	411
14.6	ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРІЇ КОРЕЛЯЦІЇ.....	419
14.6.1	Лінійна кореляція	424
14.6.2	Нелінійна кореляція	435
14.6.3	Поняття по множинну кореляцію.....	440
14.7	СТАТИСТИЧНА ПЕРЕВІРКА СТАТИСТИЧНИХ ГІПОТЕЗ.....	440
14.7.1	Перевірка гіпотези відносно рівності двох дисперсій нормальних генеральних сукупностей.....	443
14.7.2	Перевірка гіпотези про рівність двох середніх нормальних генеральних сукупностей з невідомими дисперсіями.....	445
14.7.3	Перевірка гіпотези про нормальний розподіл генеральної сукупності. Критерій узгодженості Пірсона.....	447
КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 14		451
15	РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО КОМП'ЮТЕРНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ.....	457
15.1	ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 15.....	457
15.2	РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ.....	457
15.3	РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ.....	460
15.4	ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДУ ЛАГРАНЖА В СЕРЕДОВИЩІ VBA	461
15.5	ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ АПРОКСИМАЦІЇ ЗА МНК.....	464

15.6 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ В СЕРЕДОВИЩІ VBA	466
15.7 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В СЕРЕДОВИЩІ VBA	472
16 ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ ДО КОМП'ЮТЕРНОГО ПРАКТИКУМУ	474
16.1 ПОХИБКИ ВИМІРЮВАНЬ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ.....	474
16.1.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>474</i>
16.1.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>475</i>
16.1.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>476</i>
16.2 РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАІЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ	481
16.2.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>481</i>
16.2.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>482</i>
16.2.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>482</i>
16.3 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАІЧНИХ РІВНЯНЬ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ.....	483
16.3.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>483</i>
16.3.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>484</i>
16.3.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>484</i>
16.4 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	486
16.4.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>486</i>
16.4.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>487</i>
16.4.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>487</i>
16.5 ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ	489
16.5.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>489</i>
16.5.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>490</i>
16.5.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>490</i>
16.6 НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЇ СПЛАЙНАМИ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	493
16.6.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>493</i>
16.6.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>493</i>
16.6.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>494</i>
16.7 ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	498
16.7.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>498</i>
16.7.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>499</i>
16.7.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>499</i>
16.8 ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ.....	502
16.8.1 <i>Послідовність виконання практикуму</i>	<i>502</i>
16.8.2 <i>Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту</i>	<i>503</i>
16.8.3 <i>Варіанти індивідуальних завдань</i>	<i>503</i>

16.9	ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ	505
16.9.1	Послідовність виконання практикуму	505
16.9.2	Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту	506
16.9.3	Варіанти індивідуальних завдань	506
16.10	РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	508
16.10.1	Послідовність виконання практикуму	508
16.10.2	Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту	509
16.10.3	Варіанти індивідуальних завдань	509
16.11	ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	512
16.11.1	Послідовність виконання практикуму	512
16.11.2	Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту	513
16.11.3	Варіанти індивідуальних завдань	513
16.12	ПЕРВИННА СТАТИСТИЧНА ОБРОБКА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ	515
16.12.1	Послідовність виконання практикуму	515
16.12.2	Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту	516
16.12.3	Варіанти індивідуальних завдань	516
16.13	ОСНОВИ КОРЕЛЯЦІЙНОГО АНАЛІЗУ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ	519
16.13.1	Послідовність виконання практикуму	519
16.13.2	Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту	519
16.13.3	Варіанти індивідуальних завдань	520
17	МАТЕМАТИЧНЕ ОПРАЦЮВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ	523
17.1	ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ	523
17.2	СТРУКТУРА І ЗМІСТ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ	526
17.3	ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ	526
17.4	ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ	527
	ЛІТЕРАТУРА	538
	ДОДАТКИ	542
	ДОДАТОК А. ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНОГО АНАЛІЗУ ЯК МЕТРОЛОГІЧНОЇ ПРОЦЕДУРИ	542
	ДОДАТОК Б. СХЕМА ЄДИНОГО ДІЛЕННЯ	546
	ДОДАТОК В. АНАЛІТИЧНИЙ МЕТОД ВИБОРУ ВИДУ АПРОКСИМУЮЧОЇ ФУНКЦІЇ	550
	ДОДАТОК Г. ЕЛЕМЕНТИ КОМБІНАТОРИКИ	559
	ДОДАТОК Д. ПОНЯТТЯ ПРО МОМЕНТИ ВИПАДКОВОЇ ВЕЛИЧИНИ	561
	ДОДАТОК Е. ТИПИ ГІСТОГРАМ	563

ВСТУП

*Славі Вікторівні Брановицькій,
основоположнику викладання чисельних методів
для хіміків-технологів в КПІ ім. Ігоря Сікорського*

Пропонований підручник призначений для фахівців: здобувачів вищої освіти, науковців, інженерів, які прагнуть глибше розуміти та впроваджувати чисельні методи розрахунку у вирішенні прикладних інженерних й наукових проблем хімічної технології та інженерії.

Основною метою підручника є надання здобувачам освіти та науковцям знань та вмінь застосовувати чисельні методи для наближеного розв'язування математичних завдань. Завдяки системному підходу до подачі навчального матеріалу, читач матиме змогу засвоїти чисельні методи та використовувати їх у розв'язуванні реальних задач прикладного та наукового характеру.

Чисельні методи застосовуються на різних етапах інженерно-наукової діяльності фахівця з хімічної технології та інженерії. Зокрема, вирішення задач хімії і хімічної технології за допомогою методів комп'ютерного моделювання передбачає етапи 1) вивчення об'єкта та формулювання змістовної (фізико-хімічної, технічної тощо) постановки задачі: аналіз властивостей об'єкта дослідження, визначення основних параметрів, що надають на ці властивості найбільш істотний вплив; 2) математичної постановки задачі, у процесі якої здійснюється побудова математичної моделі об'єкта (відображення основних властивостей об'єкта мовою математики) у вигляді системи математичних співвідношень – рівнянь, нерівностей тощо; 3) вибору методів (алгоритмів) розв'язання математичної задачі; у деяких, найпростіших випадках вдається побудувати аналітичне розв'язання задачі (наприклад, знайти загальний розв'язок звичайного диференціального рівняння), проте в більшості випадків аналітичний розв'язок не є можливим, і для розв'язання математичної задачі застосовуються *чисельні методи*; 4) розробки комп'ютерної моделі для розв'язання математичної задачі на комп'ютері обраними чисельними методами з використанням того чи іншого програмного забезпечення або

середовища програмування; 5) обчислювальних експериментів з комп'ютерною моделлю та аналізу їх результатів.

Відповідно до виду математичної моделі, найчастіше розрізняють такі базові типи математичних задач, для розв'язання яких можуть бути використані чисельні методи:

- розв'язання нелінійних алгебраїчних рівнянь та їх систем;
- розв'язання систем лінійних рівнянь;
- чисельне інтегрування і диференціювання;
- розв'язання звичайних диференціальних рівнянь;
- розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних та ін.

Найчастіше разом зі згаданими методами розв'язання математичних задач вивчають також поширені методи опрацювання експериментальних даних:

- оцінювання похибок вимірювань та обчислень;
- статистичне опрацювання експериментальних даних (наприклад, визначення зв'язку між різними величинами, відсіювання помилкових вимірювань тощо);
- побудова за експериментальними даними математичного виразу (наприклад, інтерполювання, апроксимація даних поліномом) та ін.

Структура підручника відповідає наведеним вище базовим типам завдань у відповідності до силябусу курсу «Чисельні методи в хімії і хімічній технології», який протягом тривалого часу викладається авторами в КПІ ім. Ігоря Сікорського. В кожному з основних розділів підручника необхідні теоретичні відомості супроводжуються ілюстративними прикладами практичної спрямованості. Кожний з основних розділів містить контрольні питання та вправи прикладного характеру.

Підручник присвячений в першу чергу здобувачам вищої освіти бакалаврського освітньо-кваліфікаційного рівня, але буде корисним також для студентів магістратури й аспірантури, науковців і виробників.

Автори висловлюють щире подяку рецензентам та колегам, які взяли участь в обговоренні матеріалу підручника і цим сприяли його покращенню.

1 ПОХИБКИ ВИМІРЮВАНЬ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ

1.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 1

У ході розрахунків завжди покладають, що дані (числа) у розрахунках є не точними, а *наближеними*, тобто такими, що відрізняються від «ідеальних» точних даних відомим, врахованим дослідником значенням неточності (похибки).

Достовірність (і, отже, корисність) результатів складних багатостадійних розробок суттєво залежить від того, які з похибок (неточностей) мають місце на різних етапах таких розробок. Грамотне врахування похибок вимірювань та обчислень дає змогу усунути такі неточності або мінімізувати їх вплив на остаточний результат.

Можна виділити три категорії помилок, які впливають на результат досліджень [1, 11, 17]:

1. Похибки у чисельних вихідних даних для розрахунків (через недостатню точність вимірювальних приладів, суб'єктивні (особисті) якості експериментатора – обмеженість можливостей органів чуття, стомлення, недостатність кваліфікації) тощо.

Науково обґрунтовані правила виконання вимірювань задля забезпечення їх максимальної точності і об'єктивності вивчає Метрологія. Очевидно, що на етапі проведення обчислень у вихідних даних виправити неможливо. Тому у літературі з чисельних методів такі похибки часто називають *невиправними (неусувними)*.

До невивиправних з точки зору методів обчислень належать також похибки, які виникають через невідповідність математичної постановки задачі досліджуваному реальному явищу (неточність визначення коефіцієнтів математичного опису задачі, використання спрощених математичних моделей тощо).

2. Похибки результатів обчислень можуть виникнути внаслідок застосування наближеного чисельного методу розрахунку. У розрахунковій

практиці для отримання попереднього (грубо наближеного) розв’язання іноді застосовують швидкодіючі, але низькоточні чисельні методи (наприклад, метод Ейлера для розв’язання звичайних диференціальних рівнянь). *Похибки методу* вдається усунути або зменшити шляхом збільшення «ступеня дискретизації», «докладності» розрахунків (зокрема, зменшенням розрахункового кроку), або застосуванням для розрахунків іншого методу.

3. Насамкінець, похибки виникають безпосередньо в ході розрахунків через округлення вихідних чисельних даних, проміжних та кінцевих результатів. Такі похибки вдається контролювати шляхом використання у розрахунках математично обґрунтованої *кількості десяткових знаків* у дробовій частині чисел, які беруть участь у розрахунках. Приклад накопичення похибки у ланцюжку розрахунків внаслідок округлення проміжних результатів наведено на рис. 1.1.

i	x_i	$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^2}{100}$	i	x_i (округл.)	$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^2}{100}$
0	0,10000000000000	0,09900000000000	0	0,1000	0,099000000000
1	0,09900000000000	0,09801000000000	1	0,9900	0,980100000000
2	0,09801000000000	0,09702990000000	2	0,9800	0,970200000000
3	0,09702990000000	0,09605960100000	3	0,9700	0,960300000000
4	0,09605960100000	0,09509900499000	4	0,9600	0,950400000000
5	0,09509900499000	0,09414801494010	5	0,9500	0,940500000000
6	0,09414801494010	0,09320653479070	6	0,9410	0,931590000000
7	0,09320653479070	0,09227446944280	7	0,9320	0,922680000000
8	0,09227446944280	0,09135172474840	8	0,9230	0,913770000000
9	0,09135172474840	0,09043820750090	9	0,9140	0,904860000000
10	0,09043820750090	0,08953382542590	10	0,9050	0,895950000000

а)

б)

Рис. 1.1. Накопичення похибки розрахунків внаслідок округлення проміжних результатів: а – розрахунки із використанням «точного значення» x_i ; б – розрахунки із використанням округленого значення x_i .

Сутність розрахунків полягає у послідовному знаходженні «наступних» значень деякої змінної x_{i+1} підстановкою «попереднього» значення вказаної змінної x_i до певної рекурентної розрахункової формули; на наступному кроці розрахунків знайдене значення береться в якості «попереднього», яке знову підставляють до рекурентної розрахункової формули і т.д.¹ На рис. 1.1, а, представлено результати «високоточного» розрахунку, коли значення

¹ Описаний підхід лежить в основі *методів ітерацій*, які будуть розглянуті нижче у відповідних розділах.

$x_1=0,0990000000$ (знайдене при $i=0$) підставляється до розрахункової формули без попереднього округлення для отримання значення $x_2 = 0,0980100000$ і т. д.

На рис. 1.1, б, значення $x_1=0,0990000000$ (знайдене при $i=0$) підставляється до розрахункової формули в округленому вигляді $x_{1(округл)}=0,09900$ з отриманням значення $x_2=0,0980100000$, потім значення $x_2=0,0980100000$ (знайдене при $i=1$) підставляється до розрахункової формули в округленому вигляді $x_{2(округл)}=0,09800$ з отриманням значення $x_3 = 0,0970200000$ і т. д.

Внаслідок округлення проміжних результатів значення x_{11} , знайдене при $i=10$ рис. 1.1, б, суттєво відрізняється від результату «високоточного» розрахунку (рис. 1.1, а): $0,08955338254259 \neq 0,08959500000$.

1.2 ОЦІНЮВАННЯ (ПОРІВНЯННЯ) ПОХИБОК ВИМІРЮВАНЬ ТА РОЗРАХУНКІВ. АБСОЛЮТНА ТА ВІДНОСНА ПОХИБКИ

При розв'язку завдань з хімічної технології зазвичай оперують з наближеними значеннями тих або інших величин (наближеними числами). *Наближеним* називається число, що трохи відрізняється від точного і замінює його в обчисленнях [1].

Наближене число має практичну цінність лише тоді, коли можна вказати ступінь його точності, тобто оцінити його похибку.

Під *похибкою* розуміють величину, що характеризує точність деякого параметру або результату обчислень [1, 11, 18].

Так похибкою наближеного числа a є різниця між значенням точного числа x і його наближеним значенням a : $\Delta a = x - a$. В залежності від співвідношення x та a значення похибки може бути від'ємним або додатнім числом. Коли знак похибки інтересу не представляє, то точність характеризують абсолютною похибкою.

Абсолютною похибкою наближеного числа a називається абсолютна величина різниці між точним числом x і його наближеним значенням a [1]:

$$\Delta = |x - a|. \quad (1.1)$$

Точне значення величини x зазвичай невідоме. І тоді визначення абсолютної похибки можемо за формулою (1.1) неможливе. В такому випадку розглядають верхню оцінку абсолютної похибки – граничну абсолютну похибку Δa .

Граничною абсолютною похибкою називається додатне число Δa , яке не менше абсолютної похибки цього числа [1]:

$$\Delta \leq \Delta a.$$

Наближене число, що отримане в результаті вимірювання, можна записати у вигляді [1]:

$$x = a \pm \Delta a. \quad (1.2)$$

Приклад 1.1. Якщо наближене значення ваги хімічної речовини становить 13,138 г і отримане воно з точністю 0,0005г, то можна записати:

$$m = \underbrace{13,138}_a \pm \underbrace{0,0005}_{\Delta a} \text{ г.}$$

Точне значення ваги хімічної речовини буде знаходитись у межах:

$$13,138 - 0,0005 \leq m \leq 13,138 + 0,0005 \quad (13,1375 \leq m \leq 13,1385).$$

Абсолютна і гранична абсолютна похибки є величинами розмірними. Вони мають таку розмірність, що і оцінювана нею величина.

Абсолютна і гранична абсолютна похибки наближеного числа a не завжди є зручною характеристикою ступеня точності числа і не завжди дають повну характеристику точності результату обчислень.

Наприклад, абсолютна похибка в 1 мм – мізерна при оцінці відстані від Києва до Львова, але є грубою (навіть абсурдною) для відстані між молекулами хімічної речовини.

Тому крім величини абсолютної похибки застосовується ще одна

характеристика похибки наближеної величини – відносна похибка.

Відотною похибкою δ наближеного числа a називається відношення абсолютної похибки Δ цього числа до модуля відповідного точного числа x ($x \neq 0$) [1]:

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

Оскільки точне число x часто невідоме, то при розрахунку відносної похибки його заміняють наближеним числом a . Тоді:

$$\delta = \frac{\Delta}{|a|}. \quad (1.4)$$

За аналогією, за граничну відносну похибку δa наближеного числа може бути взяте додатне число, що задовольняє умові [1]:

$$\delta \leq \delta a.$$

Граничну відносну похибку δa можна вважати рівною відношенню граничної абсолютної похибки Δa до модуля точного (або наближеного) числа [1, 11, 17-19]:

$$\delta a = \frac{\Delta a}{|x|} \text{ або } \delta a = \frac{\Delta a}{|a|}. \quad (1.5)$$

Відносна та гранична відносна похибки є величинами безрозмірними або наводяться у відсотках. Наприклад,

$$\delta a = \frac{\Delta a}{|a|} \cdot 100 \%. \quad (1.6)$$

З формули визначення відносної похибки (1.5) отримують формулу зв'язку між похибками:

$$\Delta_a = \delta a \cdot |a|. \quad (1.7)$$

Приклад 1.2. При вимірюванні тиску у 0,79 атмосфери отримане наближене значення тиску, що становить 0,785 атмосфери. Знайти значення абсолютної і відносної похибок вимірювання.

Розв'язок: знайдемо значення абсолютної похибки вимірювання:

$$\Delta = |x - a| = |0,79 - 0,785| = 0,005.$$

Знайдемо значення відносної похибки вимірювання:

$$\delta a = \frac{\Delta a}{|x|} = \frac{0,005}{0,79} = 0,0063 = 0,63 \, \%.$$

1.3 ДОСТОВІРНІСТЬ ЗАПISУ ЧИСЕЛ

1.3.1 Правило округлення чисел

Для того, щоб округлити число до n -ої цифри, відкидають всі цифри, що стоять праворуч від n -ої цифри.

Округлення чисел виконують за такими правилами [1, 17, 18]:

1. Якщо перша з цифр, що відкидається менша за 5, то остання з цифр, що залишається, не змінюється.

Наприклад. Округлити число 125,5731 до двох десяткових знаків (до сотих).

Остання цифра, що залишається 7, а перша з цифр, що відкидається 3 (менша за 5). Результат округлення: 125,57.

2. Якщо перша з цифр, яка відкидається більша за 5, то остання з цифр, що залишається, збільшується на одиницю.

Наприклад. Округлити число 38,76 до одного десяткового знаку (до десятих).

Остання цифра, що залишається 7, а перша з цифр, що відкидається 6 (більша за 5). Результат округлення: 38,8.

3. Якщо перша з цифр, яка відкидається, дорівнює 5 і серед наступних за нею цифр є відмінні від нуля цифри, остання з цифр, що залишається, збільшується на одиницю.

Наприклад. Округлити число 38,25674 до одного десяткового знаку (до

десятих).

Остання цифра, що залишається 2, а перша з цифр, яка відкидається, дорівнює 5 і серед наступних за нею цифр є відмінні від нуля цифри. Результат округлення: 38,3.

4. Якщо перша з цифр, яка відкидається дорівнює 5 і за нею записані нулі, то остання з цифр, що залишилися:

4.1) залишається незмінною якщо вона парна;

4.2) збільшується на одиницю, якщо вона непарна.

Це округлення за правилом парної цифри.

Наприклад. Округлити числа 18,6500 та 18,7500 до одного десяткового знаку (до десятих).

Округлимо число 18,6500.

Остання цифра, що залишається 6, а перша з цифр, яка відкидається дорівнює 5 і за нею записані нулі.

Результат округлення: 18,6 (цифра 6 залишається незмінною, бо вона парна).

Округлимо число 18,7500.

Остання цифра, що залишається 7, а перша з цифр, яка відкидається дорівнює 5 і за нею записані нулі.

Результат округлення: 18,8 (цифра збільшується на одиницю, бо вона непарна).

При округленні наближеного числа a отримуємо нове наближене число a_1 , гранична абсолютна похибка якого дорівнює сумі граничної абсолютної похибки числа a і похибки округлення, тобто

$$\Delta_{a1} = \Delta_a + \Delta_{\text{окр.}} \quad (1.8)$$

Приклад 1.3. Округлюючи число x до трьох значущих цифр, визначити абсолютну Δ і відносну δ похибки отриманих наближених чисел:

а) $x = 4,3576$; б) $x = 0,03725$

Розв'язок:

а) Округлюючи число $x = 4,3576$ до трьох значущих цифр, отримаємо $a = 4,36$. Обчислимо абсолютну та відносну похибки за формулами (1.1) та (1.5):

$$\Delta = |x - a| = |4,3576 - 4,36| = 0,0024;$$

$$\delta = \frac{\Delta}{|x|} = \frac{0,0024}{4,3576} = 5,508 \cdot 10^{-4} = 0,055 \ %.$$

б) Округлюючи число $x = 0,03725$ до трьох значущих цифр, отримаємо $a = 0,0372$, звідки

$$\Delta = |x - a| = |0,03725 - 0,0372| = 0,00005 = 0,5 \cdot 10^{-4};$$

$$\delta = \frac{\Delta}{|x|} = \frac{0,5 \cdot 10^{-4}}{0,03725} = 0,00132 = 0,132 \ %.$$

1.3.2 Значущі цифри числа. Правильні та сумнівні цифри чисел

Значущими цифрами наближеного числа називають всі цифри в його запису, починаючи з першої ненульової зліва [1].

Наприклад.

У числі 0,003082 перші три нулі не є значущими цифрами. Всі інші цифри є значущими (3,0,8,2).

У числі 12,60003 усі цифри є значущими. У числі 0,0308200 перші два нулі не є значущими цифрами, а всі інші цифри є значущими включаючи і останні два нулі, що записані після цифри 4. У числі 1,0005700 усі цифри є значущими.

При роботі з великими числами нулі в кінці числа можуть бути залишені як для позначення значущих цифр, так і для визначення розрядів інших цифр. При зміні форми запису числа кількість значущих цифр не повинна змінюватися. Для цього необхідно зберігати рівносильність перетворень. Наприклад, числа 2500 та $0,2500 \cdot 10^4$ рівносильні; числа $0,670 \cdot 10^2$ та 67,0 також рівносильні, а записи 2500 і $0,25 \cdot 10^4$ та $0,670 \cdot 10^2$ і 67 вже не рівносильні.

Окрім поняття значущих цифр, чисельні методи оперують із поняттям

правильних значущих цифр наближеного числа. Це важливо тому, що степінь точності наближеного числа характеризується числом його вір правильних значущих цифр.

Цифра числа називається *правильною значущою* (у вузькому або строгому сенсі), якщо абсолютна похибка числа не перевищує $\frac{1}{2}$ одиниці розряду, що відповідає цій цифрі [1]:

$$\Delta \leq 0,5 \cdot 10^k, \quad (1.9)$$

де k – номер розряду.

Значущі цифри числа для розрядів, де умова (1.9) не виконується, називаються сумнівними.

Тоді якщо $\Delta \leq 0,5 \cdot 10^k$, то всі цифри числа, починаючи з першої значущої та закінчуючи тією цифрою, що знаходиться в k розряді будуть правильними значущими, а розташовані далі (справа) – *сумнівними*.

Таким чином, усі значущі цифри, що розташовані ліворуч від правильної значущої цифри, також будуть правильними значущими, а ті, що розташовані праворуч від сумнівної – будуть сумнівними.

Приклад 1.4. Визначити кількість правильних значущих цифр числа 72,5419, якщо відома його абсолютна похибка $\Delta = 0,002$ ($\Delta = 0,2 \cdot 10^{-2}$).

Розв'язок: Задачу можна вирішити послідовно перевіряючи кожен цифру заданого числа на виконання умови (1.9) до тих пір, доки не зустрінеться перша сумнівна цифра. Всі інші цифри справа за першою сумнівною також будуть сумнівними.

Перевіримо першу цифру числа – 7. Половина одиниці її розряду: $10^{1/2} = 10/2 = 5$. Відповідно: $0,2 \cdot 10^{-2} < 5$. Тоді цифра 7 – правильна значуща.

Перевіримо другу цифру числа – 2. Половина одиниці її розряду: $10^{0/2} = 1/2 = 0,5$. Відповідно: $0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5$. Тоді цифра 2 – правильна значуща.

Перевіримо третю цифру числа – 5. Половина одиниці її розряду: $10^{-1/2} = 0,1/2 = 0,05$ ($0,5 \cdot 10^{-1}$). Відповідно: $0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-1}$. Тоді цифра 5 – правильна значуща.

Перевіримо четверту цифру числа – 4. Половина одиниці її розряду:
 $10^{-2}/2 = 0,01/2 = 0,005$ ($0,5 \cdot 10^{-2}$). Відповідно: $0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-2}$. Тоді цифра 4 – правильна значуща.

Перевіримо п'яту цифру числа – 1. Половина одиниці її розряду:
 $10^{-3}/2 = 0,001/2 = 0,0005$ ($0,5 \cdot 10^{-3}$). У цьому випадку умова (1.9) не виконується – $0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-3}$. Тоді цифра 1 – сумнівна. Шоста цифра – 9, що розташована справа за першою сумнівною цифрою також буде сумнівною.

Отже, правильні значущі цифри числа $72,5419 - 7,2,5, 4$ (їх кількість 4), а сумнівні – 1,9 (їх кількість 2).

Це завдання можна вирішити простіше, якщо відразу перевірити цифру, що відповідає розряду похибки $\Delta = 0,2 \cdot 10^{-2}$. Це цифра – 4.

Перевіримо умову: $0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-2}$. Цифра 4 – правильна значуща.

Перевіримо наступну цифру числа – 1. Перевіримо умову:

$0,2 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-3}$ – умова (1.9) не виконується. Цифра 1 $0,5 \cdot 10^{-1}$ сумнівна. Таким чином, цифри зліва від 1 – записані правильні значущі цифри числа, а цифра 1 і наступні є сумнівними.

Приклад 1.5. Визначити кількість правильних значущих цифр для наближених чисел:

- 1) число $a = 15,267$ при абсолютній похибці $\Delta = 0,03$ ($\Delta = 0,3 \cdot 10^{-1}$);
- 2) число $b = 5,426731$ при абсолютній похибці $\Delta = 0,0004$ ($\Delta = 0,4 \cdot 10^{-3}$);
- 3) число $c = 8,5409$ при абсолютній похибці $\Delta = 0,006$ ($\Delta = 0,6 \cdot 10^{-2}$);
- 4) число $d = 0,026731$ при абсолютній похибці $\Delta = 0,002$ ($\Delta = 0,22 \cdot 10^{-2}$);
- 5) число $f = 6731$ при абсолютній похибці $\Delta = 38$ ($\Delta = 0,38 \cdot 10^2$).

Розв'язок:

1) Похибка числа $\Delta = 0,3 \cdot 10^{-1}$ і тому перевіримо в заданому числі (15,267) цифру 2, що відповідає розряду похибки. Половина одиниці розряду цифри 2 становить $10^{-1}/2 = 0,1/2 = 0,05$ ($0,5 \cdot 10^{-1}$). Перевіримо умову (1.9):

$0,3 \cdot 10^{-1} < 0,5 \cdot 10^{-1}$ – умова виконується і цифра 2 правильна значуща. Також правильні значущі і всі цифри числа, що записані перед цифрою 2.

Перевіримо наступну цифру числа – 6. Перевіримо умову:

$0,3 \cdot 10^{-1} < 0,5 \cdot 10^{-2}$ – умова (1.9) не виконується. Цифра 6 – сумнівна. Також

сумнівні і всі значущі цифри числа, що записані після цифри 6.

Таким чином, правильні значущі числа 1,5,2 (їх кількість 3), а сумнівні – 6,7 (їх кількість 2).

2) Похибка числа $\Delta=0,4 \cdot 10^{-3}$ і тому перевіримо в заданому числі (5,426731) цифру 6, що відповідає розряду похибки. Половина одиниці розряду цифри 6 становить $10^{-3}/2 = 0,001/2 = 0,0005$ ($0,5 \cdot 10^{-3}$). Перевіримо умову (1.9): $0,4 \cdot 10^{-3} < 0,5 \cdot 10^{-3}$ – умова виконується і цифра 6 правильна значуща. Також правильні і всі значущі цифри числа, що записані перед цифрою 6.

Перевіримо наступну цифру числа – 7. Перевіримо умову:

$0,4 \cdot 10^{-3} < 0,5 \cdot 10^{-4}$ – умова (1.9) не виконується. Цифра 7 – сумнівна. Також сумнівні і всі значущі цифри числа, що записані після цифри 7.

Таким чином, правильні значущі числа 5,4,2,6 (їх кількість 4), а сумнівні – 7,3,1 (їх кількість 3).

3) Похибка числа $\Delta=0,6 \cdot 10^{-2}$ і тому перевіримо в заданому числі (8,5409) цифру 4, що відповідає розряду похибки. Половина одиниці розряду цифри 4 становить $10^{-2}/2 = 0,01/2 = 0,005$ ($0,5 \cdot 10^{-2}$). Перевіримо умову (1.9):

$0,6 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-2}$ – умова не виконується – цифра 4 сумнівна. Також сумнівні всі значущі цифри числа, що записані після цифри 4.

Перевіримо попередню цифру числа – 5, яка стоїть перед цифрою 4. Половина одиниці розряду цифри 5 становить $10^{-1}/2 = 0,1/2 = 0,05$ ($0,5 \cdot 10^{-1}$).

Перевіримо умову (1.9): $0,6 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-1}$ ($5 \cdot 10^{-2}$) – умова виконується і цифра 5 правильна значуща. Також правильні і всі значущі цифри числа, що записані перед цифрою 5.

Таким чином, правильні значущі числа 8,5 (їх кількість 2), а сумнівні – 4,0,9 (їх кількість 3).

4) Похибка числа $\Delta=0,22 \cdot 10^{-2}$ і тому перевіримо в заданому числі (0,026731) цифру 2, що відповідає розряду похибки. Половина одиниці розряду цифри 2 становить $10^{-2}/2 = 0,01/2 = 0,005$ ($0,5 \cdot 10^{-2}$). Перевіримо умову (1.9): $0,22 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-2}$ – умова виконується і цифра 2 правильна значуща. Значущі цифри числа перед цифрою 2 відсутні.

Розглянемо наступну цифру числа 6. Перевіримо умову:

$0,22 \cdot 10^{-2} < 0,5 \cdot 10^{-3}$ ($0,05 \cdot 10^{-2}$) – умова (1.9) не виконується. Цифра 6 – сумнівна. Також сумнівні і всі значущі цифри числа, що записані після цифри 6.

Таким чином, правильна значуща цифра числа 2 (кількість – 1), а сумнівні цифри –6,7,3,1 (їх кількість 4).

5) Похибка числа $\Delta = 0,38 \cdot 10^2$ і тому перевіримо в заданому числі (6731) цифру 7, що відповідає розряду похибки. Половина одиниці розряду цифри 7 становить $10^2/2 = 100/2 = 50$ ($0,5 \cdot 10^2$). Перевіримо умову (1.9):

$0,38 \cdot 10^2 < 0,5 \cdot 10^2$ – умова виконується і цифра 7 правильна значуща. Також правильні значущі і всі цифри числа, що записані перед цифрою 7.

Перевіримо наступну цифру числа – 3. Перевіримо умову:

$0,38 \cdot 10^2 < 0,5 \cdot 10^1$ – умова (1.9) не виконується. Цифра 3 – сумнівна. Також сумнівні і всі значущі цифри числа, що записані після цифри 3.

Таким чином, правильні значущі числа 6,7 (їх кількість 2), а сумнівні – 3,1 (їх кількість 2).

З курсу математики відомо, що число x може бути представлено у вигляді скінченного або нескінченного десяткового дробу:

$$x = \alpha_1 \cdot 10^m + \alpha_2 \cdot 10^{m-1} + \alpha_3 \cdot 10^{m-2} + \dots + \alpha_n \cdot 10^{m-n+1} + \dots, \quad (1.10)$$

де α_i – цифри числа x ($i = 1, 2, 3, 4, 5 \dots n$) при $\alpha_1 \neq 0$; n – кількість цифр у числі; m – деяке ціле число, рівне ступеню числа 10 старшого розряду числа x (старший десятковий розряд).

Як видно з наведеної формули значення одиниці n -го десяткового розряду дорівнює 10^{m-n+1} .

З урахуванням (1.9) та (1.10) можна сказати, що n перших значущих цифр наближеного числа є правильними значущими (у вузькому або строгому сенсі), якщо абсолютна похибка цього числа не перевищує половини одиниці розряду, який виражається n -ою значущою цифрою (рахуючи зліва направо).

$$\Delta \leq 0,5 \cdot 10^{m-n+1} \quad (1.11)$$

Примітка. У наближених обчисленнях досить часто використовується і

поняття правильної значущої цифри, в широкому (нестрогому) сенсі. В цьому випадку цифра числа називається правильною значущою в широкому (нестрогому) сенсі, якщо абсолютне значення похибки числа не перевищує одиниці розряду, що відповідає цій цифрі:

$$\Delta \leq 1,0 \cdot 10^k. \quad (1.12)$$

Або з урахуванням (1.10):

$$\Delta \leq 1,0 \cdot 10^{m-n+1}. \quad (1.13)$$

В подальших розрахунках правильні цифри наближеного числа будемо розуміти у вузькому сенсі, якщо не зроблено застереження про виконання розрахунків у широкому (нестрогому) сенсі.

Зазвичай при виконанні розрахунків остаточний наближений результат найчастіше округлюють до його правильних цифр, залишаючи одну сумнівну цифру.

Зауваження. У більшості випадків при роботі з наближеними числами можна стверджувати, що правильні значущі цифри наближеного числа збігаються з відповідними цифрами числами точного. Але є випадки, коли цього може не бути. Наприклад, нехай точне число $x=1,999$, а його наближене значення $a=2,000$. Тоді абсолютна похибка числа становитиме

$\Delta = |x - a| = |1,999 - 2,000| = 0,001$. Визначення правильних значущих цифр показує, що три перші цифри числа a є правильними значущими, хоча жодна їх не збігається з відповідною цифрою числа x .

1.3.3 Зв'язок між кількістю правильних значущих цифр і похибкою наближеного числа

Якщо відома абсолютна похибка наближеного числа, то можна визначити правильні значущі цифри у його запису, за формулами (1.9) та (1.11), що розглянуто вище.

Досить часто числові дані наводяться без оцінки їх похибок. У математичних та інших довідниках для констант наводяться тільки правильні

цифри. Часто виникає потреба знаходження абсолютних похибок цих чисел, які необхідні для подальшого обліку похибок. В такому випадку за кількістю правильних значущих цифр наближеного числа легко визначити його граничну абсолютну похибку, скориставшись нерівностями (1.9) та (1.11). Для визначення граничної абсолютної похибки наближеного числа скористаємось таким правилом: за граничну абсолютну похибку наближеного числа з відомими правильними цифрами приймається половина одиниці того розряду, де знаходиться остання правильна цифра. Тоді для визначення абсолютної похибки можна використати одну з формул [1, 5, 12]:

$$\Delta a = 0,5 \cdot 10^k, \quad (1.14)$$

$$\Delta a = 0,5 \cdot 10^{m-n+1}. \quad (1.15)$$

Приклад 1.6. Визначити граничні абсолютні похибки таких чисел:

а) 4,18; б) 82,381; в) 0,05742 за умови, що всі цифри числа є правильними значущими.

Розв'язок:

а) для числа 4,18, що має три правильні цифри, остання цифра знаходиться в розряді сотих. Тоді у відповідності до (1.14) $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{-2}$.

При використанні (1.15): $n = 3$, $m = 0$ і тоді $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{0-3+1} = 0,5 \cdot 10^{-2}$.

б) для числа 82,381, що має п'ять правильних цифр, остання цифра знаходиться в розряді тисячних. Тоді у відповідності до (1.14) $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{-3}$.

При використанні (1.15): $n = 5$, $m = 1$ і тоді $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{1-5+1} = 0,5 \cdot 10^{-3}$.

в) 0,05742, що має чотири правильні цифри, остання цифра знаходиться в розряді стотисячних. Тоді у відповідності до (1.14) $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{-5}$.

При використанні (1.15): $n = 4$, $m = -2$ і тоді $\Delta a = 0,5 \cdot 10^{-2-4+1} = 0,5 \cdot 10^{-5}$.

Примітка. У наближених обчисленнях при використанні поняття правильної значущої цифри, в широкому (нестрогому) сенсі формули для обчислення абсолютних похибок матимуть вигляд: $\Delta a = 1,0 \cdot 10^k$ та $\Delta a = 1,0 \cdot 10^{m-n+1}$.

За кількістю правильних значущих цифр наближеного числа a можна визначити також і його граничну відносну похибку за формулою:

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 \cdot 10^{n-1}}, \quad (1.16)$$

де α_1 – перша значуща цифра наближеного числа; n – кількість правильних значущих цифр.

Приклад 1.7. Визначити граничні відносні похибки таких чисел:

а) 5,17; б) 82,381; в) 0,001243 за умови, що всі цифри числа є правильними значущими.

Розв’язок:

а) для числа 5,17, що має три правильні цифри: $n = 3$; $\alpha_1 = 5$ – перша значуща цифра наближеного числа. Тоді у відповідності до (1.16):

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 \cdot 10^{n-1}} = \frac{1}{2 \cdot 5 \cdot 10^{3-1}} = 1 \cdot 10^{-3}.$$

б) для числа 82,381, що має п’ять правильних цифр: $n = 5$; $\alpha_1 = 8$ – перша значуща цифра наближеного числа. Тоді у відповідності до (1.16):

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 \cdot 10^{n-1}} = \frac{1}{2 \cdot 8 \cdot 10^{5-1}} = \frac{1}{16} \cdot 10^{-4} = 0,0625 \cdot 10^{-4}.$$

в) для числа 0,001243, що має чотири правильні цифри: $n = 4$; $\alpha_1 = 1$ – перша значуща цифра наближеного числа. Тоді у відповідності до (1.16):

$$\delta_a = \frac{1}{2\alpha_1 \cdot 10^{n-1}} = \frac{1}{2 \cdot 1 \cdot 10^{4-1}} = \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0,5 \cdot 10^{-3}.$$

Примітка. У наближених обчисленнях при використанні поняття правильної значущої цифри, в широкому (нестрогому) сенсі формула для обчислення відносних похибок матиме вигляд:

$$\delta_a = \frac{1}{\alpha_1 \cdot 10^{n-1}}.$$

Якщо відома гранична відносна похибка δ_a наближеного числа a , то можна визначити правильні значущі цифри у його запису. Зв'язок між граничною відносною похибкою δ_a та кількістю правильних значущих цифр n можна виразити такою нерівністю [1, 11]:

$$\begin{aligned}(1 + \alpha_1) \cdot \delta_a &\leq 10^{-s}, \\ n &= s + 1,\end{aligned}\tag{1.17}$$

де s - найбільше числове значення показника ступеня, для якого виконується нерівність (1.17).

Приклад 1.8. Скільки правильних значущих цифр треба враховувати при обчисленні $a = \sqrt{28}$, щоб гранична відносна похибка δ_a не перевищувала 0,2 %?

Розв'язок:

За умовою $a = \sqrt{28} = 5,...$; $\delta_a = 0,002$; $\alpha_1 = 5$, тоді

$$\begin{aligned}(1 + 5) \cdot 0,002 &\leq 10^{-s}, \\ 0,012 &\leq 10^{-s},\end{aligned}$$

звідки найбільше значення показника ступеня, для якого виконується нерівність (1.17), становить $s = 1$;

Тоді, кількість правильних значущих цифр $n = s + 1 = 2$.

1.4 ОЦІНЮВАННЯ ПОХИБОК, ЩО ВИНИКАЮТЬ ПІД ЧАС ВИМІРЮВАНЬ

1.4.1 Загальні правила представлення результатів вимірювань

У процесі вимірювання дослідник визначає значення фізичної величини, зчитуючи його зі шкали вимірювального приладу. При цьому кількість цифр (розрядів) числа, які дослідник записує як результат виміру, визначається ціною поділки шкали. Наприклад, при вимірюванні об'єму розчину бюреткою місткістю 25 см^3 з ціною поділки $0,1 \text{ см}^3$ найменше достовірне значення об'єму становить $0,1 \text{ см}^3$. Отже, всі значення об'ємів, які можуть бути зчитані зі шкали бюретки, лежать у діапазоні $0,1 \dots 25,00 \text{ см}^3$. При цьому значення, які містять 2

знаки після коми (наприклад, $0,13 \text{ см}^3$ або $0,27 \text{ см}^3$) є сумнівними у другому знаку. Записувати другу цифру для даного приладу недоцільно.

Якщо результат виміру отримано між поділками шкали, то усереднювати покази¹ можна лише у тому випадку, якщо це вказано у інструкції до засобу вимірювання; інакше записують інтервал, що відповідає відстані між поділками.

Запис результатів виміру, отриманих з приладу, який містить цифрову шкалу, здійснюється з тією кількістю знаків, що відповідає похибці даного засобу вимірювання. Наприклад, якщо рН-метр вимірює з точністю до 1 десяткового знаку, то вимірне значення рН ($\text{pH}=8$) записують як $\text{pH}=8,0$.

Досить часто результат виміру отримують за формулами (функціональними залежностями), аргументами яких є значення безпосередньо виміряних величин. Такі вимірювання називають *непрямими*, і питання забезпечення необхідної точності представлення результатів, а також кількості цифр у поданні числових даних, є дуже важливим.

Результати непрямих вимірювань записують, виходячи з кількості правильних значущих цифр. Чим більше обсяг розрахунків, тим більшу кількість сумнівних цифр треба залишати у проміжних обчисленнях.

При роботі з експериментальними даними варто також звернути увагу на деякі особливості їх обробки [3, 4, 9, 35-37, 39], які розглянуті у Додатку А.

1.5 ОЦІНЮВАННЯ ПОХИБОК, ЩО ВИНΙΚАЮТЬ ПІД ЧАС РОЗРАХУНКУ ДОВІЛЬНОГО ВИРАЗУ

При виконанні дій над наближеними числами отримують наближене число. Для визначення похибки результату розглянемо правила, за якими можна обчислити граничну абсолютну і граничну відносну похибки.

1.5.1 Похибки простих арифметичних операцій

Похибки при арифметичних діях над наближеними числами визначаються через похибки величин, над якими ці дії здійснюються.

¹ Поняття інтерполяції розглянуто у розділі 5

Для визначення похибки складного виразу слід розглянути спочатку правила розкриття похибок при простих арифметичних операціях.

1. Похибка суми

Гранична абсолютна похибка алгебраїчної суми кількох наближених чисел дорівнює сумі граничних абсолютних похибок доданків [1].

Нехай наближені значення доданків позначені $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$, їх граничні абсолютні похибки $\Delta a_1, \Delta a_2, \Delta a_3, \dots, \Delta a_n$, а сума $u = a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_n$.

Тоді:

$$\Delta u = \Delta a_1 + \Delta a_2 + \Delta a_3 + \dots + \Delta a_n. \quad (1.18)$$

2. Похибка різниці

Гранична абсолютна похибка різниці наближених чисел дорівнює сумі їх граничних абсолютних похибок [1].

Нехай a_1 та a_2 значення наближених чисел, $\Delta a_1, \Delta a_2$ граничні абсолютні похибки цих чисел. Тоді гранична абсолютна похибка різниці наближених чисел $u = a_1 - a_2$:

$$\Delta u = \Delta a_1 + \Delta a_2. \quad (1.19)$$

3. Похибка добутку

Гранична відносна похибка добутку декількох наближених чисел рівна сумі граничних відносних похибок співмножників [1].

Нехай наближені значення співмножників позначені $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$, їх граничні відносні похибки $\delta a_1, \delta a_2, \delta a_3, \dots, \delta a_n$, а добуток $u = a_1 \cdot a_2 \cdot a_3 \cdot \dots \cdot a_n$.

Тоді:

$$\delta u = \delta a_1 + \delta a_2 + \delta a_3 + \dots + \delta a_n. \quad (1.20)$$

4. Похибка частки

Гранична відносна похибка частки двох наближених чисел рівна сумі граничних відносних похибок діленого і дільника [1].

Нехай a_1 та a_2 значення наближених чисел, $\delta a_1, \delta a_2$ граничні відносні

похибки цих чисел. Тоді гранична абсолютна похибка частки наближених чисел $u = a_1/a_2$:

$$\delta u = \delta a_1 + \delta a_2. \quad (1.21)$$

5. Похибка ступеня

Гранична відносна похибка ступеня наближеного числа рівна добутку показника ступеня на граничну відносну похибку основи [1].

Нехай a значення наближеного числа, а δa – його гранична відносна похибка. Тоді гранична відносна похибка числа в ступені n : $u = a^n$:

$$\delta u = n \cdot \delta a. \quad (1.22)$$

6. Похибка кореня

Гранична відносна похибка кореня з наближеного числа рівна граничній відносній похибці підкореневого числа, поділеному на показник ступеня кореня [1].

Нехай a значення наближеного числа, а δa його гранична відносна похибка. Тоді гранична відносна похибка кореня ступені n з числа: $u = \sqrt[n]{a}$:

$$\delta_u = \frac{1}{n} \cdot \delta_a. \quad (1.23)$$

Зведемо розглянуті правила в таблицю.

Таблиця 1.1. Похибки арифметичних операцій

№	Дія	Абсолютна/відносна похибка	Абсолютна/відносна похибка
1	додавання $u = a_1 + a_2 + \dots + a_n$	$\Delta_u = \Delta_{a_1} + \Delta_{a_2} + \dots + \Delta_{a_n}$	$\delta_u = \frac{\Delta_u}{ u }$
2	віднімання $u = a_1 - a_2$	$\Delta_u = \Delta_{a_1} + \Delta_{a_2}$	$\delta_u = \frac{\Delta_u}{ u }$
3	множення $u = a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_n$	$\delta_u = \delta_{a_1} + \delta_{a_2} + \dots + \delta_{a_n}$	$\Delta_u = \delta_u u $
4	ділення $u = a_1/a_2$	$\delta_u = \delta_{a_1} + \delta_{a_2}$	$\Delta_u = \delta_u u $
5	піднесення до степеня $u = a^n$ $u = \sqrt[n]{a} = a^{\frac{1}{n}}$	$\delta_u = n \cdot \delta_a$ $\delta_u = \frac{1}{n} \cdot \delta_a$	$\Delta_u = \delta_u u $

1.5.2 Похибки розрахунків за довільною формулою

На практиці часто доводиться оцінювати похибку наближеного значення величин, отриманих в результаті обчислень за формулою, яка містить не одну, а декілька різних дій.

При розв'язуванні таких завдань необхідно послідовно застосовувати правила визначення похибок простих дій над наближеними числами і формулу зв'язку абсолютної і відносної похибок (1.7). При цьому слід враховувати, що першою розглядають останню дію.

Приклад 1.9. Визначити абсолютну та відносну похибку величини X , яка обчислюється за формулою:

$$X = \frac{a^2 + b}{\sqrt{ab}}$$

при $a = 6,14 \pm 0,01$, $b = 9,43 \pm 0,02$.

Розв'язок: останньою дією є ділення чисельника на знаменник, тому (див. таблицю 1.1) спочатку знаходимо відносну похибку величини X як суму відносних похибок чисельника і знаменника:

$$\delta_X = \delta_{\text{чисельника}} + \delta_{\text{знаменника}} = \delta_{a^2+b} + \delta_{\sqrt{ab}}.$$

Розглянемо окремо похибку чисельника

$$\delta_{a^2+b} = \frac{\Delta_{a^2+b}}{|a^2+b|} =$$

$$\frac{\Delta_{a^2} + \Delta_b}{|a^2 + b|} =$$

$$= \frac{\delta_{a^2}|a^2| + \Delta_b}{|a^2+b|} = \frac{2\delta_a|a^2| + \Delta_b}{|a^2+b|} =$$

$$= \frac{2\frac{\Delta_a}{|a|}|a^2| + \Delta_b}{|a^2+b|},$$

$$\delta_{\sqrt{ab}} = \frac{1}{2}\delta_{ab} = \frac{1}{2}(\delta_a + \delta_b) = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_a}{|a|} + \frac{\Delta_b}{|b|}\right).$$

Отже, відносна похибка величини X

$$\delta_X = \frac{2\frac{\Delta_a}{|a|}|a^2| + \Delta_b}{|a^2+b|} + \frac{1}{2}(\delta_a + \delta_b), \text{ а абсолютна } \Delta_X = \delta_X \cdot |X|.$$

(остання дія – додавання, тому переходимо до абсолютної похибки)

(остання дія у першому доданку – піднесення до ступеня, тому для цього доданку виконуємо еквівалентну заміну на відносну похибку за формулою зв'язку)

(оскільки в умові задачі задано абсолютні похибки, то виконуємо еквівалентну заміну відносної похибки)

і знаменника:

Розрахуємо значення величини X , її абсолютну та відносну похибки:

$$X = \frac{6,14^2 + 9,43}{\sqrt{6,14 \cdot 9,43}} = 6,1937;$$

$$\delta_X = \frac{2 \frac{0,01}{|6,14|} |6,14^2| + 0,02}{|6,14^2 + 9,43|} + \frac{1}{2} \left(\frac{0,01}{|6,14|} + \frac{0,02}{|9,43|} \right) = 0,0049 = 0,49 \%;$$

$$\Delta_X = 0,0049 \cdot |6,1937| = 0,0303.$$

Приклад 1.10. Визначити абсолютну та відносну похибку величини X , яка обчислюється за формулою:

$$X = a \cdot b^2 + \sqrt{c}$$

при $a = 6,14 \pm 0,01$; $b = 9,43 \pm 0,02$; $c = 18,72 \pm 0,03$.

Розв'язок: останньою дією є додавання, тому (див. таблицю 1.1) спочатку знаходимо абсолютну похибку величини X як суму абсолютних похибок доданків:

$$\Delta_X = \Delta_{ab^2} + \Delta_{\sqrt{c}} =$$

$$= \delta_{ab^2} |ab^2| + \delta_{\sqrt{c}} |\sqrt{c}| =$$

$$= (\delta_a + \delta_{b^2}) |ab^2| + \frac{1}{2} \delta_c |\sqrt{c}| =$$

$$= \left(\frac{\Delta_a}{|a|} + \frac{2\Delta_b}{|b|} \right) |ab^2| + \frac{1}{2} \frac{\Delta_c}{|c|} |\sqrt{c}|$$

(остання дія у першому доданку – множення, а в другому – знаходження кореня, тому для кожного доданку виконуємо еквівалентну заміну на відносну похибку за формулою зв'язку)

За правилами (див. таблицю 1.1) розкриємо відносні похибки:

(оскільки в умові задачі задано абсолютні похибки, то виконуємо еквівалентну заміну відносних похибок)

Тоді відносна похибка: $\delta_X = \frac{\Delta_X}{|X|}$

Розрахуємо значення величини X , її абсолютну та відносну похибки:

$$X = 6,14 \cdot 9,43^2 + \sqrt{18,72} = 550,3255;$$

$$\Delta_X = \left(\frac{0,01}{6,14} + \frac{2 \cdot 0,02}{9,43} \right) |6,14 \cdot 9,43^2| + \frac{1}{2} \frac{0,03}{18,72} |\sqrt{18,72}| = 3,2087;$$

$$\delta_X = \frac{3,2087}{|550,3255|} = 0,0058 = 0,58 \%.$$

Приклад 1.11. Обчислити теплоємність твердого тіла за даними вимірювання за способом змішування, тобто за формулою:

$$X = \frac{(M_1 + cM_2)(t - t_0)}{M(T - t)},$$

де M - маса тіла; M_1 - маса води; M_2 - маса калориметра з мішалкою; c - теплоємність калориметра; T - температура тіла; t_0 - початкова температура; t - остаточна температура води.

Результати виміру цих величин:

$$\begin{aligned} M &= 165,4 \pm 0,1 \text{ г}; & T &= 99,93 \pm 0,004 \text{ }^\circ\text{C}; \\ M_1 &= 440,3 \pm 0,2 \text{ г}; & t_0 &= 11,6 \pm 0,05 \text{ }^\circ\text{C}; \\ M_2 &= 187,5 \pm 0,1 \text{ г}; & t &= 14,6 \pm 0,05 \text{ }^\circ\text{C}; \\ c &= 0,094 \pm 0,001; \end{aligned}$$

Розв'язок: обчислимо значення теплоємності:

$$X = \frac{(440,3 + 0,094 \cdot 187,5)(14,6 - 11,6)}{165,4(99,93 - 14,6)} = 0,0973.$$

Отримаємо формулу для розрахунку відносної похибки:

$$\begin{aligned} \delta_x &= \delta_{M_1+cM_2} + \delta_{t-t_0} + \delta_{M(T-t)} = \frac{\Delta_{M_1+cM_2}}{|M_1+cM_2|} + \frac{\Delta_{t-t_0}}{|t-t_0|} + \delta_M + \delta_{T-t} = \\ &= \frac{\Delta_{M_1} + \Delta_{cM_2}}{|M_1+cM_2|} + \frac{\Delta_t + \Delta_{t_0}}{|t-t_0|} + \frac{\Delta_M}{|M|} + \frac{\Delta_{T-t}}{|T-t|} = \frac{\Delta_{M_1} + \delta_c \Delta_{M_2}}{|M_1+cM_2|} + \frac{\Delta_t + \Delta_{t_0}}{|t-t_0|} + \\ &+ \frac{\Delta_M}{M} + \frac{\Delta_T + \Delta_t}{|T-t|} = \frac{\Delta_{M_1} + (\delta_c + \delta_{M_2})|cM_2|}{|M_1+cM_2|} + \frac{\Delta_t + \Delta_{t_0}}{|t-t_0|} + \frac{\Delta_M}{|M|} + \frac{\Delta_T + \Delta_t}{|T-t|} = \\ &= \frac{\Delta_{M_1} + \left(\frac{\Delta_c}{|c|} + \frac{\Delta_{M_2}}{|M_2|}\right)|cM_2|}{|M_1+cM_2|} + \frac{\Delta_t + \Delta_{t_0}}{|t-t_0|} + \frac{\Delta_M}{|M|} + \frac{\Delta_T + \Delta_t}{|T-t|}. \end{aligned}$$

і розрахуємо значення:

$$\begin{aligned} \delta_x &= \frac{0,2 + \left(\frac{0,001}{|0,094|} + \frac{0,1}{|187,5|}\right)|0,094 \cdot 187,5|}{|440,3 + 0,094 \cdot 187,5|} + \frac{0,05 + 0,05}{|14,6 - 11,6|} + \frac{0,1}{|165,4|} + \frac{0,004 + 0,05}{|99,93 - 14,6|} = \\ &\approx 0,035438 \text{ (або } \approx 3,5 \text{ \%)}. \end{aligned}$$

Скористаємося формулою (1.9):

$$\Delta_X = \delta_X |X| = 0,035438 \cdot 0,0973 \approx 0,00344.$$

1.5.3 Похибки при обчисленні функції

Нехай задана деяка функція однієї змінної $y = f(x)$, що має неперервну похідну, та початкове наближене значення аргументу x_0 .

Наближеним значенням функції y_0 вважають те значення, яке вона набуває при наближеному значенні аргументу, тобто $y_0 = f(x_0)$. Слід визначити похибку цього наближення.

З курсу математичного аналізу відомо, що при досить малому прирості аргументу Δx приріст функції Δy приблизно дорівнює її першій похідній помноженій на приріст аргументу.

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} \approx \frac{\Delta f(x)}{\Delta x}.$$

Тоді формула для визначення абсолютної похибки функції при відомій абсолютній похибці аргументу Δx матиме вигляд:

$$\Delta f(x) = |f'(x) \cdot \Delta x|. \quad (1.24)$$

Відносну похибку функції можна визначити за формулою:

$$\delta f(x) = \frac{\Delta f(x)}{|f(x)|} = \left| \frac{f'(x)}{f(x)} \right| \cdot \Delta x. \quad (1.25)$$

Визначимо абсолютні і відносні похибки деяких основних елементарних функцій.

Приклад 1.11. Нехай $y = f(x)$ є логарифмічною функцією: $y = \ln(x)$. Визначимо абсолютну і відносну похибки логарифмічної функції.

Розв'язок: згідно формули (1.24) абсолютна похибка логарифмічної функції:

$$\Delta(\ln x) = \left| \frac{1}{x} \cdot \Delta x \right|.$$

Згідно формули (1.25) відносна похибка логарифмічної функції:

$$\delta(\ln x) = \left| \frac{1}{x \cdot \ln x} \right| \cdot \Delta x.$$

Приклад 1.12. Визначити абсолютну і відносну похибки тригонометричної функції $f(x) = \sin(x)$.

Розв'язок: згідно формули (1.24) абсолютна похибка функції $f(x) = \sin(x)$:

$$\Delta(\sin(x)) = |\cos(x) \cdot \Delta x|.$$

Згідно формули (1.25) відносна похибка функції $f(x) = \sin(x)$:

$$\delta(\sin(x)) = \left| \frac{\cos(x)}{\sin(x)} \right| \cdot \Delta x = |\operatorname{ctg}(x)| \cdot \Delta x.$$

Приклад 1.13. Визначити абсолютну і відносну похибки степеневої функції $f(x) = x^a$, (a – довільне дійсне число).

Розв'язок: згідно формули (1.24) абсолютна похибка степеневої функції:

$$\Delta(x^a) = |a \cdot x^{a-1} \cdot \Delta x|.$$

Згідно формули (1.25) відносна похибка степеневої функції:

$$\delta(x^a) = \left| \frac{a \cdot x^{a-1}}{x^a} \right| \cdot \Delta x.$$

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 1

1. Що таке точні і наближені дані?
2. Навести можливі джерела утворення похибок вимірювань та розрахунків.
3. Поясніть поняття наближеного числа.
4. Які цифри в запису числа вважають значущими?
5. Сформулюйте правила округлення чисел.
6. Що таке відносна й абсолютна похибки числа?
7. Як знайти кількість правильних значущих цифр в записі числа, якщо відома його абсолютна похибка?
8. Навести послідовність визначення абсолютної похибки числа при відомій кількості правильних значущих цифр цього числа.
9. Пояснити, як знайти кількість правильних значущих цифр в запису числа, якщо відома його відносна похибка.
10. Пояснити, як визначається відносна похибка числа при відомій кількості правильних значущих цифр цього числа.
11. Пояснити, як визначаються похибки суми і різниці наближених чисел.
12. Пояснити, як визначають похибку добутку і результату ділення наближених чисел.
13. Пояснити, як визначають похибку кореня та ступеня наближеного числа.
14. Наближене значення $a = 36,502$ отримано з відносною похибкою $\delta a = 0,4 \%$. Визначити кількість правильних значущих цифр числа a .
15. Абсолютна похибка числа $a = 48,11$ дорівнює $0,07$. Знайти правильні значущі цифри x у вузькому сенсі.
16. Задані два числа $a = 3,5427325$ і $b = 1,415000$. Округлити числа до трьох значущих цифр і знайти абсолютні і відносні похибки результатів округлення.
17. Об'єм циліндричної ємності обчислюється за формулою:

$V = \pi \times r^2 \times h$. Визначити граничні абсолютну та відносну похибки при обчисленні об'єму, якщо в запису $h=25$ і $r=1,2$ тільки правильні значущі цифри.

18. Наближене число $a = 4,15403$ має в запису тільки правильні значущі цифри. Знайти граничну відносну похибку числа.

19. При вимірюванні об'єму рідини $V = 252$ мл за допомогою мірного циліндра було визначено таке значення об'єму: $V_n = 250$ мл. Оцінити абсолютну і відносну похибки вимірювання.

20. Згідно до чинного визначення міжнародного Комітету з даних для науки і техніки (CODATA) заряд електрону e складає:

$$e = (6,67259 \pm 0,00085) \cdot 10^{-11} \text{ Кл.}$$

Оцінити граничну абсолютну та граничну відносну похибки визначення заряду електрона.

21. Округлити такі константи до чотирьох значущих цифр:

4,1868 Дж (1 калорія); 735,49875 Ватт (1 кінська сила); 101 325 Па (1 атмосфера); 273,15 К (0 °C).

22. Для оцінювання потужності випромінювання енергії від поверхні тіла, застосовують закон Стефана-Больцмана:

$$H = A \cdot e \cdot \sigma \cdot T^4,$$

де H – потужність теплового випромінювання, Вт, A – площа поверхні, м^2 , e – коефіцієнт випромінювання, що характеризує випромінювальні властивості поверхні (безрозмірний), σ – стала Стефана-Больцмана ($\sigma = (5,6703671 \pm 0,00000001) \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)$), T – абсолютна температура, К.

Розрахувати потужність теплового випромінювання і визначити похибку розрахунку H для сталевієї пластини ($A = 0,16 \pm 0,01 \text{ м}^2$, $e = 0,90 \pm 0,05$, $T = 650 \pm 20 \text{ К}$).

23. Співвідношення між температурою та об'ємом насиченої пари задається рівнянням Ван-дер-Ваальса. Для моля газу об'ємом V при температурі T і тиску P рівняння Ван-дер-Ваальса має вигляд:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = R \cdot T,$$

де $R, (\text{атм} \cdot \text{л}) / (\text{моль} \cdot \text{К})$ – універсальна газова стала¹,
 a, b – експериментальні константи, що враховують відхилення властивостей
 реального газу від властивостей ідеального газу,
 $a = (\alpha_1 \cdot R^2 \cdot T_c^2) / (\alpha_2 \cdot P_c), (\text{Н} \cdot \text{м}^4) / \text{моль}^2$; $b = (R \cdot T_c) / (\alpha_3 \cdot P_c), \text{см}^3 / \text{моль}$,
 P_c, T_c – значення «псевдокритичних властивостей» газу,
 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ – емпіричні коефіцієнти.

Розрахувати за рівнянням Ван-дер-Ваальса температуру хлорметану CH_3Cl , якщо $P = (10,49 \pm 0,01) \text{ атм}$, $V = (0,0416 \pm 0,0025) \text{ м}^3 / \text{кг}$,

$$P_c = (65,9 \pm 0,05) \text{ атм}, T_c = (416,3 \pm 0,05) \text{ К},$$

$$R = (0,08206 \pm 0,000001) (\text{атм} \cdot \text{л}) / (\text{моль} \cdot \text{К}), \alpha_1 = 27 \pm 0,05,$$

$$\alpha_2 = 64 \pm 0,05, \alpha_3 = 8 \pm 0,05 :$$

$$T = \frac{\left(P + \frac{(\alpha_1 \cdot R^2 \cdot T_c^2) / (\alpha_2 \cdot P_c)}{V^2} \right) \cdot \left(V - \frac{R \cdot T_c}{\alpha_3 \cdot P_c} \right)}{R}.$$

24. Розрахувати в'язкість аміаку за формулою Сатерленда:

$$N = N_0 \frac{A+C}{t \cdot C} \cdot \left(\frac{t}{A} \right)^n,$$

якщо $A=273,15 (\pm 0,1)$; $C=503 (\pm 0,5)$; $t = 20 (\pm 0,1)$; $N_0=91,6 \cdot 10^{-7} (\pm 10^{-9})$;
 $n=2(\pm 0,1)$.

25. Розрахувати ізобарну теплоємність CO_2 за формулою:

$$C_p = E + F \frac{T}{K} + G \frac{T}{K} + H^2 \frac{T}{K} + N^3 \frac{K}{T},$$

якщо $E=0,81513(\pm 10^{-3})$; $T=293 (\pm 0,1)$; $K=100 (\pm 0,1)$; $F=9,8454 \cdot 10^{-2} (\pm 10^{-3})$;
 $G=-9,4747 \cdot 10^{-3}(\pm 10^{-5})$; $H=36,006 \cdot 10^{-5} (\pm 10^{-7})$; $N=-0,0567 (\pm 0,001)$.

26. Розрахувати теплопровідність аміаку за формулою:

¹ Розрахунки у даному прикладі виконуються у позасистемних одиницях, оскільки базуються на результатах відповідних експериментів, виміряних також у позасистемних одиницях.

$$L = A \cdot \frac{T_K + C}{T + C} \cdot \frac{\sqrt{T^3}}{\sqrt{T_K^3} \cdot \sqrt[6]{M^5}},$$

де $A=4,3543 \cdot 10^{-3}(\pm 10^{-5})$; $C=503(\pm 0,1)$; $T_K=239,73(\pm 0,1)$; $T=300(\pm 0,1)$;

M – молекулярна маса газу ($\pm 0,1$).

27. Розрахувати густину повітря за формулою:

$$R = \frac{A \cdot P}{(k + B \cdot t) \cdot c},$$

де $P=105,2 (\pm 0,1)$, $A=1,293 (\pm 0,01)$, $B = 3,67 \cdot 10^{-3}(\pm 10^{-5})$; $C = 760 (\pm 0,1)$;

$t=20 (\pm 0,1)$; $k=1 (\pm 0,1)$.

28. Розрахувати значення критерію Архімеда за формулою:

$$Ar = \frac{g \cdot d_{\min}^3}{\nu^2} \left(\frac{\rho_T - \rho_{\Gamma}}{\rho_{\Gamma}} \right),$$

де $g=9,81(\pm 0,01)$; $\rho_T = 1300(\pm 1)$; $\rho_{\Gamma} = 0,571(\pm 0,02)$; $\nu = 53,110^{-6}(\pm 10^{-7})$,

$d_{\min}=0,0015 (\pm 10^{-5})$.

29. Розрахувати значення критерію Рейнольдса за формулою:

$$Re = \frac{(\omega_1 + \omega_2) \cdot d_E \rho}{\mu},$$

де $\omega_1 = 0,15 (\pm 10^{-5})$; $\omega_2 = 0,12 (\pm 3 \cdot 10^{-5})$; $d_E=0,015 (\pm 3 \cdot 10^{-6})$; $\rho=984 (\pm 0,5)$;

$\mu=0,5410^{-3} (\pm 10^{-7})$.

30. Розрахувати зміну тиску в системі манометричного газового термометра за формулою:

$$p_t = p_0 [k + \beta(t - t_0)],$$

де $p_0=5,46(\pm 10^{-2})$; $k=1(\pm 0,01)$; $t=40(\pm 0,1)$; $t_0=20(\pm 0,1)$; $\beta=0,366 \cdot 10^{-2}(\pm 10^{-3})$.

31. Розрахувати зміну опору у платиновому термоперетворювачі за формулою:

$$R_t = R_0 (k + \alpha \cdot t + \beta \cdot t^2),$$

де $R_0=50(\pm 0,1)$; $k=1(\pm 0,01)$; $\alpha=3,95 \cdot 10^{-3}(\pm 10^{-5})$; $\beta=5,85 \cdot 10^{-7}(\pm 10^{-9})$;

$t=20 (\pm 0,1)$.

2 РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ

2.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 2

Завдання розв'язування рівнянь та систем рівнянь часто виникають на практиці [1, 28]. У цьому розділі буде розглянуто методи розв'язання нелінійних рівнянь [1, 12, 16, 21-23, 32, 45], які у загальному вигляді можна записати таким чином:

$$f(x) = 0, \quad (2.1)$$

де $f(x)$ — це деяка функція однієї змінної x , визначена і безперервна в певній області або на усій числовій осі.

При цьому *коренем* рівняння (2.1) або *нулем функції* $f(x)$ називається будь-яке чисельне значення x^* , яке після підстановки обертає функцію $f(x)$ в нуль:

$$f(x^*) = 0. \quad (2.2)$$

З курсу алгебри відомо, що конкретне рівняння вигляду (2.1) може мати один дійсний корінь, кілька дійсних коренів, або не мати дійсних коренів взагалі.

В якості прикладів формулювання нелінійних рівнянь з однією невідомою розглянемо деякі практичні задачі з хімії та хімічної технології.

Приклад 2.1. Ставиться задача визначити об'єм метану масою $m = 1$ кг за температури $T = 273,2$ К та тиску $P = 4,04 \cdot 10^7$ Па за рівнянням Ван-дер-Ваальса. Для моля газу об'ємом V при температурі T і тиску P рівняння Ван-дер-Ваальса має вигляд:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = R \cdot T,$$

де $R = 8,314 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ — універсальна газова стала, $a, \text{ (Н} \cdot \text{м}^4)/\text{моль}^2$ і

b , $\text{см}^3/\text{моль}$ – експериментальні константи, що враховують відхилення властивостей реального газу від властивостей ідеального газу.

Розв'язок: у даному випадку, $a = 0,2256 \text{ (Н} \cdot \text{м}^4)/\text{моль}^2$,
 $b = 42,719 \text{ см}^3/\text{моль}$. Отже, температура газу заданого об'єму може бути розрахована за рівнянням Ван-дер-Ваальса безпосередньо. Зокрема, для наявних вихідних даних маємо:

$$T = \frac{\left(4,04 \cdot 10^7 + \frac{0,2256}{V^2}\right) \cdot (V - 42,719)}{8,314}. \quad (2.3)$$

Очевидно, що маючи значення аргументу (тобто V), можна розрахувати за виразом (2.3) шукане значення функції T підстановкою значення V у (2.3).

Однак, в даному випадку доводиться вирішувати *обернену* задачу, тобто визначати значення V , що відповідало б певному значенню $T = T_{val} = 273,2 \text{ K}$:

$$\begin{aligned} T_{val} &= \frac{\left(4,04 \cdot 10^7 + \frac{0,2256}{V^2}\right) \cdot (V - 42,719)}{8,314}, \\ T_{val} &= \frac{\left(4,04 \cdot 10^7 + \frac{0,2256}{V^2}\right) \cdot (V - 42,719)}{8,314}, \\ \left(4,86 \cdot 10^6 + \frac{2,71 \cdot 10^{-2}}{V^2}\right) \cdot (V - 5,138) - T_{val} &= 0, \\ 4,86 \cdot 10^6 \cdot V + \frac{2,71 \cdot 10^{-2}}{V} - 2,5 \cdot 10^7 - \frac{0,139}{V^2} - T_{val} &= 0, \end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned} f(V) &= 4,86 \cdot 10^6 \cdot V^3 - (T_{val} + 2,5 \cdot 10^7) \cdot V^2 + \\ &+ 2,71 \cdot 10^{-2} \cdot V - 0,139 = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Оскільки потрібно визначити об'єм метану (знайти V) за температури $T_{val} = 273,2 \text{ K}$, рівняння (2.4) набуває вигляду:

$$f(V) = 12148,18 \cdot V^3 - 24968195,4 \cdot V^2 + 2,71 \cdot 10^{-2} \cdot V - 0,139 = 0.$$

Розв'язання описаної задачі вимагає розв'язання алгебраїчного рівняння (у вигляді поліному третього ступеня), тобто знаходження такого значення V^* (або значень $V_1^*, V_2^*, V_3^*, \dots$), яке б перетворило (або перетворили) ліву частину рівняння на 0: $f(V^*) = 0$, (або $f(V_1^*) = 0$, $f(V_2^*) = 0$, ...).

Зауваження. Алгебраїчне рівняння у вигляді поліному порядку n має n коренів. Нижче буде розглянуто методи визначення дійсних коренів рівняння, тому не завжди кількість знайдених чисельними методами коренів буде дорівнювати порядку рівняння [5, 10, 11, 28].

Приклад 2.2. Внаслідок математичного опрацювання (апроксимації) результатів експериментального вимірювання залежності концентрації парів етанової кислоти (y , мольн. частки) від концентрації етанової кислоти в рідині (x , мольн. частки) отримано таку формулу:

$$y(x) = 1,0126 \cdot x^{0,1419}. \quad (2.5)$$

Розв'язок: нехай, за аналогією із прикладом 2.1, поставлено задачу визначити значення x , яке відповідає певному значенню y , наприклад, $y = 0,9125$. Тоді, після належних перетворень, з (2.5) можна отримати рівняння:

$$y(x) = 1,0126 \cdot x^{0,1419} - 0,9125 = 0. \quad (2.6)$$

Рівняння (2.6) має більш складну структуру, ніж (2.4); воно не є поліноміальним. Проте це рівняння також можна розв'язати наведеними нижче методами, знайшовши таке (або такі) значення x^* , щоб $f(x^*) = 0$.

Для деяких класів рівнянь розроблено точні (аналітичні) методи розв'язку. Наприклад, квадратне алгебраїчне рівняння можна розв'язати із використанням дискримінанту (або теореми Вієта), для розв'язання алгебраїчних рівнянь третього порядку існує формула Кардано. При цьому

відсутні універсальні точні методи, що були б застосовні до довільного рівняння вигляду (2.1): рівняння вище четвертого порядку не можна вирішити в загальному вигляді. Саме тому широкого поширення набули *чисельні* методи наближеного розв'язання алгебраїчних та трансцендентних рівнянь [1, 3-5].

Метою *наближеного* розв'язання рівняння (2.1) *чисельними* методами є визначення із заздалегідь заданою точністю усіх дійсних коренів, тобто знаходження одного або кількох значень x^* , що відповідають умові (2.6).

Рівняння вигляду (2.1) можна поділити на два класи [1, 3-5, 9, 10, 23-23, 35-37, 39, 45]:

- 1) прості поліноміальні (*алгебраїчні*) рівняння, наприклад, (2.2);
- 2) *трансцендентні* рівняння (більш складні за структурою, наприклад, рівняння (2.4)), що містять у своєму складі *трансцендентні функції*: показові, логарифмічні, тригонометричні, зворотні тригонометричні функції тощо.

Процедура наближеного чисельного розв'язання рівняння вигляду (2.1) *не залежить* від того, чи це рівняння є алгебраїчним, чи трансцендентним. Зазначена процедура чисельного розв'язання рівняння (2.1) для знаходження дійсних коренів включає два етапи [11, 17-19]:

1. Локалізація (відокремлення) коренів, тобто встановлення множини проміжків $[a_i, b_i]$, $i = \overline{1, \theta}$ (θ – кількість дійсних коренів рівняння), у кожному з яких міститься *один і лише один* корінь вихідного рівняння (2.1). Результатом етапу локалізації коренів може бути також висновок про відсутність дійсних коренів у даного рівняння.

2. Уточнення кожного з локалізованих коренів, тобто знаходження значення кореня x_i^* для проміжків $[a_i, b_i]$, із заздалегідь заданим ступенем точності.

2.2 МЕТОДИ ЛОКАЛІЗАЦІЇ КОРЕНІВ РІВНЯННЯ

Як вже було вказано вище, етап відокремлення коренів має на меті знаходження відрізка (або відрізків) $x \in [a_i, b_i]$, у кожному з яких міститься *один і лише один* корінь вихідного рівняння (2.1).

Графічний метод відокремлення (локалізації) коренів передбачає

побудову і аналіз графіку функції $y = f(x)$ [1, 3-5, 12, 16, 28]. Очевидно, що умові $f(x) = 0$ відповідають точки на осі абсцис, тобто точки перетину графіка функції $f(x)$ з віссю ОХ (рис. 2.1, а, б, в).

Як видно з графіків, для функції на рис. 2.1, а корінь може бути локалізований на інтервалі $x \in [-1, 0]$. Для функції на рис. 2.1, б корінь локалізований на інтервалах $x \in [-0,25, 0,5] \cup [0,75, 1,25]$, а для функції на рис. 2.1, в – на інтервалах $x \in [-1,5, -1] \cup [-1,1, -0,4] \cup [-0,5, 0,5] \cup [0,6, 1]$.

Якщо рівняння (2.1) не має дійсних коренів, то графік цього рівняння не перетинається з віссю абсцис (рис. 2.1, г).

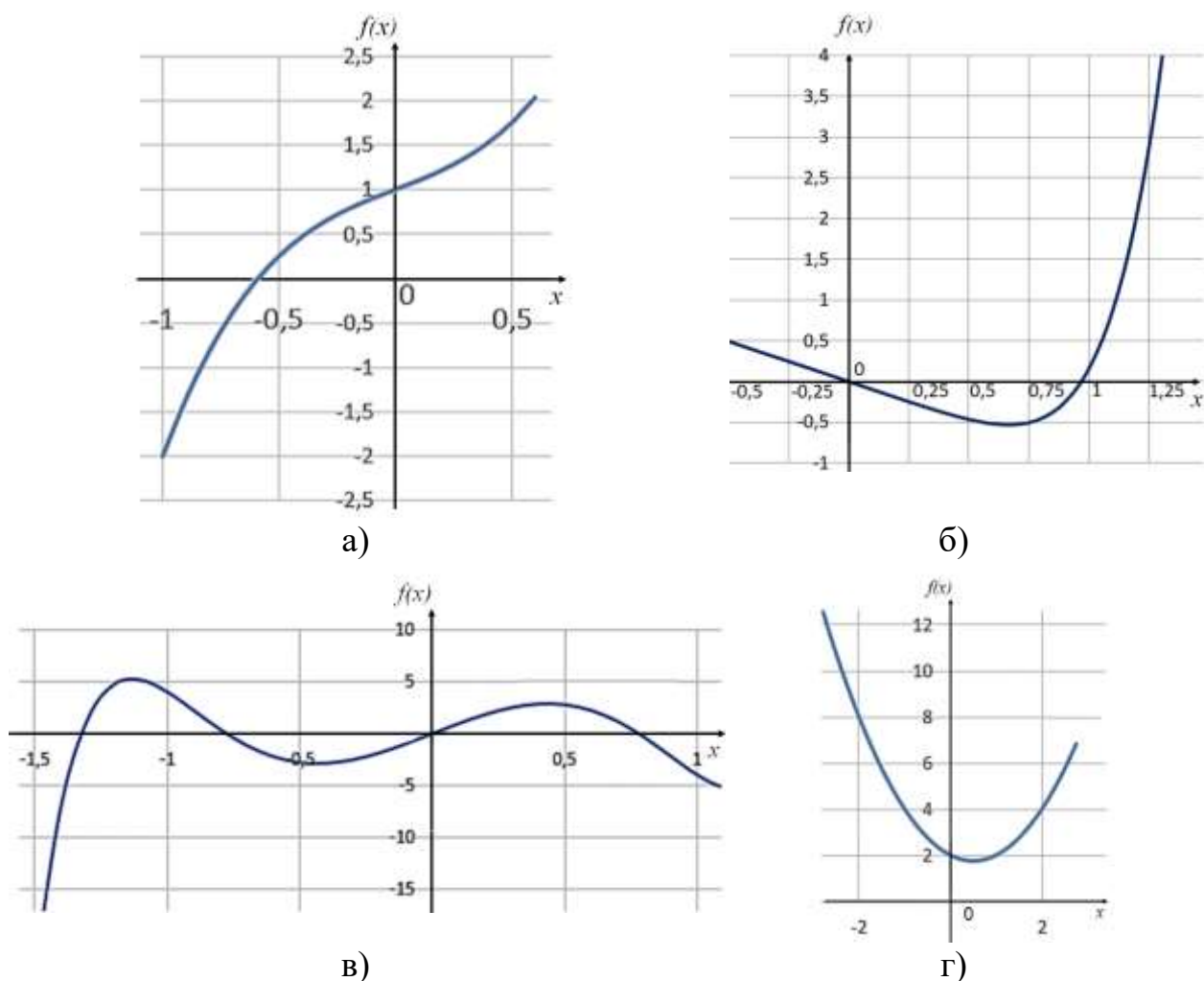


Рис. 2.1. Локалізація коренів рівняння за графіком:

а – одна точка перетину; б – дві точки перетину; в – чотири точки перетину;
г – точок перетину немає (дійсні корені відсутні)

Достовірність результатів, отриманих за графічним методом локалізації коренів, суттєво залежить від масштабу побудованих графіків. Іноді виникає необхідність побудови додаткових графіків із більшою роздільністю для ділянок, які «викликають сумнів» – див. рис. 2.2, де побудовані графіки однієї

й тієї ж функції у різних масштабах.

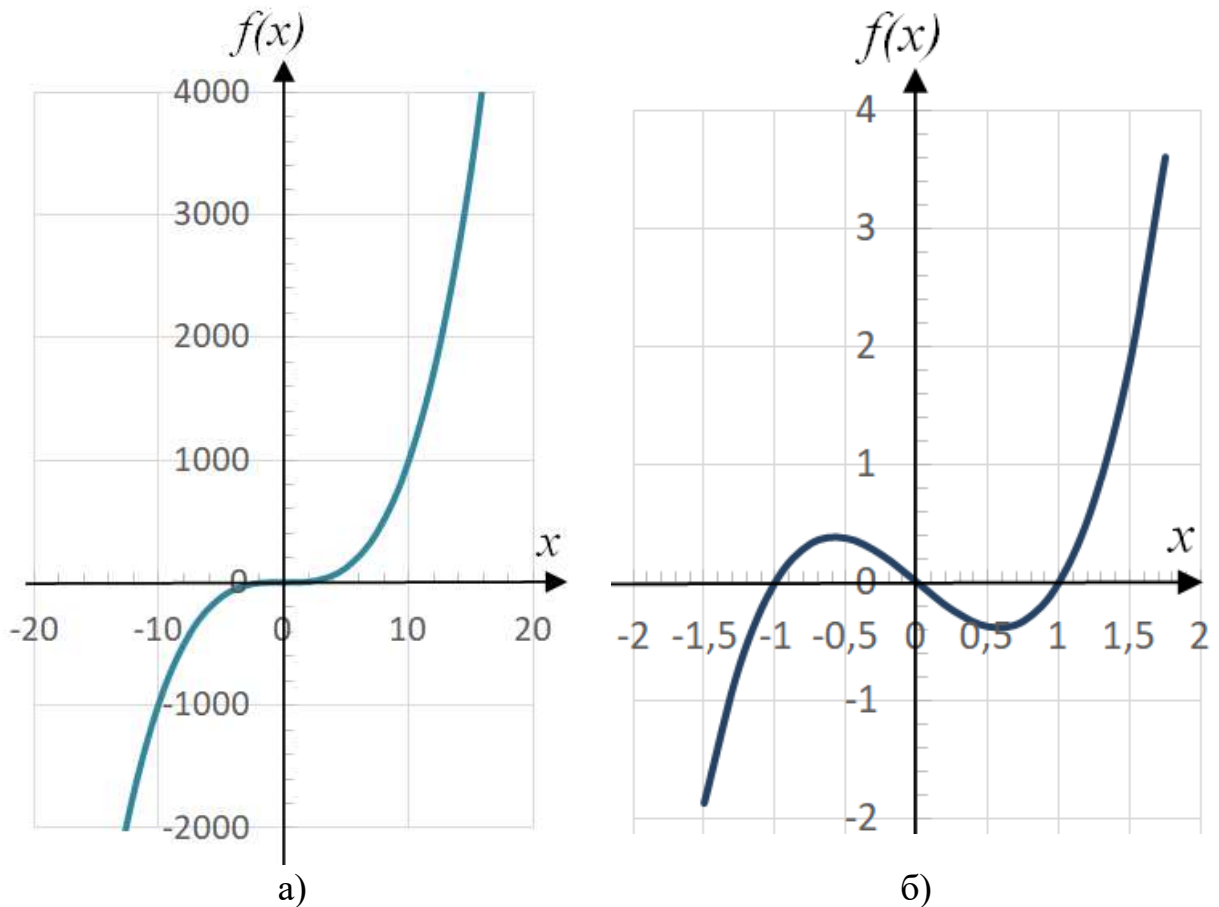


Рис. 2.2. Збільшення масштабу побудови для уточнення інтервалів локалізації:
а – в інтервалі $x \in [-25, 25]$ знаходиться або один, або кілька коренів рівняння;
б – корінь рівняння локалізований у інтервалі $x \in [0,9, 1,1]$

Рідше використовують *інший варіант графічного методу* локалізації коренів, згідно якого досліджувану функцію розбивають на дві частини:

$$f(x) = f_1(x) + f_2(x) = 0;$$

$$f_1(x) = -f_2(x).$$

Після цього будують графіки цих двох частин (тобто функцій $f_1(x), -f_2(x)$) в одній системі координат. У цьому випадку інтервали локалізації коренів визначаються за абсцисою точки перетину (або за абсцисам точок перетину) вказаних двох графіків.

Приклад 2.3. Визначити графічним методом інтервали локалізації коренів рівняння $f(x) = x^3 - x + 1$.

Розв'язок:

Перший спосіб. Побудуємо графік функції $f(x) = x^3 - x + 1 = 0$ (рис. 2.3, а). З графіку функції видно, що корінь рівняння може бути локалізований на інтервалі $x \in [-2,5, -0,5]$.

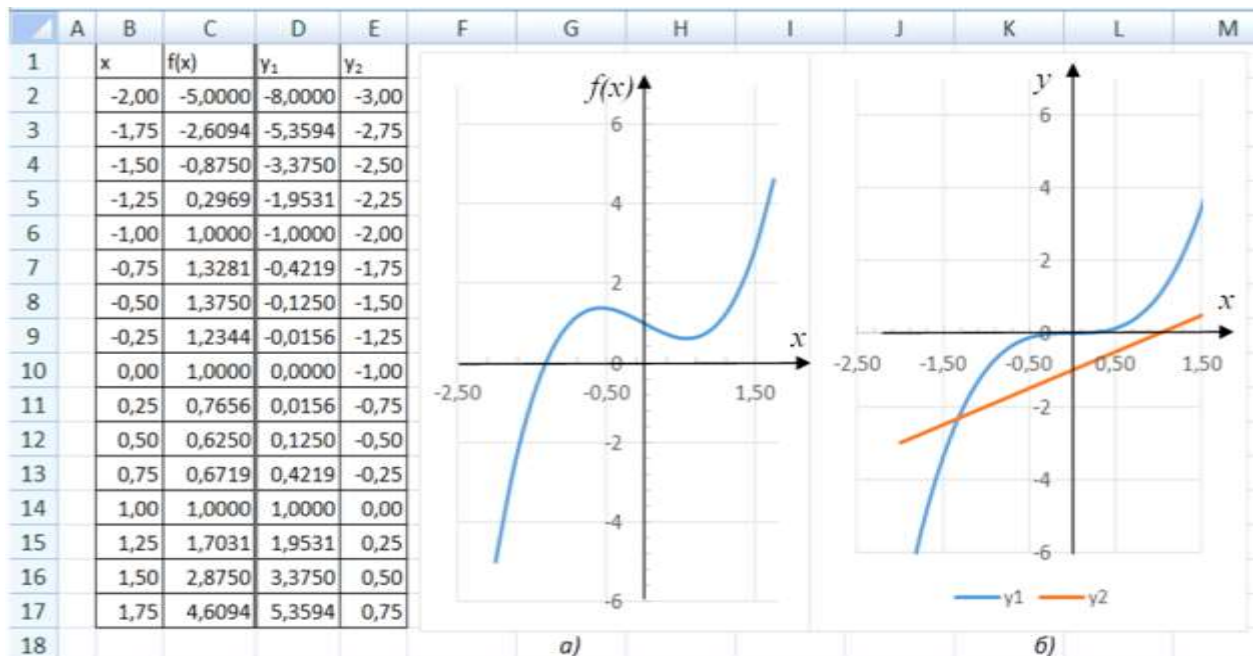


Рис. 2.3. Локалізація коренів рівняння $f(x) = x^3 - x + 1$ графічним методом:
а – перший спосіб; б – другий спосіб

Другий спосіб. Розіб'ємо досліджувану функцію на дві частини:

$$f(x) = x^3 - x + 1 = 0$$

$$f(x) = x^3 + (-x + 1) = 0$$

$$x^3 = x - 1$$

Побудуємо графіки функцій x^3 та $x - 1$ в одній системі координат (рис. 2.3, б). З побудови видно, що графіки перетинаються у точці, ордината якої знаходиться в районі значення $x \approx -1,5$. Отже, корінь рівняння може бути локалізований на інтервалі $x \in [-2,5, -0,5]$.

Графічний метод розділення коренів є досить зручним і наочним. Проте цей метод вимагає «візуального спостереження» для прийняття рішень. Внаслідок цього, під час реалізації графічного методу у вигляді комп'ютерної програми можуть виникати певні труднощі [6-8].

Аналітичний метод розділення (локалізації) коренів базується на такій

теоремі [1], яку наведемо без доведення.

Теорема 2.1. Якщо функція $f(x)$ на деякому відрізку $[a, b]$ є неперервною та монотонною, а також має різний знак на кінцях вказаного відрізка ($f(a) \cdot f(b) < 0$), то між точками a та b функція $f(x)$ проходить через нуль $f(x)=0$, тобто на відрізку $[a, b]$ знаходиться корінь рівняння і тільки один.

Аналітичний метод локалізації коренів полягає у виділенні інтервалів неперервності і монотонності функції та подальшому аналізі згідно з теоремою 2.1. Загальну концепцію аналітичного методу локалізації коренів ілюструє Рис. 2.4. Справді, для локалізації усіх коренів досліджуваного рівняння необхідно і достатньо знайти X_{k1}, X_{k2}, X_{k3} – інтервали монотонності і неперервності функції, розташовані між сусідніми характерними точками A, B, C, D . До числа характерних точок включають критичні точки функції – корені її похідної (у даному випадку, це точки $B = X_{\text{ЕКСТР}_1}, C = X_{\text{ЕКСТР}_2}$), та границі області визначення функції (у даному випадку, це точки A та D). До точок, які відповідають області визначення функції, можуть також належати точки розриву функції.

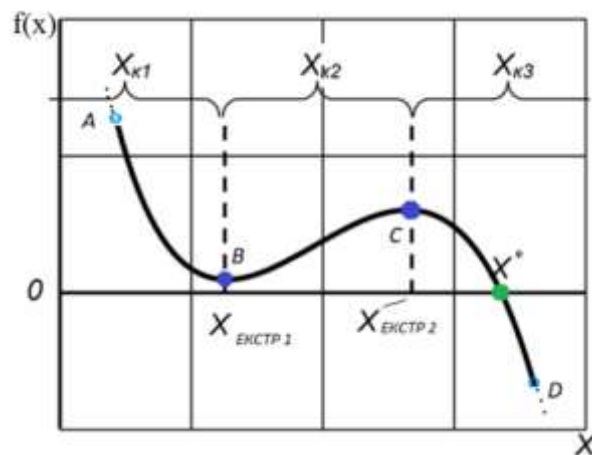


Рис. 2.4. Концепція аналітичного відділення коренів рівняння $f(x)$:
 A, B, C, D – характерні точки; $X_{\text{ЕКСТР}_1}, X_{\text{ЕКСТР}_2}$ – критичні точки функції (корені похідної);
 X_{k1}, X_{k2}, X_{k3} – інтервали монотонності і неперервності функції; X^* – корінь рівняння

З рис. 2.4 видно, що інтервали $[A, B], [B, C]$ не відповідають вимогам теореми 2.1, і, отже, не містять коренів. Натомість, на інтервалі $[C, D]$ корінь присутній, оскільки значення функції $f(D)$ міняє знак у порівнянні з $f(C)$ ($f(C) \cdot f(D) < 0$).

Алгоритм аналітичного методу розділення (локалізації) коренів такий:

- 1) визначити критичні точки (екстремуми) функції $f(x)$:
 - a) знайти першу похідну функції $f'(x)$;
 - b) знайти корені похідної, тобто розв'язати рівняння $f'(x) = 0$;
- 2) скласти таблицю, у перший рядок якої занести такі характерні точки:
 - a) значення x границі області визначення функції $f(x)$ (наприклад, $-\infty, \infty$);
 - b) критичні точки функції (корені похідної) $f'(x) = 0$;
- 3) у другий рядок таблиці занести значення функції $f(x)$ у кожній із характерних точок;
- 4) визначити інтервали між характерними точками, на яких знак функції $f(x)$ змінився;
- 5) у разі необхідності, «звужити» визначені інтервали локалізації коренів, виключивши значення $-\infty, +\infty$.

Зауваження 1. У разі, якщо досліджувана функція монотонна на усій області свого визначення (тобто якщо корені похідної відсутні), у якості характерних точок беруться тільки границі області визначення функції, наприклад $-\infty, +\infty$ [1, 11, 17-19].

Зауваження 2. Якщо якийсь з коренів локалізований на нескінченному інтервалі (наприклад, $x \in (-\infty, -1]$, або $x \in (-\infty, +\infty)$), перед уточненням цього кореню «звужують» інтервал локалізації, позбавляючись від нескінченної межі (або меж). Для вилучення значення нескінченності з границь інтервалу локалізації коренів таблицю характерних точок доповнюють додатковими стовпцями, що містять довільні додаткові значення аргумента в досліджуваному інтервалі (наприклад, для інтервалу $x \in (-\infty, -1]$ додатковими точками можуть бути $x = -10, x = -5, x = -1$ тощо). У додаткових точках таблиці також перевіряють значення функції $f(x)$, і визначають інтервал, на якому знак функції $f(x)$ змінився – див. приклад 2.4. Цілком очевидно, що після «звуження» інтервалів загальна кількість інтервалів, що містять корені функції, залишається незмінною.

Зауваження 3. У разі, якщо досліджувана функція не має дійсних коренів, знак функції у всіх характерних точках є незмінним: функція не

перетинає осі абсцис, і отже, на всій області свого визначення є додатньою або від'ємною.

Аналітичним методом локалізації коренів найчастіше користуються у випадках функцій, для яких існує і легко визначається неперервна похідна, корені якої можна обчислити [1, 3-5, 9, 10, 12, 16, 21-23, 26, 35-37].

Приклад 2.4. Визначити аналітичним методом інтервали локалізації коренів рівняння $f(x) = x^3 - 2,002 \cdot x^2 + 1,277 \cdot x - 0,240 = 0$.

Розв'язок:

1. Визначаємо екстремуми функції, для чого знайдемо першу похідну:

$$f'(x) = 3 \cdot x^2 - 4,004 \cdot x + 1,227 = 0$$

Корені першої похідної визначаємо, розв'язавши квадратне рівняння. Екстремуми функції: $x_1 \approx 0,808$, $x_2 \approx 0,527$.

2. Складаємо таблицю знаків функції в характерних точках (таблиця 2.1). До першого рядку цієї таблиці включаємо характерні точки: границі області визначення та екстремуми.

Підставляємо значення x у характерних точках до функції $f(x) = x^3 - 2,002 \cdot x^2 + 1,277 \cdot x - 0,240 = 0$, до другого рядку таблиці 2.1 заносимо знак функції $f(x)$ у кожній із характерних точок.

Таблиця 2.1. Аналітичний метод локалізації коренів

Характерні точки	$-\infty$	0,527	0,808	$+\infty$
Знак функції $f(x)$	–	+	+	+

3. Аналізуємо другий рядок таблиці на відповідність умовам теореми 2.1. Робимо висновок, що корінь рівняння локалізований на інтервалі $x \in (-\infty, 0,527]$.
4. Значення нескінченності не є зручним для подальших розрахунків. Для вилучення значення нескінченності з границь інтервалу локалізації коренів доповнимо таблицю 2.1 довільними додатковими точками в інтервалі $(-\infty, 0,527]$ – див. таблицю 2.1.

Таблиця 2.2. Аналітичний метод локалізації коренів: виключення нескінченних границь інтервалу

Характерні точки	$-\infty$	-10	0	0,527	0,808	$+\infty$
Знак функції $f(x)$	-	-	-	+	+	+

З таблиці 2.2 робимо висновок, що корінь рівняння локалізований на скінченному інтервалі $x \in [0, 0,527]$.

2.3 МЕТОДИ УТОЧНЕННЯ КОРЕНІВ РІВНЯННЯ

Як вже зазначалося вище, метою етапу уточнення коренів є знаходження із визначеною точністю наближеного значення кореня на кожному з інтервалів локалізації: $x_i^* \in [a_i, b_i]$, $i = \overline{1, \theta}$ (θ – кількість дійсних коренів рівняння).

До сімейства чисельних методів уточнення коренів нелінійних рівнянь належать зокрема, метод половинного поділу, метод дотичних, метод хорд (метод хибного положення), комбінований метод хорд та дотичних, метод ітерацій, кроковий метод (метод сканування) та інші методи [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

Метод половинного поділу (також має назви «метод поділу відрізка навпіл», «дихотомії», «бісекції», або ж «метод проб») є алгоритмічно найпростішим із усіх перелічених методів, при цьому він є найбільш універсальним [1, 5, 9]. Цей метод має таку перевагу в порівнянні з рештою методів – він завжди збігається (тобто гарантує знаходження відповіді). Однак для отримання відповіді із заданою точністю метод половинного поділу вимагає значного обсягу розрахунків (швидкість збіжності методу мала).

Метод ітерацій для розв’язання нелінійних рівнянь (у літературі має назву методу простої ітерації, методу послідовних наближень) також є алгоритмічно простим, швидко збігається, є стійким до помилок, допущених на проміжних етапах розрахунку і порівняно універсальним [1, 11, 12, 28]. Однак перед його використанням потрібне перетворення вихідного рівняння та попереднє проведення додаткових обчислень.

Метод дотичних (також має назву метод Ньютона або ж метод Ньютона-Рафсона) та його модифікації (модифікований метод Ньютона з одноразовим розрахунком похідної, різницевий метод Ньютона, параметричний метод

Ньютона-Шредера-Бодевіга, метод хорд, комбінований метод хорд та дотичних, комбінований метод половинного поділу та дотичних тощо) є ефективними для розв'язання рівнянь, графік яких у околі кореня має велику крутість. Методи мають високу швидкість збіжності, але їх збіжність суттєво залежить від конкретного виду функції. Також, ці методи вимагають розрахунку похідних на кожному з кроків [1, 16-19, 26].

Найбільш поширеними є метод половинного поділу, метод ітерацій та метод Ньютона [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

2.3.1 Метод половинного поділу

Метод половинного поділу базується на наведеній вище теоремі 2.1. Алгоритм методу складається з таких етапів (рис. 2.5) [1, 11, 18]:

Вихідними даними є функція $f(x)$, інтервал локалізації кореня $[a, b]$, точність розрахунку ε .

1. Інтервал локалізації кореня $[a, b]$ ділять навпіл точкою $x = (a + b)/2$.
2. Розраховують значення функції у кінцях відрізка та у центрі відрізка: $f(a), f(b), f(x)$. Якщо $f(a) = 0$, або $f(b) = 0$, або $f(x) = 0$, це значить, що корінь рівняння x^* знайдено достроково: $f(a) = 0 \leftrightarrow x^* = a$; $f(x) = 0 \leftrightarrow x^* = x$; $f(b) = 0 \leftrightarrow x^* = b$. Обчислення закінчено.
3. З двох відрізків $[a, x]$ та $[x, b]$ залишають той, на кінцях якого функція $f(x)$ має протилежні знаки: $f(a) \cdot f(x) < 0$ або $f(x) \cdot f(b) < 0$. Другий відрізок відкидають. Тобто якщо $f(a) \cdot f(x) < 0$, то покладають $b=x$. Інакше (якщо $f(x) \cdot f(b) < 0$), то покладають $a=x$.
4. Перевіряють умову закінчення обчислень (довжина відрізка на поточному кроці розрахунку має бути менше за задане значення точності):

$$(b - a) \leq \varepsilon.$$

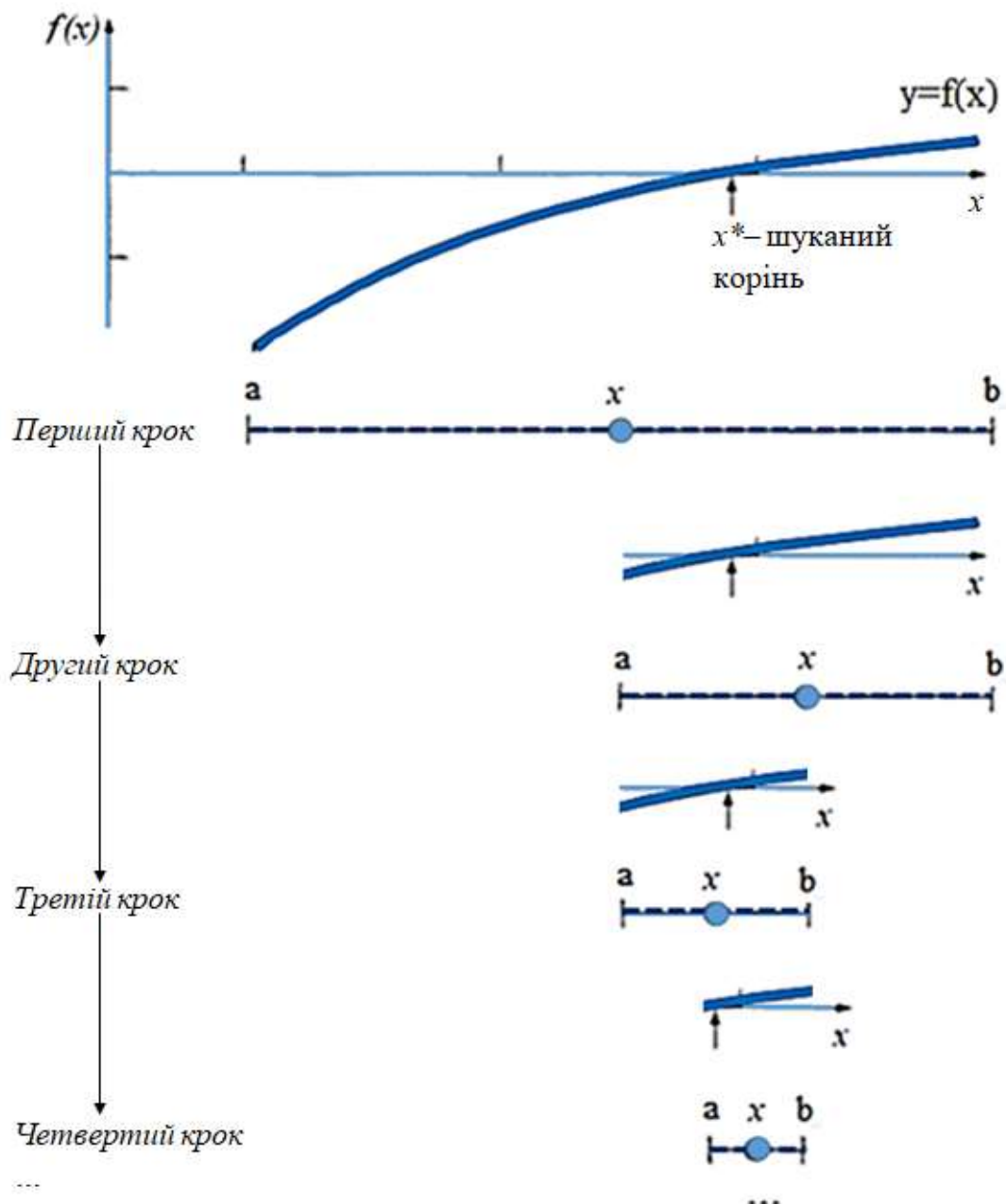


Рис. 2.5. Концепція методу половинного поділу для уточнення коренів рівняння $f(x)$

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то приймають $x^* = x$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п.1 цього алгоритму.

Зауваження. Деякі варіації методу проб передбачають розбиття відрізка локалізації кореня не навпіл, а в деякому іншому співвідношенні [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

Приклад 2.5. Уточнити методом половинного поділу з точністю $\varepsilon = 0,01$ корінь рівняння $f(x) = x^3 + 3 \cdot x - 3 = 0$, локалізований на відрізку $[0, 1]$.

Розв'язок: інтервал локалізації кореня $[0, 1]$ ділимо навпіл точкою $x = (0 + 1)/2 = 0,5$.

Розраховуємо значення функції у кінцях відрізка та у центрі відрізка:

$$f(0) = -3;$$

$$f(0,5) = -1,375;$$

$$f(1) = 1.$$

З двох відрізків $[0, 0,5]$ та $[0,5; 1]$ залишаємо відрізок $[0,5; 1]$, у кінцях якого функція $f(x)$ має протилежні знаки: $f(0) \cdot f(0,5) > 0$, а $f(0,5) \cdot f(1) < 0$. Відрізок $[0; 0,5]$ відкидаємо.

Перевіряємо умову закінчення обчислень:

$$(1 - 0) = 1 > 0,01 = \varepsilon.$$

Оскільки умова закінчення обчислень не виконується, то переходимо до початку алгоритму: інтервал локалізації кореня $[0,5; 1]$ ділимо навпіл точкою $x = (0,5 + 1)/2 = 0,75$ і т.д. Розрахунки зручно представити у вигляді таблиці (рис. 2.6).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2		n	a_n	$x_n = \frac{a_n + b_n}{2}$	b_n	$f(a_n)$	$f(x_n)$	$f(b_n)$	$f(a_n) \cdot f(x_n)$	$f(x_n) \cdot f(b_n)$
3		0	0,0000	0,5000	1,0000	-3,0000	-1,3750	1,0000	4,12500	-1,37500
4		1	0,5000	0,7500	1,0000	-1,3750	-0,3281	1,0000	0,45117	-0,32813
5		2	0,7500	0,8750	1,0000	-0,3281	0,2949	1,0000	-0,09677	0,29492
6		3	0,7500	0,8125	0,8750	-0,3281	-0,0261	0,2949	0,00857	-0,00770
7		4	0,8125	0,8438	0,8750	-0,0261	0,1319	0,2949	-0,00345	0,03891
8		5	0,8125	0,8281	0,8438	-0,0261	0,0523	0,1319	-0,00137	0,00690
9		6	0,8125	0,8203	0,8281	-0,0261	0,0129	0,0523	-0,00034	0,00068
10		7	0,8125	0,8164	0,8203	-0,0261	-0,0066	0,0129	0,00017	-0,00009

Рис. 2.6. Уточнення кореня рівняння методом половинного поділу (до прикладу 2.5)

Остаточно приймаємо $x^* = 0,8164$. Округлимо знайдений корінь у відповідності до заданого значення точності $x^* \approx 0,82$. Обчислення закінчено.

2.3.2 Метод ітерацій

Нехай задано функцію $f(x)$, інтервал локалізації кореня $[a, b]$ та точність розрахунку ε .

Суть методу ітерацій полягає у знаходженні за певним наближеним значенням шуканого кореня (наближенням) величини наступного наближення, що є більш точним [1, 3-5, 35-37]. Алгоритм методу ітерацій складається з таких етапів:

1. Подають функцію $f(x)$ у спеціальному представленні (2.7), що має назву *ітераційної функції*.

$$x = \varphi(x). \quad (2.7)$$

Зауваження. Ітераційну функцію (2.7) у багатьох випадках можна отримати алгебраїчним перетворенням, виразивши x з функції $f(x)$.

Наприклад, для функції $f(x) = x^3 - 2 \cdot x - 3$, безпосереднім алгебраїчним перетворенням можна отримати ітераційну функцію $x = \varphi(x) = \frac{x^3 - 3}{2} = 0,5 \cdot x^3 - 1,5$, або ітераційну функцію $x = \varphi(x) = \sqrt[3]{2 \cdot x + 3}$.

Рекомендується така послідовність побудови ітераційної функції, яка гарантує отримання збіжної ітераційної послідовності:

- 1) розраховують похідну досліджуваної функції $f'(x)$;
- 2) знаходять значення:

$$Q = \max_{x \in [a, b]} |f'(x)|.$$

- 3) обирають константу k з умови:

$$|k| \geq \frac{Q}{2};$$

- 4) При цьому знак константи k має збігатись зі знаком похідної $f'(x)$ на відрізку локалізації кореня $[a, b]$.

5) будують ітераційну функцію за формулою:

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{k}. \quad (2.8)$$

2. Оцінюють виконання умови збіжності для ітераційної функції $\varphi(x)$.

Для цього:

1) розраховують допоміжне значення q :

$$q = \max_{x \in [a, b]} |\varphi'(x)|, \quad (2.9)$$

2) перевіряють умову збіжності ітераційного процесу:

$$|\varphi(x)| \leq q < 1. \quad (2.10)$$

Якщо умова збіжності не виконується, слід змінити ітераційну формулу (наприклад, можна збільшити значення константи k) і повертаються до п.2 цього алгоритму.

3. У якості початкового наближення ітераційного процесу беруть довільне число з інтервалу локалізації кореня $x_0 \in [a, b]$.

4. Обчислюють послідовне наближення кореня:

$$x_i = \varphi(x_{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

5. Перевіряють умову закінчення обчислень:

$$|x_i - x_{i-1}| \leq \varepsilon \frac{1 - q}{q},$$

де q – допоміжне значення, розраховане за (2.9).

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то приймають $x^* = x_i$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п.4 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Зауваження. Відповідність ітераційної функції $\varphi(x)$ достатній умові

збіжності ітераційного процесу (2.10) забезпечує *збіжність* ітераційної послідовності [1, 28]. Строге визначення поняття збіжності певної послідовності дається у курсі математичного аналізу; зазначимо лише, що у практичному сенсі *збіжність* – це послідовне «покращення» розв’язку, тобто послідовне *наближення* поточних значень x_i (2.11) до шуканого кореня рівняння x^* .

Для графічного дослідження збіжності ітераційного процесу у випадку алгебраїчних та трансцендентних рівнянь з однією невідомою діють таким чином (рис. 2.7). Оскільки згідно визначення ітераційної функції (2.7) $x = \varphi(x)$, то будують в одній системі координат графіки функцій $y = x$ та $y = \varphi(x)$. Шуканим коренем x^* є абсциса перетину кривої $y = \varphi(x)$ із прямою $y = x$. Ітераційний процес із вибору значення x_0 (початкового, або ж нульового наближення) на осі ОХ. Від початкового наближення проводять вертикальну (паралельну осі ОУ) пряму до перетину із графіком $y = \varphi(x)$, тобто до точки $\varphi(x_0)$. Через точку $\varphi(x_0)$ проводять горизонтальну (паралельну осі ОХ) пряму до перетину із лінією $y = x$; абсциса знайденої точки перетину відповідатиме x_1 – наступному (першому) наближенню ітераційного процесу. Від першого наближення проводять вертикальну пряму до перетину із графіком $y = \varphi(x)$, тобто до точки $\varphi(x_1)$. В подальшому аналогічно шукають $x_2, \varphi(x_2), x_2$ і т.д.

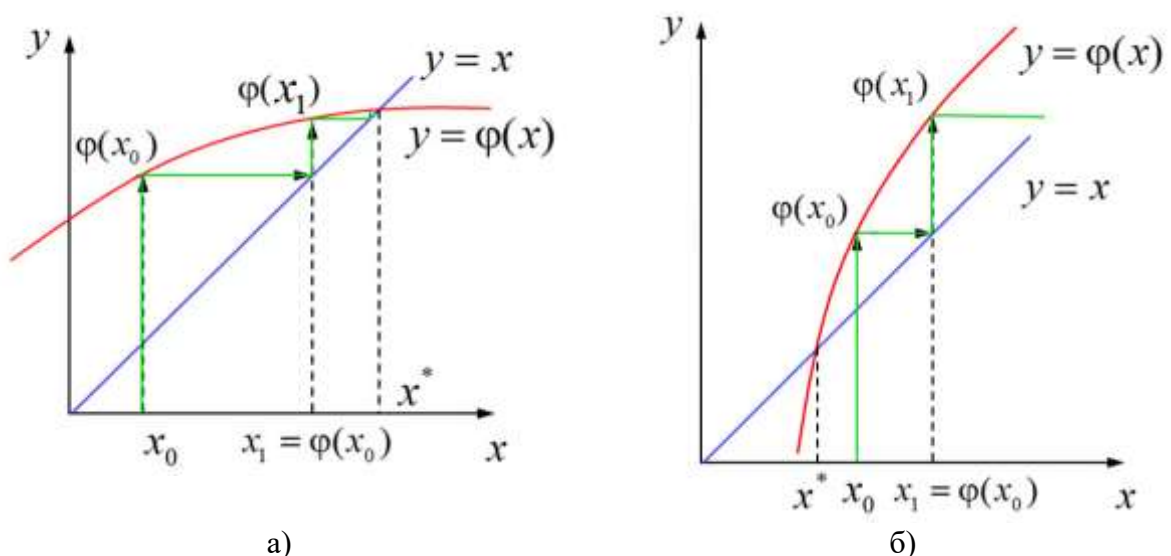


Рис. 2.7. Збіжна та незбіжна ітераційні послідовності:
а - один з варіантів збіжної послідовності (однобічна збіжність); б - розбіжна послідовність

Якщо умова збіжності ітераційного процесу (2.10) виконується, поточні значення x_i в ході ітераційного процесу *наближатимуться* до шуканого кореня рівняння x^* . Одному з варіантів збіжного ітераційного процесу (випадку так званої «однобічної», або ж «монотонної» збіжності) відповідає рис. 2.7, а. Існує також вид збіжності, коли послідовні наближення в ітераційному процесі «коливаються» навколо шуканого кореня («двобічна» збіжність).

Якщо умова збіжності ітераційного процесу (2.10) не виконується, поточні значення x_i в ході ітераційного процесу *віддалятимуться* від шуканого кореня рівняння x^* , внаслідок чого розв'язок задачі методом ітерацій *знайдено не буде* (рис. 2.7, б).

Приклад 2.6. Розв'язати завдання з прикладу 2.5 методом ітерацій, тобто уточнити методом ітерацій з точністю $\varepsilon=0,01$ корінь рівняння $f(x) = x^3 + 3 \cdot x - 3 = 0$, локалізований на відрізьку $[0, 1]$.

Розв'язок: побудуємо ітераційну функцію за формулою (2.8).

$$f'(x) = 3 \cdot x^2 + 3; f'(0) = 3; f'(1) = 6.$$

$$Q = \max_{x \in [0,1]} |f'(x)| = 6.$$

$$\frac{f'(x)}{x \in [a,b]} > 0; \frac{Q}{2} = 3.$$

$$\text{Обираємо значення } k = 10 \geq 3 = \frac{Q}{2}.$$

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{k} = x - \frac{x^3 + 3 \cdot x - 3}{10} = x - 0,1 \cdot x^3 - 0,3 \cdot x + 0,3.$$

$$\varphi(x) = 0,1 \cdot x^3 + 0,7 \cdot x + 0,3.$$

Оцінюємо виконання умови збіжності (2.10) для ітераційної функції $\varphi(x)$: $\varphi'(x) = -0,3 \cdot x^2 + 0,7$; $\varphi'(0) = 0,7$; $\varphi'(1) = 0,4$.

$$q = \max_{x \in [0,1]} |\varphi'(x)| = 0,7;$$

$$q = 0,7 < 1.$$

Достатня умова збіжності (2.10) для побудованої ітераційної функції виконується, тому продовжуємо розрахунки.

Розрахуємо праву частину умови закінчення обчислень:

$$\varepsilon \cdot \frac{1 - q}{q} = 0,01 \cdot \frac{1 - 0,7}{0,7} = 0,00429.$$

У якості початкового наближення ітераційного процесу беремо число $x_0 = 0 \in [0, 1]$.

Обчислюємо перше наближення кореня:

$$x_1 = \varphi(x_0) = 0,1 \cdot 0^3 + 0,7 \cdot 0 + 0,3 = 0,3.$$

Перевіряємо виконання умови закінчення обчислень:

$$|x_i - x_{i-1}| = |0,3 - 0| = 0,3 > 0,00429.$$

$i = 1$

Умова закінчення обчислень не виконується, тому продовжуємо обчислення.

Обчислюємо друге наближення кореня:

$$x_2 = \varphi(x_{01}) = 0,1 \cdot 0,3^3 + 0,7 \cdot 0,3 + 0,3 = 0,507$$

і т. д.

Розрахунки зручно представити у вигляді таблиці (див. рис. 2.8).

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2		i	x_i	$\varphi(x_i)$	$ x_i - x_{i-1} $	Критерій закінч.	$\varepsilon \cdot \frac{1-q}{q} =$
3		0	0,0000	0,3000			4,29E-03
4		1	0,3000	0,5073	0,2073	Продовж.	
5		2	0,5073	0,6421	0,1348	Продовж.	
6		3	0,6421	0,7230	0,0809	Продовж.	
7		4	0,7230	0,7683	0,0453	Продовж.	
8		5	0,7683	0,7925	0,0242	Продовж.	
9		6	0,7925	0,8050	0,0125	Продовж.	
10		7	0,8050	0,8113	0,0064	Продовж.	
11		8	0,8113	0,8145	0,0032	Закінч.	

Рис. 2.8. Уточнення кореня рівняння методом ітерацій (до прикладу 2.6)

Остаточно приймаємо $x^* = 0,8145$. Округлимо знайдений корінь у відповідності до заданого значення точності: $x^* \approx 0,82$. Обчислення закінчено.

2.3.3 Метод Ньютона

Метод Ньютона базується на припущенні, що на певному достатньо малому відрізку $[a, b]$ функція $y = f(x)$ змінюється лінійно, і криву $f(x)$ на вказаному відрізку $[a, b]$ можна замінити дотичною до функції, прийнявши на певному кроці в якості наближеного значення кореня точку перетину дотичної з віссю ОХ.

Отже, суть методу Ньютона (методу дотичних) полягає у такому: якщо x_i — деяке наближення до кореня рівняння $f(x) = 0$, то наступне наближення визначається як *корінь дотичної* до функції $f(x)$, проведеної в точці x_k (рис. 2.9). У цьому випадку на основі рівняння дотичної до функції у точці (відомого із курсу математичного аналізу) можна записати:

$$y = f(x_k^*) + (x_{k+1}^* - x_k^*) \cdot f'(x_k^*), \quad (2.12)$$

де x_k^* — k -те наближення шуканого кореня, x_{k+1}^* — $(k + 1)$ -ше наближення шуканого кореня.

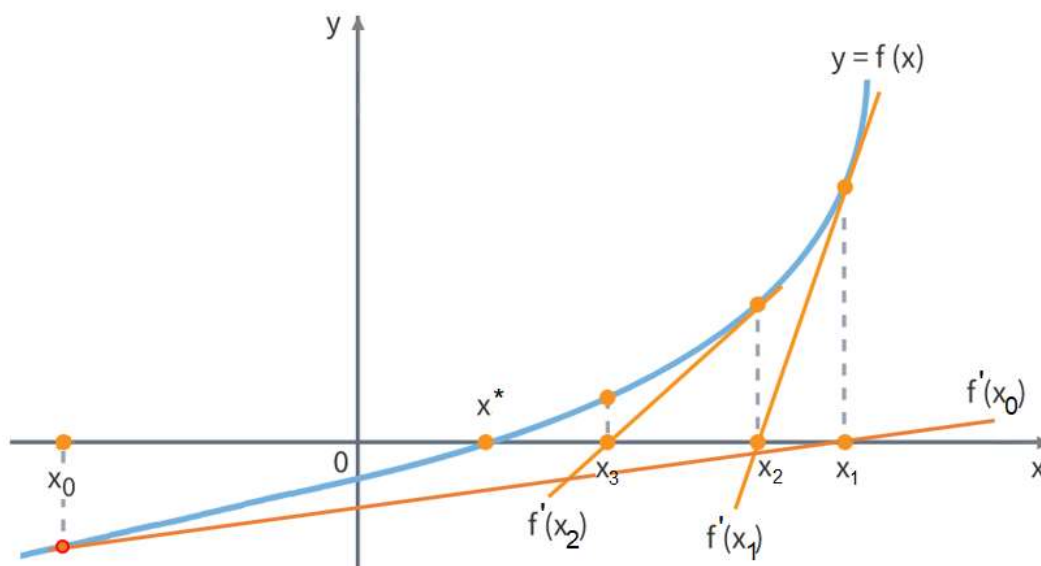


Рис. 2.9. Концепція методу дотичних (Ньютона) для уточнення кореня рівняння (наведено наближення 0, 1, 2, 3)

Якщо у рівнянні дотичної (2.12) покласти $y = 0$, $x_i = x_{k+1}^*$, $x_{i-1} = x_k^*$, то формула розрахунку послідовних наближень для методу Ньютона набуває вигляду:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})},$$

$$i = 1, 2, \dots, \quad f'(x) \neq 0$$

$$x \in [a, b]. \quad (2.13)$$

Вихідними даними для розрахунку за методом Ньютона є функція $f(x)$, інтервал локалізації кореня $[a, b]$ та точність розрахунку ϵ .

Додатково для методу Ньютона вимагається існування першої та другої похідних функції $f(x)$. Вказані похідні $f'(x)$ та $f''(x)$ на інтервалі локалізації кореня $[a, b]$ мають бути неперервними і знакосталими [1, 9, 10, 21-23].

Алгоритм методу Ньютона складається з таких етапів:

1. Знаходять похідну досліджуваної функції $f'(x)$.
2. У якості початкового наближення ітераційного процесу беруть довільне число з інтервалу локалізації кореня $x_0 \in [a, b]$.
3. Обчислюють послідовне наближення кореня за (2.13).
4. Перевіряють умову закінчення обчислень:

$$|x_i - x_{i-1}| \leq \varepsilon.$$

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то приймають $x^* = x_i$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п. 3 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Приклад 2.7. Розв'язати завдання з прикладу 2.5 методом Ньютона, тобто уточнити методом дотичних з точністю $\varepsilon = 0,01$ корінь рівняння $f(x) = x^3 + 3 \cdot x - 3 = 0$, локалізований на відрізку $[0, 1]$.

Розв'язок: побудуємо формулу розрахунку послідовних наближень для методу Ньютона за (2.13):

$$f'(x) = 3 \cdot x^2 + 3. \quad f'(0) = 3 > 0. \quad f'(1) = 6 > 0.$$

$$f''(x) = 6 \cdot x. \quad f''(0), f''(1) \geq 0.$$

$$x_i = x_{i-1} - \frac{x_{i-1}^3 + 3 \cdot x_{i-1} - 3}{3 \cdot x_{i-1}^2 + 3}.$$

У якості початкового наближення ітераційного процесу беремо число $x_0 = 0 \in [0, 1]$.

Обчислюємо перше наближення кореня:

$$x_1 = 0 - \frac{0^3 + 3 \cdot 0 - 3}{3 \cdot 0^2 + 3} = 1.$$

Перевіряємо виконання умови закінчення обчислень:

$$|x_i - x_{i-1}|_{i=1} = |1 - 0| = 1 > 0,01.$$

Умова закінчення обчислень не виконується, тому продовжуємо обчислення.

Обчислюємо друге наближення кореня:

$$x_2 = 1 - \frac{1^3 + 3 \cdot 1 - 3}{3 \cdot 1^2 + 3} = 0,833$$

і т. д.

Розрахунки зручно представити у вигляді таблиці (рис. 2.10).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1									$\varepsilon = 1$
2	Метод дотичних для нелінійних рівнянь з одним невідомим								
3		i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	$\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$	$x_i - x_{i-1}$	Критерій закінч.	
4		0	0	-3	3	-1			
5		1	1,0000	1,0000	6,0000	0,1667	1,0000	продовж.	
6		2	0,8333	0,0787	5,0833	0,0155	0,1667	продовж.	
7		3	0,8179	0,0006	5,0066	0,0001	0,0155	продовж.	
8		4	0,8177	0,0000	5,0061	0,0000	0,0001	закінч.	

Рис. 2.10. Уточнення кореня рівняння методом Ньютона (до прикладу 2.7)

Остаточно приймаємо $x^* = 0,8177$. Округлимо знайдений корінь у відповідності до заданого значення точності $x^* \approx 0,82$. Обчислення закінчено.

Зауваження 1. Як видно з рис. 2.9, розміщення наступного наближення x_{i+1} ітераційної послідовності визначається тільки кутом нахилу дотичної до функції $f(x)$ у точці x_i . Таким чином, *неможливо уточнити корінь на заданому інтервалі локалізації*, що є одним із недоліків методу Ньютона.

Зауваження 2. Як видно з вищенаведеного, застосування методу Ньютона вимагає обчислення виразів похідних рівняння $f(x)$: першої похідної рівняння для «основних розрахунків», і першої та (в загальному випадку) другої похідних для попередньої перевірки збіжності методу. Іноді аналітичне знаходження похідних заданої функції є ускладненим або неможливим [1, 28]. У цьому випадку застосовують *різницьевий метод Ньютона*: замість аналітичного диференціювання функції у методі Ньютона використовують методи наближеного скінченно-різницевого *чисельного диференціювання* (див. відповідний розділ нижче). Зокрема, значення першої похідної у заданій точці можна розрахувати за співвідношенням:

$$f'(x_i) = \frac{f'(x_i + h) - f'(x_i - h)}{2 \cdot h}, \quad (2.14)$$

де $h = \min_{x_i \in [a,b]} \{(0,01 \cdot x_i); 001\}$ – деяке мале число.

У складі програмних продуктів високого рівня, призначених для пошуку коренів нелінійних рівнянь (наприклад, у вбудованому до MS Excel компоненті «Підбір параметру» [41-43]) часто використовують *комбінацію кількох чисельних методів* уточнення коренів.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 2

1. Навести і пояснити алгоритм графічного методу локалізації коренів нелінійного рівняння з одним невідомим.
2. Навести і пояснити алгоритм аналітичного методу локалізації коренів нелінійного рівняння з одним невідомим.
3. За якими ознаками роблять висновок про відсутність у рівняння дійсних коренів в ході реалізації графічного, аналітичного методів локалізації коренів нелінійного рівняння з одним невідомим?
4. Навести і пояснити алгоритм методу половинного поділу для уточнення кореня нелінійного рівняння з одним невідомим.
5. Яка умова закінчення обчислень за методом половинного поділу? У якому випадку можливе дострокове закінчення обчислень за методом половинного поділу?
6. Навести і пояснити алгоритм методу ітерацій для уточнення кореня нелінійного рівняння з одним невідомим.
7. Що таке збіжність ітераційної послідовності? Як перевіряється збіжність ітераційної послідовності у методі ітерацій для уточнення кореня нелінійного рівняння з одним невідомим?
8. Як обирається початкове значення під час уточнення кореня нелінійного рівняння з одним невідомим методом ітерацій? Чи залежить збіжність ітераційної послідовності від вибору початкового значення?
9. Із використанням двох термопар, підключених назустріч одна одній, вимірюють термо-ЕРС (електрорушійну силу). При цьому один зі спаїв має температуру досліджуваного об'єкту, а другий спай термостатують при 0 °С.

Після проведення серії експериментів з дослідження термо-ЕРС двох термопар ($Ni - CrNi$), підключених назустріч одна одній та проведення математичної обробки результатів експериментів отримано таку залежність, що зв'язує температуру гарячого спаю термопари з термо-ЕРС холодного і гарячого спаїв термопари¹:

$$C \approx 25,4498 \cdot V - 0,5592 \cdot V^2 + 0,1045 \cdot V^3 - 8,7761 \cdot 10^{-3} \cdot V^4 + 3,7604 \cdot 10^{-4} \cdot V^5 - 8,6494 \cdot 10^{-6} \cdot V^6.$$

Визначити термо-ЕРС V за температури $C_{val} = 18,25$ °C:

$$f(V) = 25,4498 \cdot V - 0,5592 \cdot V^2 + 0,1045 \cdot V^3 - 8,7761 \cdot 10^{-3} \cdot V^4 + 3,7604 \cdot 10^{-4} \cdot V^5 - 8,6494 \cdot 10^{-6} \cdot V^6 - 18,25 = 0.$$

Виконання завдання має включати:

- а) локалізацію коренів графічним методом;
- б) уточнення кореня на одному з інтервалів локалізації чисельними методами половинного поділу та ітерацій;
- в) порівняння результатів уточнення коренів.

10. Радіальна хвильова функція $R(r)$ $3s$ -електрона у збудженому атомі Гідрогену має вигляд²:

$$R(r) = c \left(27 - \frac{18R}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2} \right) \cdot e^{-r/3 \cdot a_0},$$

де r – відстань між електроном та ядром (протоном), 10^{-10} м, c та a_0 – константи хвильової функції.

Після уведення до наведеної вище хвильової функції заміन $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$ м, $c = 1$, $x = r/a_0$ та перетворення можна отримати рівняння:

$$R(x) = (27 - 18 \cdot x + 2 \cdot x^2) \cdot e^{-x/3} = 0.$$

Розв'язати вказане рівняння, знайшовши таке (або такі) значення x^* , щоб $R(x^*) = 0$:

- а) локалізувати корені рівняння на інтервалі $x \in [0, 15]$ графічним

¹ Ebert K., Ederer H. Computeranwendungen in der Chemie. Weinheim: Verlag Chemie, 1983, 359 s.

² Johnson K. J. Numerical Methods in Chemistry. New York: Marcel Dekker, Inc., 1980, 278 p.

методом;

б) уточнити усі локалізовані корені чисельними методами половинного поділу та ітерацій;

в) порівняти результати уточнення коренів різними чисельними методами.

11. Розв'язати рівняння (2.4) з прикладу 2.1, поклавши $T_{val} = 298,2 \text{ K}$:

а) локалізувати корені рівняння графічним та аналітичним методами;

б) уточнити один з локалізованих коренів чисельними методами половинного поділу та ітерацій;

в) порівняти результати уточнення коренів різними чисельними методами.

12. Розв'язати рівняння (2.5) з прикладу 2.2, поклавши $y_{val} = 0,955$.

Виконання завдання має включати:

а) локалізацію коренів графічним методом;

б) уточнення кореня на одному з інтервалів локалізації чисельними методами половинного поділу та ітерацій;

в) порівняння результатів уточнення коренів.

13. Дослідниками проведено математичне опрацювання (апроксимацію) експериментальних даних – залежності кількості Сульфур (IV) оксиду, адсорбованого силікагелем (y , % від маси адсорбенту), від концентрації Сульфур (IV) оксиду в газовій фазі (x , % об.). За даними, виміряними в ході експерименту, отримано таку математичну залежність:

$$y(x) \approx 3,6923 + 3,0837 \cdot x - 0,1773 \cdot x^2 + 0,0038 \cdot x^3.$$

Очевидно, що маючи значення аргументу (тобто x), можна розрахувати шукане значення y підстановкою у наведене рівняння.

Потрібно знайти x – концентрацію Сульфур (IV) оксиду в газовій фазі за кількості адсорбованого оксиду $y_{val} = 17,50$ %:

$$f(x) = 3,6923 + 3,0837 \cdot x - 0,1773 \cdot x^2 + 0,0038 \cdot x^3 - 17,50 = 0,$$

тобто

$$f(x) = 0,0038 \cdot x^3 - 0,1773 \cdot x^2 + 3,0837 \cdot x - 13,8077 = 0.$$

Виконання завдання має включати:

а) локалізацію коренів графічним та аналітичним методом;

б) уточнення кореня на одному з інтервалів локалізації чисельними методами половинного поділу та ітерацій;

в) порівняння результатів уточнення коренів.

14. За даними завдання 13 знайти x – концентрацію Сульфур (IV) оксиду в газовій фазі, поклавши кількість адсорбованого оксиду $y_{val} = 22,0923 \%$.

Виконання завдання має включати:

а) локалізацію коренів графічним та аналітичним методом;

б) уточнення кореня на одному з інтервалів локалізації чисельними методами ітерацій та Ньютона;

в) порівняння результатів уточнення коренів.

3 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

3.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 3

Систему лінійних рівнянь розв'язують, коли йдеться про взаємодію кількох явищ, кожне з яких має лінійну природу (і тому їх можна описати лінійними рівняннями) [1, 18]. Лінійну природу має, зокрема, залежність властивостей ідеальних сумішей від концентрації компонентів, залежність складу пари та парціального тиску компонентів над ідеальними розчинами від концентрації цих розчинів, залежність швидкості реакції першого порядку від концентрації вихідних речовин, параметри теплообмінних та масообмінних процесів в стаціонарних умовах тощо [11, 19]. До розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь може бути зведена також задача урівнювання хімічних реакцій (включаючи складні окисно-відновні реакції).

Системою лінійних алгебраїчних рівнянь, що містить m рівнянь та n невідомих, називається система вигляду:

[illegible]

де a_{ij} ($i = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, n}$) називаються коефіцієнтами системи, b_i ($i = \overline{1, m}$) – вільними членами системи рівнянь; при розв’язанні системи коефіцієнти та вільні члени мають представлені числовими значеннями.

Підлягають знаходженню значення *коренів* системи рівнянь x_j^* ($j = \overline{1, n}$), тобто такі значення, які у разі підстановки у ліву частину рівнянь дають з правою частиною рівнянь тотожну рівність.

У випадку систем лінійних рівнянь розмірність системи (тобто кількість змінних, кількість рівнянь) може коливатися у широкому діапазоні від 2-3 змінних до кількох тисяч змінних.

В якості прикладів розглянемо деякі практичні задачі з хімії та хімічної технології, розв'язання яких зводиться до розв'язання систем лінійних

рівнянь [1, 3, 4, 12, 16-19, 21-23, 27, 29, 33, 35-37, 45].

Приклад 3.1. Розрахунок матеріальних балансів підсистеми розділення суміші у складі хіміко-технологічної системи (рис. 3.1).

Вихідними даними є масова витрата вхідного (першого) потоку $^1F = 10 \text{ кг/год}$, склад вхідного потоку у вигляді масових часток по двох цільових компонентах $^1w_1 = 0,2$, $^1w_2 = 0,6$, а також параметри кожної з ректифікаційних колон (апаратів розділення), задані як масові частки компонентів: $^2w_1 = 0,04$, $^4w_1 = 0,54$, $^5w_1 = 0,26$, $^2w_2 = 0,93$, $^4w_2 = 0,24$, $^5w_2 = 0$. Ставиться задача обчислити масові витрати потоків на виході кожного з апаратів розділення (потоки 2, 4 і 5).

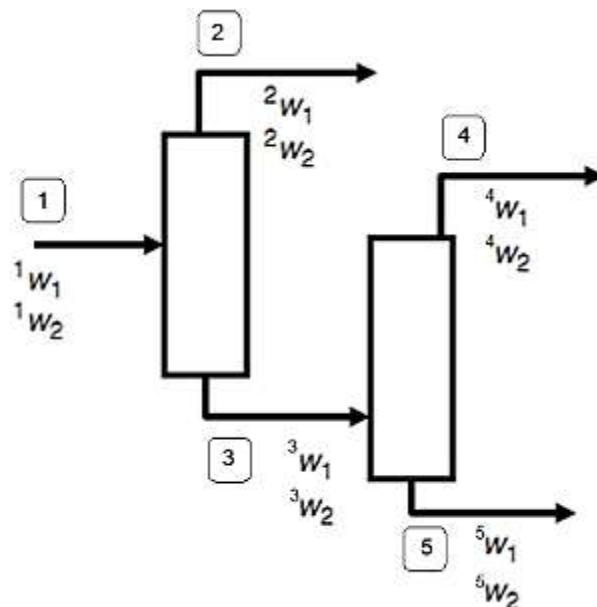


Рис. 3.1. Підсистема розділення суміші в складі хіміко-технологічної системи:
 ^iF – масова витрата потоку i , кг/год, $i = \overline{1,5}$, ^iw_j – масова частка у i -тому потоці
 компоненту j , $i = \overline{1,5}$, $j = \overline{1,2}$.

Розв'язок: складемо матеріальні баланси:

1. Загальний баланс: $^1F = ^2F + ^3F = ^2F + ^4F + ^5F$.
2. За компонентом 1: $^1w_1 \cdot ^1F = ^2w_1 \cdot ^2F + ^4w_1 \cdot ^4F + ^5w_1 \cdot ^5F$.
3. За компонентом 2: $^1w_2 \cdot ^1F = ^2w_2 \cdot ^2F + ^4w_2 \cdot ^4F + ^5w_2 \cdot ^5F$.

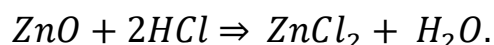
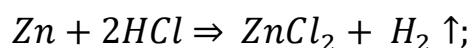
Після підстановки чисельних значень, введення заміन $x_1 = ^2F$, $x_2 = ^4F$, $x_3 = ^5F$ і належних спрощень отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 10 \\ 0,04 \cdot x_1 + 0,54 \cdot x_2 + 0,26 \cdot x_3 = 2 \\ 0,93 \cdot x_1 + 0,24 \cdot x_2 + 0,00 \cdot x_3 = 6. \end{cases} \quad (3.2)$$

Розв'язання системи з трьох алгебраїчних рівнянь (3.2) дасть корені системи рівнянь – трійку чисел $X^* = \{x_1^*, x_2^*, x_3^*\}$.

Приклад 3.2. Для розчинення суміші металічного цинку і оксиду цинку (маса суміші $m_{\text{суміші}} = 10,7$ грамів) було витрачено $m_{\text{розч}} = 100$ г водного розчину хлоридної кислоти з масовою часткою $\omega(HCl) = 10,22$ %. Визначити склад суміші.

Взаємодія відбувається за рівняннями:



Розв'язок: позначимо x – кількість металічного цинку, y – кількість оксиду цинку у суміші. Тоді, як витікає з рівнянь реакції, із Zn вступило в реакцію $2x$ хлорводневої кислоти, з ZnO вступило в реакцію $2y$ хлорводневої кислоти.

Виходячи із законів збереження,

$$\begin{cases} 2 \cdot x + 2 \cdot y = n(HCl) \\ M(Zn) \cdot x + M(ZnO) \cdot y = m_{\text{суміші}}, \end{cases} \quad (3.3)$$

де $n(HCl)$ – кількість речовини, моль, $M(Zn) = 65$, $M(ZnO) = 81$ – молярні маси, г/моль.

Маса безводної хлорводневої кислоти:

$$m(HCl) = \omega(HCl) \cdot m_{\text{розч}} = \frac{10,22 \%}{100 \%} \cdot 100 \text{ г} = 10,22 \text{ г}.$$

Кількість речовини $n(HCl)$, з урахуванням молярної маси $M(HCl) = 36,5$ г/моль:

$$n(\text{HCl}) = \frac{m(\text{HCl})}{M(\text{HCl})} = \frac{10,22 \text{ г}}{36,5 \text{ г/моль}} = 0,28 \text{ г.}$$

Таким чином, з (3.3) можна отримати:

$$\begin{cases} 2 \cdot x + 2 \cdot y = 0,28 \\ 65 \cdot x + 81 \cdot y = 10,7. \end{cases} \quad (3.4)$$

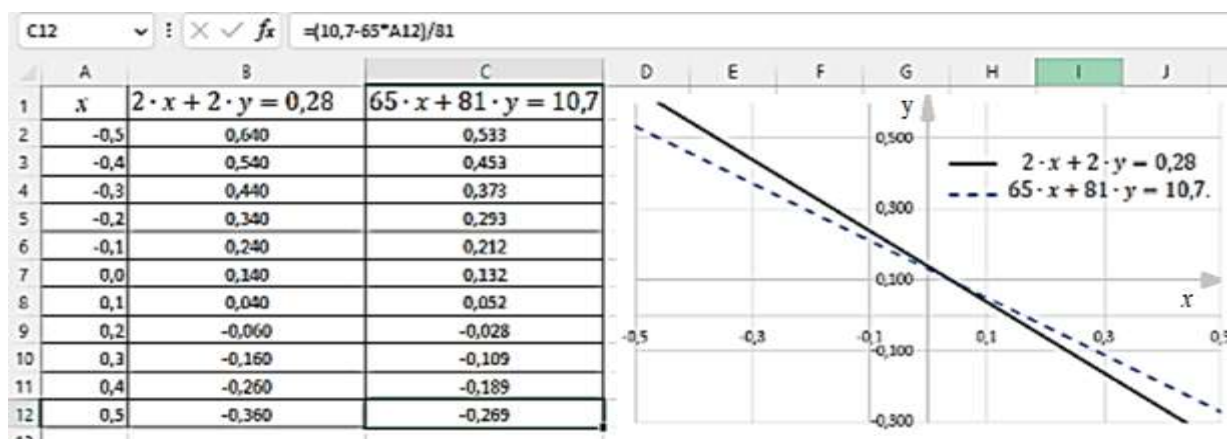


Рис. 3.2. Графічна репрезентація системи лінійних рівнянь для прикладу 3.2 (випадок двох рівнянь та двох змінних)

Розв'язання системи зі двох алгебраїчних рівнянь (3.4) дасть корені системи рівнянь – пару чисел $X^* = \{x_1^*, x_2^*\}$.

У найпростіших випадках – для системи з двох, іноді для трьох лінійних рівнянь, – корінь можна приблизно знайти графічно, як точку (точки) перетину ліній (площин), які відповідають рівнянням системи (рис. 3.1). Проте у загальному випадку такий підхід не може бути застосований.

Умови існування розв'язків систем лінійних рівнянь докладно вивчаються в розділі вищої математики – «Матричній алгебрі». Тут обмежимося лише необхідними стислими відомостями.

Система лінійних алгебраїчних рівнянь може мати *єдиний розв'язок* у разі, якщо матриця коефіцієнтів цієї системи – *квадратна*, тобто якщо кількість лінійно незалежних рівнянь системи дорівнює кількості змінних $m = n$.

У цьому випадку систему рівнянь (3.1) можна записати у вигляді.

[illegible]

Оскільки методи розв'язання систем лінійних рівнянь передбачають операції з матрицями, систему (3.5) часто записують у матричному вигляді:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

або в компактному матричному вигляді:

$$A \cdot X = B, \quad (3.7)$$

де $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$ – матриця коефіцієнтів системи (яка також має

назву матриці системи або основної матриці), $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець

невідомих $x_j (j = \overline{1, n})$, $B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець вільних

членів b_i ($i = n$).

При цьому добуток матриць $A \cdot X$ визначений і можливий, оскільки відповідає правилам перемноження матриць: у матриці A стовпців стільки ж, скільки рядків у матриці X .

Матриця системи A , що доповнена стовпцем вільних членів B , називається *розширеною матрицею системи $\bar{A}$* :

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Можна також стверджувати, що у випадку $m < n$ система не матиме розв'язку, а $m > n$ – матиме нескінченну кількість розв'язків.

Нижче йтиметься про методи розв'язання систем лінійних рівнянь вигляду (3.5), для яких кількість рівнянь дорівнює кількості змінних ($m=n$). Однак, за певних спеціальних умов, частина з цих методів застосовна також для випадку $m > n$.

Нині запропоновано значну кількість ефективних методів розв'язання систем лінійних рівнянь [1, 5, 9, 10-12, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]. Ці методи можна поділити на два класи: прямі (скінченні) та ітераційні (нескінченні).

Прямі методи використовують скінченні співвідношення (формули) для обчислення невідомих. Такі методи дають розв'язок після виконання заздалегідь відомої кількості операцій [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23]. Вони порівняно прості і досить універсальні (тобто придатні для розв'язку широкого класу лінійних систем). Недоліком прямих методів є висока ресурсоемність через необхідність зберігати в оперативній пам'яті комп'ютера відразу всю матрицю системи, розширену матрицю, а також небезпека накопичення похибок у процесі розв'язування (це є негативним фактором у випадку розв'язання систем великої розмірності, а також деяких інших систем рівнянь з особливою структурою матриці системи – з розрідженою матрицею, виродженою матрицею тощо).

Ітераційні методи (основну концепцію яких вже було представлено раніше на прикладі методу ітерацій для розв'язання нелінійних рівнянь з одним невідомим) є менш ресурсоемними, оскільки вимагають зберігання в пам'яті комп'ютера не всієї матриці системи, а лише кількох векторів з n компонентами; похибки у ході використання ітераційних методів не накопичуються, оскільки точність обчислень на кожній ітерації у загальному випадку не залежить прямим чином від раніше виконаних обчислень. Однак під час використання ітераційних методів фахівці подекуди стикаються з

проблемами збіжності ітераційної послідовності [1, 5, 9, 30, 32, 33, 39, 45].

До прямих належать матричний метод (метод оберненої матриці), метод Крамера, метод Гауса (або ж метод послідовного виключення змінних), метод Гауса-Жордана, метод LU-розкладу та інші методи. До класу ітераційних належать, зокрема, методи Якобі (також має назву методу простої ітерації), ітераційний метод Гауса-Зейделя (відомий також як метод Зейделя, процес Лібмана, метод послідовних заміщень), блочної релаксації.

Іноді окремо виділяють методи, розроблені для розв'язання систем лінійних рівнянь *спеціального вигляду* (зокрема, метод Томаса для розв'язання систем рівнянь із *тридіагональною* матрицею коефіцієнтів, та ін.).

3.2 ПРЯМІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

З числа скінченних (прямих) методів розв'язання систем лінійних алгебраїчних розв'язання рівнянь часто використовують матричний метод (метод оберненої матриці) та метод Крамера (в разі *невеликої розмірності* систем), а також метод Гауса (послідовного виключення змінних) і його модифікації [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

3.2.1 Метод оберненої матриці

Метод оберненої матриці застосовний до систем лінійних рівнянь, де кількість змінних збігається з кількістю лінійно незалежних рівнянь.

Зауваження. Рівняння системи вважаються *лінійно незалежними*, якщо жодне рівняння не є лінійною комбінацією решти рівнянь. Метод базується на застосуванні властивостей множення матриць.

Нехай потрібно розв'язати систему рівнянь (3.5), причому матриця даної системи є невиродженою $\det A \neq 0$.

Систему (3.5) можна подати у матричному представленні (3.6), (3.7). Перемноживши обидві частини рівності (3.7) *зліва* на обернену матрицю A^{-1} , отримуємо:

$$A^{-1} \cdot A \cdot X = A^{-1} \cdot B.$$

Оскільки за властивостями матриць $A^{-1} \cdot A = E$ (де E – одинична матриця), то $E \cdot X = X = A^{-1} \cdot B$. Отже, згідно матричного методу розв'язок системи (3.5) знаходиться за формулою:

$$X = A^{-1} \cdot B.$$

Приклад 3.3. Розв'язати нижченаведену систему лінійних рівнянь методом оберненої матриці:

$$\begin{cases} 9,0 \cdot x_1 + 15,3 \cdot x_2 + 27,36 \cdot x_3 = 2,7495 \\ 15,3 \cdot x_1 + 27,36 \cdot x_2 + 51,102 \cdot x_3 = 4,6837 \\ 27,36x_1 + 51,102x_2 + 98,936x_3 = 8,3903. \end{cases} \quad (3.9)$$

Розв'язок: матриця коефіцієнтів та матриця вільних членів для системи (3.9) мають вигляд:

$$A = \begin{pmatrix} 9,0 & 15,3 & 27,36 \\ 64,35 & 27,36 & 51,102 \\ 604,2525 & 51,102 & 98,936 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 2,7495 \\ 4,6837 \\ 8,3903 \end{pmatrix}.$$

Обернена матриця системи:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 50,50121 & 61,13070 & 1760925 \\ -61,13070 & 75,03380 & -21,85090 \\ 17,60925 & 21,85090 & 6,426735 \end{pmatrix}.$$

Розв'язок системи (3.9) знаходимо за формулою методу зворотної матриці:

$$X = A^{-1} \cdot B = \begin{pmatrix} 50,50121 & 61,13070 & 1760925 \\ -61,13070 & 75,03380 & -21,85090 \\ 17,60925 & 21,85090 & 6,426735 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2,7495 \\ 4,6837 \\ 8,3903 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,7495 \\ 4,6837 \\ 8,3903 \end{pmatrix}.$$

Отже, значення коренів системи – такі:

$$x_1 = 2,7495, x_2 = 4,6837, x_3 = 8,3903.$$

Зауваження. Застосування описаного вище елементарного методу оберненої матриці на практиці обмежується необхідністю розрахунку оберненої матриці системи A^{-1} .

3.2.2 Метод Крамера

Метод Крамера (або ж спосіб Крамера), як і метод оберненої матриці застосовний до систем лінійних рівнянь, де кількість змінних збігається з кількістю лінійно незалежних рівнянь [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23].

Нехай потрібно розв'язати систему рівнянь (3.5), причому матриця даної системи є невинродженою $\det A \neq 0$.

Метод Крамера базується на такому правилі: система (3.5) з n лінійно незалежних рівнянь з n невідомими має єдиний розв'язок, і цей розв'язок знаходиться за формулами:

$$x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta},$$

де $\Delta = \det A$, Δ_i – визначник матриці коефіцієнтів системи, побудований з матриці системи заміною i -го стовпця стовпцем вільних членів $b_i, i = 1, 2, \dots, n$.

Приклад 3.4. Розв'язати систему лінійних рівнянь (3.9) з прикладу 3.3 методом Крамера.

Розв'язок: побудуємо та розрахуємо визначники Крамера:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 2,7495 & 15,3000 & 27,3600 \\ 4,6837 & 27,3600 & 51,1020 \\ 8,3903 & 51,1020 & 98,9360 \end{vmatrix} = 0,533185,$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 9,00000 & 2,7495 & 27,3600 \\ 15,3000 & 4,6837 & 51,1020 \\ 27,3600 & 8,3903 & 98,9360 \end{vmatrix} = 0,040225,$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} 9,00000 & 2,7495 & 27,3600 \\ 15,3000 & 27,3600 & 51,1020 \\ 27,3600 & 8,3903 & 98,9360 \end{vmatrix} = -0,007900,$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} 9,00000 & 15,3000 & 27,3600 \\ 15,3000 & 27,3600 & 51,1020 \\ 27,3600 & 51,1020 & 98,9360 \end{vmatrix} = 1,890540.$$

Значення коренів системи x_1, x_2, x_3 обчислюємо за формулами Крамера:

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{0,533185}{1,890540} = 2,7495, \quad x_2 = \Delta_2/\Delta = \frac{60,040225}{1,890540} = 4,6837,$$

$$x_3 = \Delta_3/\Delta = \frac{-0,007900}{1,890540} = 8,3903.$$

Отже, значення коренів системи – такі:

$$x_1 = 2,7495, \quad x_2 = 4,6837, \quad x_3 = 8,3903.$$

Зауваження. Застосування описаного вище елементарного методу Крамера на практиці обмежується необхідністю розрахунку $(n + 1)$ визначників порядку n .

3.2.3 Метод Гауса

Реалізація методу Гауса здійснюється в два етапи [1, 11, 17, 18]:

I. «Прямий хід» (виключення) – розширена матриця (3.8), яка відповідає системі рівнянь (3.5), шляхом елементарних перетворень над рядками зводиться до *верхнього трикутного вигляду* (ступінчастого вигляду): під головною діагоналлю матриці трикутного вигляду мають бути розміщені лише елементи, рівні нулю.

II. «Зворотній хід» (підстановка) – з використанням отриманої трикутної матриці послідовно визначаються корені системи рівнянь, починаючи з кореня x_n^* , що відповідає останній змінній, і до кореня x_1^* , що відповідає першій змінній.

Алгоритм методу Гауса включає такі етапи:

I. «Прямий хід».

1. Для цього серед елементів першого стовпця матриці обирають ненульовий (а частіше максимальний) елемент і переміщують його на останнє верхнє положення перестановкою рядків.

2. Нормують усі рівняння, розділивши кожний із доданків на коефіцієнт a_{i1} , де i – номер стовпця:

$$\begin{cases} x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}} \cdot x_2 + \dots + \frac{a_{1n}}{a_{11}} \cdot x_n = \frac{y_1}{a_{11}} \\ x_1 + \frac{a_{22}}{a_{21}} \cdot x_2 + \dots + \frac{a_{2n}}{a_{21}} \cdot x_n = \frac{y_2}{a_{21}} \\ \dots \\ x_1 + \frac{a_{n2}}{a_{n1}} \cdot x_2 + \dots + \frac{a_{nn}}{a_{n1}} \cdot x_n = \frac{y_n}{a_{n1}}. \end{cases} \quad (3.10)$$

4. Віднімають перший рядок нормованої системи (3.9) від решти рядків:

$$\begin{cases} x_1 + \left(\frac{a_{12}}{a_{11}}\right) \cdot x_2 + \dots + \left(\frac{a_{1n}}{a_{11}}\right) \cdot x_n = \left(\frac{y_1}{a_{11}}\right) \\ 0 + \left(\frac{a_{22}}{a_{21}} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\right) \cdot x_2 + \dots + \left(\frac{a_{2n}}{a_{21}} - \frac{a_{1n}}{a_{11}}\right) \cdot x_n = \left(\frac{y_2}{a_{21}} - \frac{y_1}{a_{11}}\right) \\ \dots \\ 0 + \left(\frac{a_{n2}}{a_{n1}} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\right) \cdot x_2 + \dots + \left(\frac{a_{nn}}{a_{n1}} - \frac{a_{1n}}{a_{11}}\right) \cdot x_n = \left(\frac{y_n}{a_{n1}} - \frac{y_1}{a_{11}}\right). \end{cases} \quad (3.11)$$

Очевидно, що у системі (3.11) вирази у дужках при змінних (зокрема, (a_{12}/a_{11}) і т.д.) є комбінаціями чисел, і можуть бути спрощені за правилами арифметики. Нехай система (3.11) після спрощення шляхом арифметичних перетворень набуває вигляду:

$$\begin{cases} x_1 + a'_{12} \cdot x_2 + \dots + a'_{1n} \cdot x_n = y'_1 \\ x_1 + a'_{22} \cdot x_2 + \dots + a'_{2n} \cdot x_n = y'_2 \\ \dots \\ x_1 + a'_{n2} \cdot x_2 + \dots + a'_{nn} \cdot x_n = y'_n, \end{cases} \quad (3.12)$$

де $a'_{12} = a_{12}/a_{11}$, $a'_{22} = (a_{22}/a_{21} - a_{12}/a_{11})$ і т.д.

4. Після того, як зазначені перетворення були здійснені, перший рядок і перший стовпець системи (3.12) «подумки викреслюють».

5. Продовжують пункти 1-4 для всіх рівнянь системи, які залишилися після «викреслення», поки не залишиться рівняння з однією невідомою:

$$\begin{cases} x_1 + a'_{12} \cdot x_2 + a'_{13} \cdot x_3 + \dots + a'_{1n} \cdot x_n = y'_1 \\ 0 + x_2 + a''_{23} \cdot x_3 + \dots + a''_{2n} \cdot x_n = y''_2 \\ \dots \\ 0 + 0 + \dots + x_n = y^{n'}_n. \end{cases} \quad (3.13)$$

3. Коли внаслідок багаторазового виключення змінних (пункти 1-4 цього алгоритму) утворилася трикутна система рівнянь (3.13), переходять до зворотнього ходу алгоритму.

II. «Зворотній хід».

3. Отримують значення x_n^* , що відповідає останній змінній, з останнього рівняння системи (3.13):

$$x_n^* = y_n^{n'}.$$

8. Виконують підстановку отриманого у попередньому пункті значення змінної x_n^* у решту рівнянь системи (3.13):

$$\begin{cases} x_{n-1} = y_{n-1}^{(n-1)'} - a_{(n-1)n}^{(n-1)'} \cdot x_n^* \\ x_{n-2} + a_{(n-2)(n-1)}^{(n-2)'} \cdot x_{n-1} = y_{n-2}^{(n-2)'} - a_{(n-2)n}^{(n-2)'} \cdot x_n^* \\ \dots \\ x_2 + a''_{23} \cdot x_3 + \dots + a''_{2(n-1)} \cdot x_{n-1} = y''_2 - a''_{2n} \cdot x_n^* \\ x_1 + a'_{12} \cdot x_2 + a'_{13} \cdot x_3 + \dots + a'_{1(n-1)} \cdot x_{n-1} = y'_1 - a'_{1n} \cdot x_n^*. \end{cases} \quad (3.14)$$

З системи (3.14) знаходять значення x_{n-1}^* .

9. Повторюють дії, аналогічні п. 8, підставляючи до системи рівнянь (3.13) значення x_n^* , x_{n-1}^* для знаходження x_{n-2}^* і т.д. аж до знаходження значення x_1^* .

Приклад 3.5. В ході експериментальних досліджень було виявлено, що при відомій сталій температурі сумарний тиск суміші пароподібних бензолу (1), дихлоретану (2) і хлорбензолу (3) в однофазній системі дорівнює величинам, поданим у таблиці 3.1 ¹. Скласти систему рівнянь для визначення тиску пари чистих компонентів. Розв'язати систему лінійних рівнянь методом послідовного виключення змінних (методом Гауса).

¹ Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

Таблиця 3.1. Покомпонентний склад суміші газів

Мольні частки компонентів			Тиск P , Па
N_1	N_2	N_3	
0,80	0,10	0,10	1840
0,20	0,70	0,10	1860
0,05	0,05	0,90	236

Розв'язок: парціальні тиски компонентів газової суміші входять до закону Дальтона:

$$P = \sum_{i=1}^3 p_i \cdot N_i,$$

де p_i – значення парціального тиску компонентів газової суміші, Па, N_i – мольні частки компонентів, P – сумарний тиск суміші, Па.

Поклавши $x_1 = p_1$, $x_2 = p_2$, $x_3 = p_3$, запишемо на основі таблиці 3.1 та закону Дальтона:

$$\begin{cases} 0,80 \cdot x_1 + 0,10 \cdot x_2 + 0,10 \cdot x_3 = 1840 \text{ (Па)} \\ 0,20 \cdot x_1 + 0,70 \cdot x_2 + 0,10 \cdot x_3 = 1860 \text{ (Па)} \\ 0,05 \cdot x_1 + 0,05 \cdot x_2 + 0,90 \cdot x_3 = 236 \text{ (Па)}. \end{cases}$$

Для розв'язання наведеної системи лінійних рівнянь методом Гауса проаналізуємо цю систему. Коефіцієнт $a_{11} = 0,80$ є ненульовим і найбільшим у першому стовпці.

Нормуємо усі рівняння системи, розділивши кожний із доданків на коефіцієнт a_{1i} , $i = 1, 2, 3$:

$$\begin{cases} x_1 + \frac{0,10}{0,80} \cdot x_2 + \frac{0,10}{0,80} \cdot x_3 = \frac{1840}{0,80} \\ x_1 + \frac{0,70}{0,20} \cdot x_2 + \frac{0,10}{0,20} \cdot x_3 = \frac{1860}{0,20} \\ x_1 + \frac{0,05}{0,05} \cdot x_2 + \frac{0,90}{0,05} \cdot x_3 = \frac{236}{0,05} \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ x_1 + 3,500 \cdot x_2 + 0,500 \cdot x_3 = 9300,00 \\ x_1 + 1,000 \cdot x_2 + 18,000 \cdot x_3 = 4720,00. \end{cases}$$

Віднімаємо перший рядок нормованої системи від інших рядків та проводимо арифметичні перетворення:

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ 0 + 3,375 \cdot x_2 + 0,375 \cdot x_3 = 7000,00 \\ 0 + 0,875 \cdot x_2 + 17,875 \cdot x_3 = 2420,00. \end{cases}$$

«Умовно викреслюємо» перший рядок і перший стовпчик, обираємо рядок з найбільшим коефіцієнтом при a_{i2} (рівняння 1 не розглядається). Цей елемент знаходиться у другому рядку (в іншому випадку потрібно було помістити цей елемент у другий рядок шляхом перестановки 2 та 3 рядків).

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ 0 + 3,375 \cdot x_2 + 0,375 \cdot x_3 = 7000,00 \\ 0 + 0,875 \cdot x_2 + 17,875 \cdot x_3 = 2420,00. \end{cases}$$

Нормуємо усі рівняння системи, розділивши кожний із доданків на коефіцієнт при x_{2i} , $i = 2, 3$:

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ 0 + 1,000 \cdot x_2 + 0,111 \cdot x_3 = 2074,07 \\ 0 + 1,000 \cdot x_2 + 20,429 \cdot x_3 = 2765,71. \end{cases}$$

Потім почергово віднімаємо другий рядок нормованої системи від решти рядків та проводимо арифметичні перетворення. «Умовно викреслюємо» другий рядок і другий стовпчик:

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ 0 + 1,000 \cdot x_2 + 0,111 \cdot x_3 = 2074,07 \\ 0 + 0 + 20,317 \cdot x_3 = 691,74. \end{cases}$$

Нормуємо рівняння, яке залишилося, розділивши усі його складові на коефіцієнт a_{1i} , $i = 3$:

$$\begin{cases} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 = 2300,00 \\ 0 + 1,000 \cdot x_2 + 0,111 \cdot x_3 = 2074,07 \\ 0 + 0 + 1,000 \cdot x_3 = 34,04. \end{cases}$$

Прямий хід закінчено.

Під час зворотного ходу визначаємо корені системи рівнянь: з останнього кроку прямого ходу визначаємо $x_3 = 34,04$. Підставляємо отримане значення у друге нормоване рівняння:

$$\begin{aligned} 0 + 1,000 \cdot x_2 + 0,111 \cdot x_3 &= 2074,07 \\ 0 + 1,000 \cdot x_2 + 0,111 \cdot 34,04 &= 2074,07 \Rightarrow x_2 = 2070,29. \end{aligned}$$

Підставляємо отримані значення $x_3 = 34,04$, $x_2 = 2070,29$ у перше нормоване рівняння:

$$\begin{aligned} x_1 + 0,125 \cdot x_2 + 0,125 \cdot x_3 &= 2300,00; \\ x_1 + 0,125 \cdot 2070,29 + 0,125 \cdot 34,04 &= 2300,00 \Rightarrow x_1 = 2036,96. \end{aligned}$$

Відповідь: $x_1 = 2036,96$; $x_2 = 2070,29$; $x_3 = 34,04$.

Зауваження. Розрахунки у цьому прикладі здійснювалися в електронних таблицях [6-8, 41-43, 47]. За замовченням точність розрахунків в електронних таблицях становить $\varepsilon = 10^{-15}$, отже, проміжні результати розрахунку зберігаються також із вказаною точністю. Результати на кожному кроці відображалися у вигляді, округленому до трьох десяткових знаків (вільні члени та корені системи рівнянь – до двох десяткових знаків). В разі безпосереднього використання у розрахунках округлених значень, починаючи з другого кроку алгоритму *почне накопичуватися похибка обчислень*. Таке накопичення похибки – це проблема, притаманна прямим методам розв’язання систем лінійних рівнянь.

3.3 ІТЕРАЦІЙНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

Як уже було зазначено вище, ітераційні методи дозволяють отримати розв'язок із заданою точністю шляхом побудови ряду наближень – ітераційної послідовності; до ітераційних методів розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь належать метод простої ітерації (метод Якобі), ітераційний метод Гауса-Зейделя (метод Зейделя) та інші методи [1, 11, 16-19].

3.3.1 Метод простої ітерації

Вихідними даними є система (3.5) та точність визначення коренів системи ϵ .

Алгоритм методу простої ітерації для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь складається з таких етапів [1, 17, 18]:

1. Перевіряють умову збіжності ітераційної послідовності:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, (i, j = 1, 2, 3). \quad (3.15)$$

Подальші розрахунки проводити доцільно у разі, якщо умова збіжності (3.15) виконується (тобто якщо для кожного рядка матриці коефіцієнтів системи (3.5) абсолютні значення діагональних елементів є більшими за суму абсолютних значень решти елементів рядка).

Виконання умови збіжності (3.15) гарантує, що ітераційний процес збігатиметься до єдиного розв'язку системи лінійних рівнянь (3.5) незалежно від того, які саме значення було обрано в якості початкового наближення.

У разі, якщо для досліджуваної системи рівнянь умова збіжності (3.15) *не виконується*, слід спробувати *видозмінити* досліджувану систему рівнянь, переставивши її рядки так, щоб діагональні елементи кожного рядка матриці коефіцієнтів стали більшими за модулем від суми абсолютних значень решти елементів рядка. Якщо перестановкою рядків системи рівнянь не вдалося досягти виконання умови збіжності, від застосування ітераційного методу слід відмовитися.

2. Перевіряють додаткові умови:

$$a_{11} \neq 0, a_{22} \neq 0, a_{33} \neq 0, \dots \quad (3.16)$$

Якщо для досліджуваної системи рівнянь множина умов (3.16) не виконується, слід спробувати видозмінити досліджувану систему рівнянь, переставивши її рядки. Якщо перестановкою рядків системи рівнянь не вдалося досягти виконання умов (3.16), від застосування ітераційного методу слід відмовитися.

3. Подають систему (3.5) у спеціальному представленні (3.17), що має назву *ітераційної функції*.

[illegible]

Зауваження. Ітераційну функцію (3.17) отримують алгебраїчним перетворенням, виразивши відповідну змінну $x_i, i = \overline{1, n}$ через решту доданків у кожному із рядків системи рівнянь (3.5). Тобто кожне з рівнянь системи має бути перетворене відносно невідомого, що розташоване на головній діагоналі.

4. Задаються початковим (нульовим) наближенням $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ коренів рівняння. У якості початкового наближення можна прийняти перетворені вільні члени з системи (3.17): $x_1^{(0)} = \frac{b_1}{a_{11}}, x_2^{(0)} = \frac{b_2}{a_{22}}, x_3^{(0)} = \frac{b_3}{a_{33}}, \dots, x_n^{(0)} = \frac{b_n}{a_{nn}}.$

5. Наступне наближення коренів $x_j^{(i)}$ отримують, підставляючи значення з попереднього наближення $x_j^{(i-1)}$ до ітераційної функції (3.17), $j = \overline{1, n}$, $i = 1, 2, \dots$

6. Перевіряють умову закінчення обчислень для кожної зі змінних:

$$\left| x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)} \right| \leq \varepsilon, \quad j = \overline{1, n},$$

де ε – задане значення точності обчислень.

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то у якості кореня приймають результати, отримані на останній ітерації $x_j^* = x_j^{(k)}$, $j = \overline{1, n}$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п. 5 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Приклад 3.6. Розв'язати методом простої ітерації з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему лінійних рівнянь з прикладу 3.3:

$$\begin{cases} 0,80x_1 + 0,10x_2 + 0,10x_3 = 1840 \\ 0,20x_1 + 0,70x_2 + 0,10x_3 = 1860 \\ 0,05x_1 + 0,05x_2 + 0,90x_3 = 236. \end{cases}$$

Розв'язок: перевіримо умову збіжності (3.15) та додаткові умови (3.16):

$$\begin{array}{l} \wedge \\ |0,80| > |0,10| + |0,10| \\ |0,70| > |0,20| + |0,10| \\ |0,90| > |0,05| + |0,05|, \end{array}$$

$$a_{11} = 0,80 \neq 0, a_{22} = 0,70 \neq 0, a_{33} = 0,90 \neq 0.$$

Умови (3.15) та (3.16) виконуються.

Побудуємо ітераційну функцію (3.17):

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1840}{0,80} + 0x_1 - \frac{0,10}{0,80}x_2 - \frac{0,10}{0,80}x_3 \\ x_2 = \frac{1860}{0,70} - \frac{0,20}{0,70}x_1 + 0x_2 + \frac{0,10}{0,70}x_3 \\ x_3 = \frac{236}{0,90} - \frac{0,05}{0,90}x_1 + \frac{0,05}{0,90}x_2 + 0x_3, \end{cases}$$

або, після перетворень:

$$\begin{cases} x_1 = 2300 + 0x_1 - 0,125x_2 - 0,125x_3 \\ x_2 = 2657,1 - 0,286x_1 + 0x_2 - 0,143x_3 \\ x_3 = 262,2 - 0,056x_1 - 0,056x_2 + 0x_3. \end{cases}$$

Початкове (нульове) наближення:

$$X^{(0)} = \begin{pmatrix} 2300,0 \\ 2657,1 \\ 262,2 \end{pmatrix}.$$

Перше наближення:

$$\begin{aligned} X^{(1)} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ x_3^{(1)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2300,0 \\ 2657,1 \\ 262,2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -0,125 & -0,125 \\ -0,286 & 0 & -0,143 \\ -0,056 & -0,056 & 0 \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} 2300,0 \\ 2657,1 \\ 262,4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1935,1 \\ 1962,5 \\ -13,2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Перевіримо умови закінчення ітераційного процесу:

Для першої змінної: $|2300,0 - 1935,1| < \varepsilon$;

Для другої змінної: $|1062,5 - 2657,1| < \varepsilon$;

Для третьої змінної: $|-13,2 - 262,2| < \varepsilon$.

Обчислення закінчуються у разі виконання усіх трьох із наведених вище умов. В даному випадку не виконана жодна із умов, тому розрахунки продовжуємо: розраховуємо друге наближення, перевіряємо виконання умов закінчення обчислень і т. д. Хід обчислень зручно представити у вигляді таблиці (див. рис. 3.4).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Метод Якобі (прості ітерації) для вирішення СЛАР								
2		Вихідні дані:							
3		Матриця A			B				
4		x_1	x_2	x_3					
5		0,80	0,10	0,10					
6		0,20	0,70	0,10					
7		0,05	0,05	0,90	236,0				
8									
9		Матриця Q			$\bar{\beta}$				
10		x_1	x_2	x_3			$\varepsilon =$	0,01	
11		0,0000	-0,1250	-0,1250					
12		-0,2857	0,0000	-0,1429					
13		-0,0556	-0,0556	0,0000	262,22				
14									
15	k	x_1	x_2	x_3	$\ x_1^{(k)} - x_1^{(k-1)}\ $	$\ x_2^{(k)} - x_2^{(k-1)}\ $	$\ x_3^{(k)} - x_3^{(k-1)}\ $	$\max_i x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $	Закінч. обч
16	0	2300,0000	2657,1429	262,2222					
17	1	1935,0794	1962,5397	-13,1746	364,9206	694,6032	275,3968	694,6032	Продовж
18	2	2056,3294	2106,1451	45,6878	121,2500	143,6054	58,8624	143,6054	Продовж
19	3	2031,0209	2063,0933	30,9736	25,3085	43,0518	14,7142	43,0518	Продовж
20	4	2038,2416	2072,4264	34,7714	7,2207	9,3330	3,7978	9,3330	Продовж
21	5	2036,6003	2069,8208	33,8518	1,6414	2,6056	0,9197	2,6056	Продовж
22	6	2037,0409	2070,4211	34,0877	0,4407	0,6003	0,2359	0,6003	Продовж
23	7	2036,9364	2070,2615	34,0299	0,1045	0,1596	0,0578	0,1596	Продовж
24	8	2036,9636	2070,2996	34,0446	0,0272	0,0381	0,0147	0,0381	Продовж
25	9	2036,9570	2070,2898	34,0409	0,0056	0,0099	0,0036	0,0099	Закінч.

Рис. 3.3. Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом простої ітерації (до прикладу 3.6)

Відповідь: $x_1 = 2036,9570$; $x_2 = 2070,2898$; $x_3 = 34,0409$.

3.3.2 Ітераційний метод Гауса-Зейделя

Ітераційний метод Гауса-Зейделя (або ж метод Зейделя) є модифікацією методу простої ітерації для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Особливістю методу Гауса-Зейделя є більша швидкість збіжності порівняно із методом простої ітерації [1, 18].

Вихідними даними є система (3.5) та значення точності розрахунку ε .

Алгоритм методу Гауса-Зейделя для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь складається з таких етапів:

1. Перевіряють умову збіжності ітераційної послідовності (3.15).

Подальші розрахунки проводити доцільно у разі, якщо умова збіжності (3.15) виконується (тобто якщо для кожного рядка матриці коефіцієнтів системи (3.5) абсолютні значення діагональних елементів є більшими за суму

абсолютних значень решти елементів рядка (у матриці коефіцієнтів системи вільні члени не враховуються).

У разі, якщо для досліджуваної системи рівнянь умова збіжності (3.15) *не виконується*, слід спробувати *видозмінити* досліджувану систему рівнянь, переставивши її рядки так, щоб діагональні елементи кожного рядка матриці коефіцієнтів стали більшими за модулем від суми абсолютних значень решти елементів рядка. Якщо перестановкою рядків системи рівнянь не вдалося досягти виконання умови збіжності, від застосування ітераційного методу слід відмовитися.

2. Перевіряють додаткові умови (3.16).

Якщо для досліджуваної системи рівнянь множина умов (3.16) не виконується, слід спробувати видозмінити досліджувану систему рівнянь, переставивши її рядки. Якщо перестановкою рядків системи рівнянь не вдалося досягти виконання умов (3.16), від застосування ітераційного методу слід відмовитися.

3. Перетворюють систему (3.5) до вигляду ітераційної функції (3.18), виразивши відповідну змінну $x_i, i = \overline{1, n}$ через решту доданків у кожному із рядків системи рівнянь (3.5).

[illegible]

4. Задаються початковим (нульовим) наближенням $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ коренів рівняння. У якості початкового наближення можна прийняти перетворені вільні члени з системи (3.18): $x_1^{(0)} = \frac{b_1}{a_{11}}, x_2^{(0)} = \frac{b_2}{a_{22}}, x_3^{(0)} = \frac{b_3}{a_{33}}, \dots, x_n^{(0)} = \frac{b_n}{a_{nn}}.$

5. Визначають наступне наближення першої змінної $x_1^{(i)}$, підставляючи значення з попереднього наближення $x_j^{(i-1)}$, $j = \overline{1, n}$ до *першого* рядка (1) ітераційної функції (3.18).

6. До *другого* рядка (2) ітераційної функції (3.18) підставляють знайдену у п. 5 змінну $x_1^{(i)}$, решту змінних беруть з попереднього наближення $x_j^{(i-1)}$, $j = \overline{2, n}$. Таким чином розраховують наступне наближення другої змінної $x_2^{(i)}$.

До *третього* рядка (3) ітераційної функції (3.18) підставляють знайдену у п. 5 величину $x_1^{(i)}$, та знайдену у п.6. величину $x_2^{(i)}$, решту змінних беруть з попереднього наближення $x_j^{(i-1)}$, $j = \overline{3, n}$. Таким чином розраховують наступне наближення третьої змінної $x_3^{(i)}$ і т. д.

Нарешті, до рядка (n) ітераційної функції (3.18) підставляють розраховані у п. 5 та п. 6 цього алгоритму значення поточного наближення $x_j^{(i)}$, $j = \overline{1, n-1}$, а останню змінну $x_n^{(i-1)}$, яку беруть з попереднього наближення. Таким чином розраховують наступне наближення n -ї змінної $x_n^{(i)}$,

7. Перевіряють умову закінчення обчислень:

$$\left| x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)} \right| \leq \varepsilon, \quad j = \overline{1, n},$$

де ε – задане значення точності обчислень.

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то у якості кореня приймають результати, отримані на останній ітерації $x_j^* = x_j^{(k)}$, $j = \overline{1, n}$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п. 5 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Приклад 3.7. Розв'язати ітераційним методом Гауса-Зейделя з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему лінійних рівнянь з прикладу 3.3:

$$\begin{cases} 0,80x_1 + 0,10x_2 + 0,10x_3 = 1840 \\ 0,20x_1 + 0,70x_2 + 0,10x_3 = 1860 \\ 0,05x_1 + 0,05x_2 + 0,90x_3 = 236. \end{cases}$$

Розв'язок: перевіримо умову збіжності (3.15) та додаткові умови (3.16).

$$\begin{aligned} |0,80| &> |0,10| + |0,10| \\ |0,70| &> |0,20| + |0,10| \\ |0,90| &> |0,05| + |0,50|, \end{aligned}$$

$$a_{11} = 0,80 \neq 0, a_{22} = 0,70 \neq 0, a_{33} = 0,90 \neq 0.$$

Умови (3.15) та (3.16) виконуються.

Побудуємо ітераційну функцію (3.18):

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1840}{0,8} + 0x_1 - \frac{0,1}{0,8}x_2 - \frac{0,1}{0,8}x_3 \\ x_2 = \frac{1860}{0,7} - \frac{0,2}{0,7}x_1 + 0x_2 + \frac{0,1}{0,7}x_3 \\ x_3 = \frac{236}{0,9} - \frac{0,05}{0,9}x_1 + \frac{0,05}{0,9}x_2 + 0x_3, \end{cases}$$

або, після перетворень:

$$\begin{cases} x_1 = 2300 + 0x_1 - 0,125x_2 - 0,125x_3 \\ x_2 = 2657,1 - 0,286x_1 + 0x_2 - 0,143x_3 \\ x_3 = 262,2 - 0,056x_1 - 0,056x_2 + 0x_3. \end{cases}$$

Початкове (нульове) наближення:

$$X^{(0)} = \begin{pmatrix} 2300,0 \\ 2657,1 \\ 262,2 \end{pmatrix}.$$

Розрахуємо перше наближення (слід пам'ятати, що спосіб підстановки у друге та наступні рівняння відрізняється від підстановки за методом простої ітерації):

$$x_1^{(1)} = 2300,0000 - 0,1250x_2^{(0)} - 0,1250x_3^{(0)} = 1935,0795;$$

$$x_2^{(1)} = 2657,1429 - 0,2857x_1^{(1)} - 0,1429x_3^{(0)} = 2066,8192;$$

$$x_3^{(1)} = 262,2222 - 0,0556x_1^{(1)} - 0,0556x_2^{(1)} = 39,7166.$$

Перевіримо умови закінчення ітераційного процесу:

$$\text{Для першої змінної: } |2300,0 - 1935,0795| < \varepsilon;$$

Для другої змінної: $|1062,5 - 2066,8192| < \varepsilon$;

Для третьої змінної: $|-13,2 - 39,7166| < \varepsilon$.

Проміжні результати представлені на рис. 3.4.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Метод Гаусса-Зейделя (Зейделя) для вирішення СЛАР								
2	Вихідні дані:								
3	Матриця A			B					
4	x ₁	x ₂	x ₃						
5	0,80	0,10	0,10		1840,00				
6	0,20	0,70	0,10		1860,00				
7	0,05	0,05	0,90	236,00					
8									
9	Матриця α			β̄					
10	x ₁	x ₂	x ₃		ε=		0,001		
11	0,0000	-0,1250	-0,1250		2300,0000				
12	-0,2857	0,0000	-0,1429		2657,1429				
13	-0,0556	-0,0556	0,0000	262,2222					
14									
15	k	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁ ^(k) - x ₁ ^(k-1)	x ₂ ^(k) - x ₂ ^(k-1)	x ₃ ^(k) - x ₃ ^(k-1)	max x _i ^(k) - x _i ^(k-1)	Закінч.обч
16	0	2300,0000	2657,1429	262,2222					
17	1	1935,0794	2066,8027	39,8954	364,921	590,340	222,327	590,3401	Продовж
18	2	2036,6627	2069,5399	34,0999	101,583	2,737	5,796	101,5834	Продовж
19	3	2037,0450	2070,2586	34,0387	0,382	0,719	0,061	0,7187	Продовж
20	4	2036,9628	2070,2908	34,0415	0,082	0,032	0,003	0,0822	Продовж
21	5	2036,9585	2070,2917	34,0417	0,004	0,001	0,000	0,0044	Продовж
22	6	2036,9583	2070,2917	34,0417	0,000	0,000	0,000	0,0001	Закінч.
23									

Рис. 3.4. Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом Гауса-Зейделя (до прикладу 3.6)

Обчислення закінчуються у разі виконання усіх трьох із наведених вище умов. В даному випадку не виконана жодна із умов, тому розрахунки продовжуємо: розраховуємо друге наближення:

$$x_1^{(2)} = 2300,0000 - 0,1250x_2^{(1)} - 0,1250x_3^{(1)} = 2036,6831;$$

$$x_2^{(2)} = 2657,1429 - 0,2857x_1^{(2)} - 0,1429x_3^{(1)} = 2069,5871;$$

$$x_3^{(2)} = 262,2222 - 0,0556x_1^{(2)} - 0,0556x_2^{(2)} = 33,9136.$$

Потім перевіряємо виконання умови закінчення обчислень і т. д. Хід обчислень зручно представити у вигляді таблиці (рис. 3.4).

Відповідь: $x_1 = 2036,9583$; $x_2 = 2070,2917$; $x_3 = 34,0417$.

3.4 МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ СПЕЦІАЛЬНОГО ВИГЛЯДУ.

МЕТОД ТОМАСА

Розв'язання деяких практичних задач зводиться до розв'язання систем лінійних рівнянь *великої розмірності*, які можуть містити сотні (тисячі, десятки тисяч) рівнянь [1, 3-5, 10, 11, 16-19, 21-23, 27-29, 39, 45]. Пошук коренів таких систем рівнянь вимагає залучення значних обчислювальних потужностей і значних витрат часу.

Дослідження систем лінійних рівнянь великої розмірності показало, що такі системи як правило мають *розріджені* матриці коефіцієнтів та стовпці вільних членів. *Розріджена матриця* – це матриця, в якій «не всі елементи використовуються», тобто значна частина елементів дорівнюють нулю. Розмір розрідженої матриці досить великий (можливо, перевищує обсяг доступної пам'яті).

Для деяких класів систем лінійних рівнянь з розрідженою матрицею системи розроблено спеціальні методи пошуку коренів [1, 21-23, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45], які вимагають меншого обсягу обчислень за рахунок «ігнорування» нульових коефіцієнтів в ході розрахунку.

Серед систем великої розмірності виділяють системи із основними матрицями *стрічкової структури*, у яких ненульові елементи розташовуються на головній діагоналі та кількох побічних діагоналях. Частковим випадком «стрічкових систем», є системи з тридіагональною матрицею коефіцієнтів. *Тридіагональною* називається квадратна матриця, у якій ненульові елементи стоять тільки на головній діагоналі і сусідніх з нею діагоналях:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Як можна бачити, тридіагональна матриця $n \times n$ містить лише $(3 \cdot n - 2)$ ненульових елементів із n^2 можливих.

Метод Л. Х. Томаса для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (має також назву «алгоритм для тридіагональних матриць», метод Гельфанда-Локуцієвського, метод *прогонки* тощо) є модифікацією методу послідовного виключення змінних (методу Гауса) [21-23, 27-29, 30, 32, 39, 45].

Змінимо позначення ненульових елементів у тридіагональній матриці:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & a_n & b_n \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

Тоді в покомпонентному поданні система рівнянь (3.5) записується як:

$$\begin{cases} a_i \cdot x_{i-1} + b_i \cdot x_i + c_i \cdot x_{i+1} = d_i, \\ i = 1, 2, 3, \dots, n, \\ a_1 = 0, c_n = 0. \end{cases} \quad (3.20)$$

Структура системи (3.20) включає взаємозв'язок тільки між *сусідніми* невідомими. У методі Томаса вираз для такого зв'язку має вигляд:

$$x_i = U_i \cdot x_{i+1} + V_i, \quad i = n, n-1, \dots, 1, \quad (3.21)$$

де U_i, V_i – деякі коефіцієнти.

Підставимо (зі зсувом індексу на одиницю) вираз (3.21) до (3.20):

$$a_i \cdot (U_{i-1} \cdot x_i + V_{i-1}) + b_i \cdot x_i + c_i \cdot x_{i+1} = d_i, \quad (3.22)$$

звідки виразимо:

$$\begin{cases} x_i = -\frac{c_i}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i} \cdot x_{i+1} + \frac{d_i - a_i \cdot V_{i-1}}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i}, \\ i = 1, 2, 3, \dots, n, \\ a_1 = 0, c_n = 0. \end{cases} \quad (3.23)$$

Із порівняння (3.22) та (3.23) отримуємо:

$$\begin{aligned}
 U_i &= -\frac{c_i}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i}, \\
 V_i &= \frac{d_i - a_i \cdot V_{i-1}}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i}, \\
 i &= 1, 2, 3, \dots, n.
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

Алгоритм методу Томаса (прогонки) складається з наступних двох етапів.

1. Записують розв'язувану систему рівнянь у вигляді (3.20).
2. Перевіряють умову коректності і стійкості процедури розрахунку за (3.29). Якщо умова не виконується, відмовляються від застосування методу Томаса.
3. На прямому ході методу послідовно визначають за (3.25), (3.26) коефіцієнти прогонки U_i, V_i :
 - а) початкові коефіцієнти U_1, V_1 (із (3.24) та умови $a_1 = 0$):

$$\begin{aligned}
 U_1 &= -\frac{c_1}{b_1}, \\
 V_1 &= \frac{d_1}{b_1};
 \end{aligned}
 \tag{3.25}$$

- б) решту коефіцієнтів із (3.24):

$$\begin{aligned}
 U_i &= -\frac{c_i}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i}, \\
 V_i &= \frac{d_i - a_i \cdot V_{i-1}}{a_i \cdot U_{i-1} + b_i}, \\
 i &= 2, 3, \dots, n.
 \end{aligned}
 \tag{3.26}$$

4. На зворотному ході методу послідовно визначають корені $x_i, i = n, (n-1), \dots, 1$ за (3.27), (3.28):
 - а) оскільки з (3.20) $c_n = 0$, то $U_n = 0$, тобто

$$x_n = V_n; \tag{3.27}$$

- б) решта коренів із (3.23):

$$\begin{aligned} x_i &= -U_i \cdot x_{i+1} + V_i, \\ i &= (n-1), (n-2), \dots, 1. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Для успішного застосування методу Томаса достатньо, щоб у процесі обчислень не виникало ситуацій із поділом на нуль. Процедuru пошуку коренів методом Томаса називають *коректною*, якщо знаменник коефіцієнти прогонки (3.25), (3.26) в ході процедури не обертається в нуль, і *стійкою*, якщо $|U_i| < 1$, $i = 1, 2, 3, \dots, n$. З урахуванням зазначеного, умову коректності і стійкості процедури розрахунку за методом Томаса можна сформулювати таким чином:

$$|b_i| > |a_i| + |c_i|, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (3.29)$$

Приклад 3.8. Розв'язати методом Томаса (прогонки) систему лінійних рівнянь з тридіагональною матрицею:

$$\begin{cases} 10x_1 + x_2 = 5 \\ -2x_1 + 9x_2 + x_3 = -1 \\ 0,1x_2 + 4x_3 - x_4 = -5 \\ -x_3 + 8x_4 = 40. \end{cases}$$

Розв'язок: умова коректності і стійкості процедури розрахунку (3.29) – виконується.

Розрахунки за методом Томаса наведено на рис. 3.5.

За формулами за (3.25), (3.26) визначаємо коефіцієнти прогонки U_i, V_i , $i = 1, 2, 3, 4$:

$$U_1 = -c_1/b_1 = -1/10 = -0,1, \quad V_1 = d_1/b_1 = 5/10 = 0,5,$$

$$U_2 = -\frac{c_2}{a_2 \cdot U_1 + b_2} = -\frac{1}{2 \cdot 0,1 + 9} = -0,1087 \text{ і т.д.}$$

G13 : $\times$ $\checkmark$ f_x =MMULT(B13:E16;H6:H9)									
	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Метод Томаса (прогонки) для вирішення СЛАР з тридіагональною матрицею								
2	$\begin{cases} 10x_1 + x_2 & & & & = 5 \\ -2x_1 + 9x_2 + x_3 & & & & = -1 \\ & 0,1x_2 + 4x_3 - x_4 & = -5 \\ & & -x_3 + 8x_4 & = 40 \end{cases}$								
3									
4		Вихідні дані				Прямий хід		Зворотний хід	
5	i	a _i	b _i	c _i	d _i	U _i	V _i	x _i	
6	1	0,0	10,0	1,0	5,0	-0,1000	-0,5000	-0,478	
7	2	-2,0	9,0	1,0	-1,0	-0,1087	-0,2174	-0,218	
8	3	0,1	4,0	-1,0	-5,0	0,2507	-1,2480	0,006	
9	4	-1,0	8,0	0,0	40,0	0,0000	5,0007	5,0007	
10									
11	Перевірка:								
12	A=	1	2	3	4		B=		
13	1	10,0	1,0	0	0		-5,00		
14	2	-2,0	9,0	1	0		-1,00		
15	3	0,0	0,1	4	-1		-5,01		
16	4	0,0	0,0	-1	8		40,00		

Рис. 3.5. Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом Томаса (до прикладу 3.8)

Після цього на зворотному ході методу послідовно за (3.27), (3.28) визначаємо шукані корені $x_i, i = n, (n - 1), \dots, 1$:

$$x_4 = V_4 \approx 5, \quad x_3 = U_3 \cdot x_4 + V_3 \approx 0,$$

$$x_2 = U_2 \cdot x_3 + V_2 \approx -0,2, \quad x_1 = U_1 \cdot x_2 + V_1 \approx -0,5.$$

Перевірку знайдених значень здійснюємо підстановкою у вихідну систему рівнянь (рис. 3.5).

$$\text{Відповідь: } x_1 \approx -0,5, \quad x_2 \approx -0,2, \quad x_3 \approx 0, \quad x_4 \approx 5.$$

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 3

1. Навести і пояснити алгоритм методу послідовного виключення змінних (методу Гауса) для розв'язання систем лінійних рівнянь.

2. Навести структуру і пояснити принцип використання схеми єдиного ділення для розв'язання систем лінійних рівнянь методом Гауса.

3. Навести і пояснити алгоритм методу простої ітерації для розв'язання систем лінійних рівнянь.

4. Навести і пояснити алгоритм ітераційного методу Гауса-Зейделя для розв'язання систем лінійних рівнянь.

5. Яка умова закінчення обчислень за методами простої ітерації, Гауса-Зейделя?

6. У чому відмінність між ітераційними методами простої ітерації та Гауса-Зейделя?

7. Що таке збіжність ітераційної послідовності? Як перевіряється збіжність ітераційної послідовності в ітераційних методах розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь?

8. Як обирається початкове значення під час розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь ітераційними методами?

9. Розв'язати систему рівнянь (3.2) з прикладу 3.1:

а) методом послідовного виключення змінних (Гауса) шляхом перестановки рядків;

б) методом Гауса за схемою єдиного ділення;

в) методом простої ітерації;

г) ітераційним методом Гауса-Зейделя;

Вказівка. У разі неможливості розрахунку за якимось з методів пояснити причину такої неможливості.

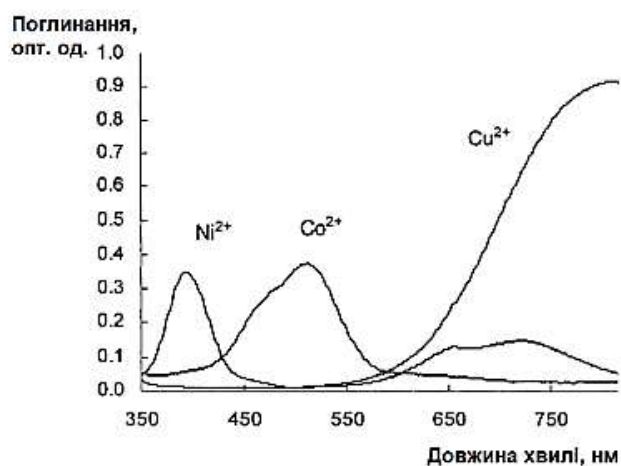
10. Розв'язати систему рівнянь (3.4) з прикладу 3.2:

а) методом оберненої матриці;

б) методом Крамера;

Порівняти результати знаходження коренів різними методами.

11. Внаслідок експериментальних досліджень¹ було отримано УФ-видимі спектри водних розчинів $CoCl_2$, $NiCl_2$, і $CuCl_2$ показані на рисунку:



Було обрано три довжини хвилі, на яких поглинання іонів Co^{2+} , Ni^{2+} та Cu^{2+} значно відрізнялося. Молярні коефіцієнти світлопоглинання для цих іонів на трьох довжинах хвиль наведено у таблиці:

Довжина хвилі, нм	Молярний коефіцієнт світлопоглинання, $\text{дм}^3 / (\text{моль} \cdot \text{см})$		
	Co^{2+}	Ni^{2+}	Cu^{2+}
394	0,995	6,868	0,188
510	6,450	0,215	0,198
808	0,469	1,179	15,052

УФ-спектроскопічний аналіз розчину, що містить іони іонів Co^{2+} , Ni^{2+} та Cu^{2+} , дав такі показники ступеня поглинання (оптичної щільності) на трьох довжинах хвилі: $A_{394} = 0,845$; $A_{510} = 0,388$, $A_{808} = 1,696$, при вимірюванні з використанням комірки з довжиною шляху 1,00 см. Ставиться задача обчислити концентрацію трьох іонів металу в суміші, використовуючи закон Бугера - Ламберта - Бера:

$$A = E \cdot l \cdot c,$$

де A – оптична щільність поглинання, E – молярний коефіцієнт світлопоглинання, $\text{дм}^3 / (\text{моль} \cdot \text{см})$, l – довжина комірки (довжина світлопоглинаючого шару), см, c – концентрація, $\text{моль}/\text{дм}^3$.

Позначивши $x = c_{Co^{2+}}$, $y = c_{Ni^{2+}}$ та $z = c_{Cu^{2+}}$, можна скласти систему

¹ Uchikoshi M. Determination of the Distribution of Cobalt-Chloro Complexes in Hydrochloric Acid Solutions at 298 K. Journal of Solution Chemistry (2018) 47:2021–2038. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10953-018-0831-z>

рівнянь:

$$\begin{cases} 0,995 \cdot x + 6,868 \cdot y + 0,188 \cdot z = 0,845 \\ 6,450 \cdot x + 0,215 \cdot y + 0,198 \cdot z = 0,388 \\ 0,469 \cdot x + 1,179 \cdot y + 15,052 \cdot z = 1,696. \end{cases}$$

Розв'язати наведену систему рівнянь:

а) методом послідовного виключення змінних (Гауса);

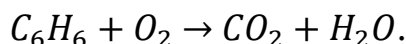
б) методом простої ітерації;

в) ітераційним методом Гауса-Зейделя;

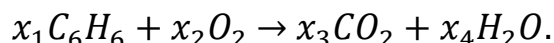
Порівняти результати знаходження коренів різними методами.

Вказівка. У разі невиконання умови збіжності ітераційних методів виконати належні перетворення вихідної системи.

12. Необхідно урівняти хімічну реакцію:



Ця хімічна реакція включає три елементи: Карбон (С); Гідроген (Н); Оксиген (О). Завдання полягає в тому, щоб визначити невідомі коефіцієнти:



Для кожного з названих елементів можна записати рівняння балансу:

Карбон: $2 \cdot x_1 = x_3 \Rightarrow 2 \cdot x_1 - x_3 = 0.$

Гідроген: $6 \cdot x_1 = 2 \cdot x_4 \Rightarrow 6 \cdot x_1 - 2 \cdot x_4 = 0.$

Оксиген: $2 \cdot x_2 = 2 \cdot x_3 + x_4 \Rightarrow 2 \cdot x_2 - 2 \cdot x_3 - x_4 = 0.$

Поклавши $x_4 = 6$, розв'язати отриману систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

а) методом оберненої матриці;

б) методом Гауса за схемою єдиного ділення;

в) методом простої ітерації;

г) ітераційним методом Гауса-Зейделя;

Вказівка. У разі невиконання умови збіжності ітераційних методів виконати належні перетворення вихідної системи.

Порівняти результати знаходження коренів різними методами.

4 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ

4.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 4

Як вже зазначалося раніше, великий клас задач хімії і хімічної технології може бути математично сформульований і розв'язаний у вигляді системи рівнянь. Системами нелінійних рівнянь користуються, коли йдеться про взаємодію кількох явищ, які мають нелінійну природу (і тому можуть бути описані нелінійними рівняннями) [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23].

До практичних задач, які зводяться до розв'язання системи рівнянь, належить розрахунок матеріальних та теплових балансів, розрахунки з реакційної рівноваги, фазової рівноваги тощо [1, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

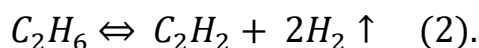
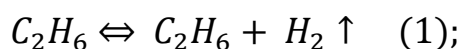
Системою нелінійних рівнянь, що містить n рівнянь та n невідомих, називається система вигляду:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

де $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$, ..., $f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – деякі нелінійні функції (алгебраїчні або трансцендентні).

В якості прикладів розглянемо деякі практичні задачі з хімії та хімічної технології, розв'язання яких зводиться до розв'язання систем нелінійних рівнянь.

Приклад 4.1. Етилен і ацетилен отримують дегідруванням етану при температурі 977 °С і тиску $1,013 \cdot 10^5$ Па в реакторі, де відбуваються такі каталітичні реакції:



Константа рівноваги реакції (1) дорівнює $K_1 = 3,75$, константа рівноваги

реакції (2) дорівнює $K_2 = 0,135$. Якщо час перебування реакційної суміші в реакторі досить тривалий, то досягається рівновага.

Ставиться задача визначити склад потоку, що містить продукти реакції.

Розв'язок: позначимо як x_1 та x_2 – ступінь відповідно першої та другої реакцій (1) та (2). Тоді можна записати вирази для констант рівноваги K_1 , K_2 двох реакцій:

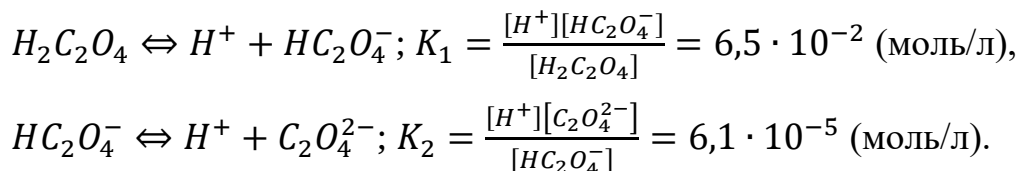
$$\begin{cases} K_1 = \frac{x_1 \cdot (x_1 + 2 \cdot x_2)}{(100 - x_1 - x_2) \cdot (100 + x_1 + 2 \cdot x_2)} = 3,750 \\ K_2 = \frac{x_2 \cdot (x_1 + 2 \cdot x_2)^2}{(100 - x_1 - x_2) \cdot (100 + x_1 + 2 \cdot x_2)^2} = 0,135. \end{cases} \quad (4.2)$$

Розв'язання системи з двох нелінійних алгебраїчних рівнянь (4.2) дасть корінь системи нелінійних рівнянь – двійку чисел x_1^* та x_2^* . Після цього можна розрахувати мольні частки $N_{C_2H_6}$, $N_{C_2H_4}$, $N_{C_2H_2}$, N_{H_2} компонентів у післяреакційній суміші:

$$N_{C_2H_6} = \frac{100 - x_1^* - x_2^*}{100 + x_1^* + 2 \cdot x_2^*}; \quad N_{C_2H_4} = \frac{x_1^*}{100 + x_1^* + 2 \cdot x_2^*};$$

$$N_{C_2H_2} = \frac{x_2^*}{100 + x_1^* + 2 \cdot x_2^*}; \quad N_{H_2} = \frac{x_1^* + 2 \cdot x_2^*}{100 + x_1^* + 2 \cdot x_2^*}.$$

Приклад 4.2. Досліджується рівновага у водному розчині оксалатної кислоти з концентрацією $c = 0,100$ моль/л¹:



Якщо позначити рівноважні концентрації $[HC_2O_4^-] = x$ (моль/л), $[C_2O_4^{2-}] = y$ (моль/л), і (виходячи зі схем дисоціації) $[H^+] = x + 2 \cdot y$ (моль/л), $[H_2C_2O_4] = c - x - y$ (моль/л), то система рівнянь для розрахунку рівноважних концентрацій набуде вигляду:

¹ Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

$$\begin{cases} K_1 = \frac{(x + 2y) \cdot x}{c - x - y} \text{ (моль/л)} \\ K_2 = \frac{(x + 2y) \cdot y}{x} \text{ (моль/л)}, \end{cases}$$

або, після підставлення чисельних значень та здійснення алгебраїчних перетворень:

$$\begin{cases} x^2 + 2xy + 6,5 \cdot 10^{-2}x + 6,5 \cdot 10^{-2}y - 6,5 \cdot 10^{-3} = 0 \\ xy + 2y^2 - 6,1 \cdot 10^{-5}x = 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

Розв'язання системи зі двох алгебраїчних рівнянь (4.3) дасть корінь системи рівнянь – двійку чисел $X^* = \{x_1^*, x_2^*\}$.

Слід зауважити, що розв'язання систем нелінійних рівнянь (на відміну від розв'язання нелінійних рівнянь з однією невідомою і систем лінійних рівнянь) пов'язана зі *значними труднощами* алгоритмічної природи як на етапі знаходження початкових наближень коренів, так і безпосередньо на етапі розрахунків [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23, 28].

Зокрема, значну роль в ефективності застосування ітераційних методів розв'язання систем нелінійних рівнянь відіграє правильний *вибір початкового наближення*. На жаль, нині не запропоновано універсальних та надійних методів визначення початкових наближень для розв'язання систем нелінійних рівнянь (4.1), що містить n рівнянь та n невідомих ($n > 2$).

Для систем з двох нелінійних рівнянь ($n = 2$) у деяких випадках початкове наближення можна знайти графічним методом, тобто побудувати в одній площині криві залежностей $f_1(x_1, x_2)$ і $f_2(x_1, x_2)$ і визначити точку (або точки) перетину цих кривих (див. приклад 4.3). З прикладу 4.3 також видно, що у випадку систем нелінійних рівнянь графічний метод не є універсальним навіть для $n = 2$. Також, під час розв'язання систем нелінійних рівнянь у якості початкових наближень часто використовують значення, взяті з певних попередніх досліджень (наприклад, з *технологічних міркувань*).

Приклад 4.3. Визначити графічним методом нульове (початкове)

наближення для системи нелінійних рівнянь:

$$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - 3 \cdot x_2^2 + 4 = 0 \\ x_1 + x_2 - 4 = 0. \end{cases}$$

Розв'язок: в даному випадку в усіх рівняннях системи є можливість виконати такі алгебраїчні перетворення: винести другу змінну ($y = x_2$) у ліву частину, виразивши цю змінну через решту доданків, які не містять x_2 . Після вказаних перетворень отримуємо:

$$\begin{cases} y = x_2 = \sqrt{(2 \cdot x_1 + 4)/3} \\ y = x_2 = 4 - x_1. \end{cases}$$

Побудуємо в одній площині наведені вище залежності (рис. 4.1).

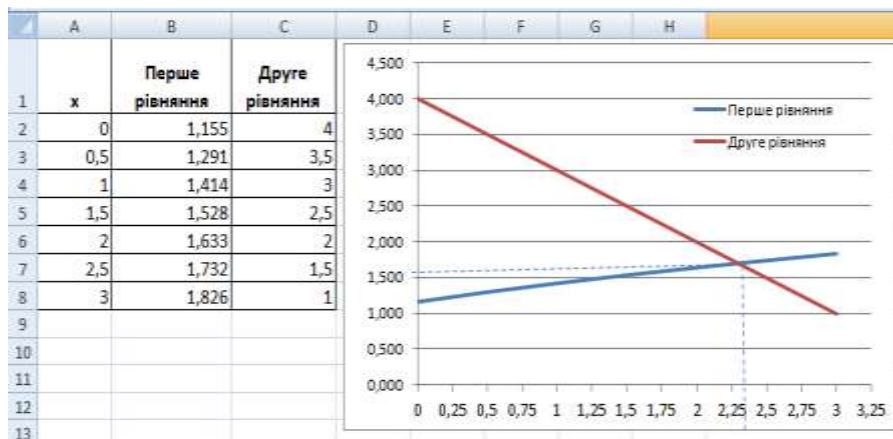


Рис. 4.1. Графічне визначення початкового наближення для системи з двох нелінійних рівнянь (приклад 4.3)

Як видно з рис. 4.1, у якості початкових наближень для розв'язання досліджуваної можна взяти значення $x_1 = 2,3$ та $x_2 = 1,6$.

4.2 ІТЕРАЦІЙНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ

Для систем нелінійних рівнянь не запропоновано прямих методів розв'язання, лише у окремих найпростіших випадках систему (4.1) вдається розв'язати безпосередньо (наприклад, шляхом підстановки та зведення до випадку нелінійного рівняння з однією змінною). Загальноприйнятими у

практиці розв'язання систем нелінійних рівнянь (4.1) є ітераційні методи послідовних наближень [1, 3-5, 11, 17-19, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]: метод ітерацій (простої ітерації), метод Ньютона (Ньютона-Рафсона), ітераційний метод Зейделя тощо.

4.2.1 Метод простої ітерації

Вихідними даними є система нелінійних рівнянь (4.1), значення точності розрахунку ε та значення початкових наближень $x_i^{(0)}, i = \overline{1, n}$.

Для реалізації методу слід перетворити (найчастіше – шляхом алгебраїчних перетворень) систему нелінійних рівнянь (4.1) до рівносильного вигляду *ітераційної функції* (4.4):

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n), \end{cases} \quad (4.4)$$

де $\varphi_i (i = \overline{1, n})$ – часткові ітераційні функції, визначені і неперервні в околі шуканого розв'язку.

Приклад 4.4. Побудувати ітераційну функцію системи нелінійних рівнянь:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = 2 \cdot x_1^2 - x_1 \cdot x_2 - 5 \cdot x_1 + 1 = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = x_1 + 5 \cdot \lg x_1 - x_2^2 = 0. \end{cases}$$

Розв'язок: виконаємо алгебраїчні перетворення, внаслідок яких отримаємо ітераційну функцію (4.4):

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2) = \sqrt{[x_1 \cdot (x_2 + 5) - 1]/2} \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2) = \sqrt{x_1 + 5 \cdot \lg x_1}. \end{cases}$$

Зауваження 1. Існує також метод *аналітичної побудови ітераційних функцій*, за аналогією з рівнянням (2.8) для випадку однієї невідомої.

Відповідно до цього методу, ітераційна функція (4.4) має бути подана у компактному матричному вигляді [28]:

$$X = \Phi(X) = X + F(X), \quad (4.5)$$

де $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець невідомих,

$F(X) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець функцій-рядків системи (4.1),

$\Phi(X) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець ітераційних функцій, які слід

побудувати (тобто вектор-стовпець, що складається з рядків системи (4.4)).

Матрицю $\Phi(X)$ отримують матрично-операторними перетвореннями, наприклад:

$$\Phi(X) = -W^{-1}(X^{(0)}), \quad \det W(X^{(0)}) \neq 0, \quad (4.6)$$

де $X^{(0)}$ – вектор-стовпець початкових наближень невідомих,

$W(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$ – матриця Якобі, $W^{-1}(X)$ – обернена матриця

Якобі, $\det W(X^{(0)})$ – детермінант матриці Якобі в точці $X^{(0)}$; якщо $\det W(X^{(0)}) = 0$ – рекомендовано взяти інші початкові наближення $X^{(0)}$.

Зауваження 2. Очевидно, що у разі побудови ітераційної функції (4.4) за виразами (4.5) – (4.6) метод ітерацій збігається з методом Ньютона.

Достатньою умовою збіжності ітераційної послідовності у методі простих ітерацій є:

$$\max_{x \in G} \left(\max_i \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right| \right) \leq q < 1, \quad i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}, \quad (4.7)$$

де G – область, у якій функції $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ визначені та неперервно диференційовані, q – деяке допоміжне числове значення.

Зокрема, для системи з двох нелінійних рівнянь умова збіжності (4.6) набуває вигляду:

$$\max_{\substack{x_1 \in [a_1, b_1], \\ x_2 \in [a_2, b_2]}} \left(\max \left[\left(\left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} \right| \right), \left(\left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} \right| \right) \right] \right) \leq q < 1. \quad (4.8)$$

Алгоритм методу простої ітерації для розв'язання систем нелінійних рівнянь складається з таких етапів [28]:

1. Перевіряють збіжність ітераційної послідовності за умовою (4.7) або (4.8). Якщо умова збіжності не виконується, слід змінити ітераційну функцію.
2. Покладають $k = 0$. Задаються початковим наближенням $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ коренів системи рівнянь.
3. Покладають $k = k + 1$.
4. Розраховують k -те наближення $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ коренів системи рівнянь за (4.4):

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \varphi_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \varphi_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = \varphi_n(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \end{cases} \quad (4.9)$$

5. Перевіряють умову закінчення обчислень:

$$\left| x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)} \right| \leq \varepsilon, \quad j = \overline{1, n},$$

де ε – задане значення точності обчислень.

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то у якості кореня

приймають результати, отримані на останній ітерації $x_j^* = x_j^{(k)}$, $j = \overline{1, n}$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п. 3 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Приклад 4.5. Розв'язати методом простої ітерації з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему нелінійних рівнянь:

$$\begin{cases} 2 \cdot x_1^2 - x_1 \cdot x_2 - 5 \cdot x_1 + 1 = 0 \\ x_1 + 3 \cdot \lg x_1 - x_2^2 = 0. \end{cases}$$

Прийняти до уваги, що за результатами попередніх досліджень відомо: $x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$.

Розв'язок: виконавши алгебраїчні перетворення, побудуємо ітераційну функцію:

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{x_1 \cdot (x_2 + 5) - 1}{2}} \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2) = \sqrt{x_1 + 3 \cdot \lg x_1}. \end{cases}$$

Початкове наближення $x_1^{(0)}$, $x_2^{(0)}$ знайдемо графічним методом:

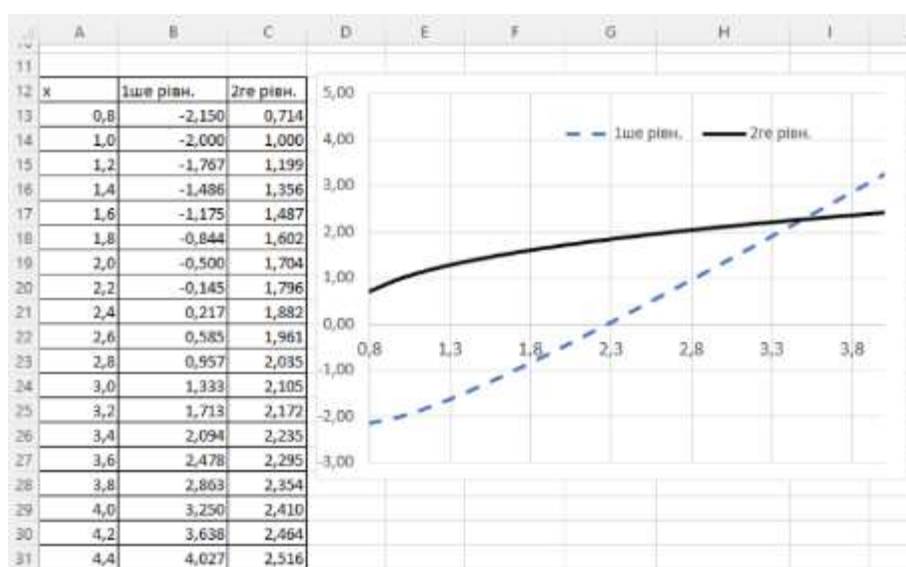


Рис. 4.2. Графічне визначення початкового наближення для системи з двох нелінійних рівнянь (приклад 4.5)

Початкове наближення з рис. 4.2: $x_1^{(0)} = 3,5$, $x_2^{(0)} = 2,2$.

Знайдемо похідні:

$$\frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \frac{x_2 + 5}{4 \cdot \sqrt{\frac{x_1 \cdot (x_2 + 5) - 1}{2}}}, \quad \frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} = \frac{x_1}{4 \cdot \sqrt{\frac{x_1 \cdot (x_2 + 5) - 1}{2}}},$$

$$\frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \frac{1 + \frac{3 \cdot \lg x_1}{x_1}}{2 \cdot \sqrt{x_1 + 3 \cdot \lg x_1}} = \frac{1 + \frac{3 \cdot 0,4343}{3,5}}{2 \cdot \sqrt{3,5 + 3 \cdot \lg 3,5}}, \quad \frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 0.$$

Перевіримо виконання умов збіжності у малому δ -околі точки $\{x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\}$:

$$G = \{|x_1 - 3,5| \leq \delta; |x_2 - 2,2| \leq \delta\}, \delta = 0,1.$$

Умови збіжності набувають вигляду:

$$\left| \frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right| \leq \frac{2,3 + 5}{4 \cdot \sqrt{\frac{3,4 \cdot (2,1 + 5) - 1}{2}}} = 0,536 < 0,54,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right| \leq \frac{3,6}{4 \cdot \sqrt{\frac{3,4 \cdot (2,1 + 5) - 1}{2}}} = 0,265 < 0,27,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right| \leq \frac{1 + \frac{3 \cdot 0,4343}{3,4}}{2 \cdot \sqrt{3,4 + 3 \cdot \lg 3,4}} = 0,309 < 0,31,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right| = 0,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right| < 0,54 + 0,31 = 0,85 < 1,$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_2(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right| < 0,27 + 0 = 0,27 < 1.$$

Оскільки умова збіжності (4.8) виконується, побудованою ітераційною функцією можемо користуватися для подальших розрахунків.

Перше наближення за (4.9):

$$x_1^{(1)} = \sqrt{\frac{x_1^{(0)} \cdot (x_2^{(0)} + 5) - 1}{2}} = \sqrt{\frac{3,5 \cdot (2,2 + 5) - 1}{2}} = 3,4785,$$

$$x_2^{(0)} = \sqrt{x_1^{(0)} + 3 \cdot \lg x_1^{(0)}} = \sqrt{3,5 + 3 \cdot \lg 3,5} = 2,2654.$$

Перевіримо умови закінчення ітераційного процесу:

$$|3,4785 - 3,5| < \varepsilon,$$

$$|2,2654 - 2,2| < \varepsilon.$$

Обчислення закінчуються у разі виконання обох із наведених вище умов. В даному випадку не виконана жодна із умов, тому розрахунки продовжуємо: розраховуємо друге наближення, перевіряємо виконання умови закінчення обчислень і т. д. Хід обчислень зручно представити у вигляді таблиці (див. рис. 4.2).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Метод простої ітерації для систем нелінійних рівнянь							$\varepsilon =$	0,001
2	k	x_1	x_2	φ_1	φ_2	$ x_1^{(k)} - x_1^{(k-1)} $	$ x_2^{(k)} - x_2^{(k-1)} $	$\max x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $	Критерій закінч.
3	0	3,5000	2,2000	3,4785	2,2654				
4	1	3,4785	2,2654	3,4837	2,2589	0,0215	0,0654	0,0654	продовж.
5	2	3,4837	2,2589	3,4848	2,2605	0,0052	0,0065	0,0065	продовж.
6	3	3,4848	2,2605	3,4858	2,2608	0,0011	0,0016	0,0016	продовж.
7	4	3,4858	2,2608	3,4864	2,2611	0,0010	0,0003	0,0010	закінч.

Рис. 4.3. Розв'язання системи нелінійних рівнянь методом простої ітерації (розрахунки до прикладу 4.5)

Відповідь: $x_1 = 3,486$, $x_2 = 2,261$.

4.2.2 Метод Ньютона-Рафсона

Вихідними даними для розрахунку методом Ньютона-Рафсона є система нелінійних рівнянь (4.1), значення точності розрахунку ε та значення початкових наближень $x_i^{(0)}$, $i = \overline{1, n}$.

Для реалізації методу слід перетворити систему нелінійних рівнянь (4.1) до рівносильного вигляду *ітераційної функції* (4.4) – шляхом алгебраїчних перетворень або за формулами (4.5) – (4.6).

Основна обчислювальна формула методу Ньютона для системи з n нелінійних рівнянь:

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - W^{-1}(X^{(k)}) \cdot F(X^{(k)}) = X^{(k)} + \Delta X^{(k)}, \quad (4.10)$$

де $k = 0, 1, 2, \dots$; $X^{(k)}, X^{(k+1)}$ – вектори-стовпці $(k+1)$ відповідно на ітераціях k та $(k+1)$, $\Delta X^{(k)}$ – приріст змінних на ітерації k , $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}$,

$F(X) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$ – вектор-стовпець функцій-рядків системи (4.1),

$W(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$ – матриця Якобі, $W^{-1}(X)$ – обернена матриця

Якобі.

У частковому випадку системи нелінійних рівнянь з двома невідомими приріст змінних $\Delta X^{(k)}$ у формулі (4.10) може бути розрахований на основі формул Крамера для розв'язання систем лінійних рівнянь:

$$\Delta x_1^{(k)} = \frac{\det \begin{pmatrix} f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) & \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \\ f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) & \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \end{pmatrix}},$$

$$\Delta x_2^{(k)} = \frac{\det \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \end{pmatrix}}.$$

Тобто основна обчислювальна формула методу Ньютона (4.10) у частковому випадку системи нелінійних рівнянь з двома невідомими може бути представлена як (4.11):

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= x_1^{(k)} + \Delta x_1^{(k)}, \\ x_2^{(k+1)} &= x_2^{(k)} + \Delta x_2^{(k)}, \\ \Delta x_1^{(k)} &= \frac{f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} - \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \cdot f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} - \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1}}, \\ \Delta x_2^{(k)} &= \frac{\frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \cdot f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) - f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1}}{\frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} - \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1}}, \\ k &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4.11)$$

Алгоритм методу Ньютона-Рафсона для розв'язання систем з n нелінійних рівнянь складається з таких етапів [1, 11]:

1. Покладають $k = 0$. Задаються початковим наближенням $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ коренів системи рівнянь.
2. Покладають $k = k + 1$.
3. Складають систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно невідомих $\Delta X^{(k)}$:

$$F(X^{(k)}) \cdot \Delta X^{(k)} = -F(X^{(k)}),$$

Розв'язавши цю систему одним із чисельним методів, знаходять $\Delta X^{(k)}$.

4. Базуючись на (4.10) та значеннях $\Delta X^{(k)}$, знайдених у п. 3, розраховують k -те наближення $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ коренів системи рівнянь.
5. Перевіряють умову закінчення обчислень:

$$|x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}| \leq \varepsilon, \quad j = \overline{1, n},$$

де ε – задане значення точності обчислень.

Якщо умова закінчення обчислень виконується, то у якості кореня приймають результати, отримані на останній ітерації $x_j^* = x_j^{(k)}, j = \overline{1, n}$. Обчислення закінчено. Інакше (якщо умова закінчення обчислень не виконується), то переходять до п. 2 цього алгоритму і розраховують наступну ітерацію.

Зауваження. У випадку системи з двох нелінійних рівнянь з двома невідомими у п. 2-3 наведеного вище алгоритму можна скористатися частковими формулами (4.11).

Приклад 4.6. Розв'язати методом простої ітерації з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему нелінійних рівнянь з прикладу 4.5:

$$\begin{cases} 2 \cdot x_1^2 - x_1 \cdot x_2 - 5 \cdot x_1 + 1 = 0 \\ x_1 + 3 \cdot \lg x_1 - x_2^2 = 0. \end{cases}$$

Початкове наближення $x_1^{(0)} = 3,5, x_2^{(0)} = 2,2$.

Розв'язок: Складаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно невідомих $\Delta X^{(k)}$:

$$W(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(X)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(X)}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \cdot x_1 - x_2 - 5 & -x_1 \\ 1 + \frac{3 \cdot 0,4343}{x_1} & \end{pmatrix}.$$

Для нульового наближення $X^{(0)}$:

$$W(X^0) = \begin{pmatrix} 4 \cdot 3,5 - 2,2 - 5 & -3,5 \\ 1 + \frac{3 \cdot 0,4343}{3,5} & -2 \cdot 2,2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6,80000 & -3,5 \\ 1,37225 & -4,4 \end{pmatrix}.$$

Складаємо систему лінійних рівнянь:

$$\begin{pmatrix} 6,80000 & -3,5 \\ 1,37225 & -4,4 \end{pmatrix} \cdot \Delta X^{(0)} = -F(X^{(k)}) =$$

$$= \begin{pmatrix} 2 \cdot 3,5^2 - 3,5 \cdot 2,2 - 5 \cdot 3,5 + 1 \\ 3,5 + 3 \cdot \lg 3,5 - 2,2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,3000 \\ -0,2922 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} 6,80000 \cdot x_1^{(0)} - 3,50000 \cdot x_2^{(0)} = -0,3000 \\ 1,37225 \cdot x_1^{(0)} - 4,40000 \cdot x_2^{(0)} = -0,2922. \end{cases}$$

Розв'язавши цю систему лінійних алгебраїчних рівнянь методом оберненої матриці, знаходимо $x_1^{(0)} = -0,0118$, $x_2^{(0)} = 0,0627$.

Аналогічний результат $x_1^{(0)} = -0,0118$, $x_2^{(0)} = 0,0627$ можна отримати за формулами (4.11).

Перше наближення за (4.10) – $X^{(1)} = X^{(0)} + \Delta X^{(0)}$:

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + x_1^{(0)} = 3,5 - 0,0118 = 3,4882,$$

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + x_1^{(0)} = 2,2 + 0,0627 = 2,2627.$$

Перевіримо умови закінчення ітераційного процесу:

$$|3,4882 - 3,5| < \varepsilon,$$

$$|2,2627 - 2,2| < \varepsilon.$$

Обчислення закінчуються у разі *виконання обох* із наведених вище умов. В даному випадку не виконана жодна із умов, тому розрахунки продовжуємо: розраховуємо друге наближення, перевіряємо виконання умови закінчення обчислень і т. д. Хід обчислень зручно представити у вигляді таблиці (див. рис. 4.4).

:	×	✓	f_x	=(C9*C8-C6*C10)/(C5*C8-C6*C7)		
	A	B	C	D	E	F
1	Метод Ньютона-Рафсона для системи 2х нелін. рівнянь					$\epsilon =$ 0,001
2	k	0	1	2	3	
3	x_1	3,5000	3,48816	3,48744	3,48744	
4	x_2	2,2000	2,26272	2,26163	2,26163	
5	$\partial f_1 / \partial x_1$	1,37225	1,37351	1,37359	1,37359	
6	$\partial f_1 / \partial x_2$	-4,40000	-4,52544	-4,52326	-4,52326	
7	$\partial f_2 / \partial x_1$	6,80000	6,68994	6,68814	6,68814	
8	$\partial f_2 / \partial x_2$	-3,50000	-3,48816	-3,48744	-3,48744	
9	$f_1(x_1, x_2)$	0,29220	-0,00394	-1,22E-06	-9,33E-13	
10	$f_2(x_1, x_2)$	0,30000	0,00102	2,54E-07	1,78E-14	
11	Δx_1	0,01184	0,00072	2,12E-07	1,31E-13	
12	Δx_2	-0,06272	0,00109	3,34E-07	2,46E-13	
13	$ x_1^{(k)} - x_1^{(k-1)} $	-	0,01184	7,21E-04	2,12E-07	
14	$ x_2^{(k)} - x_2^{(k-1)} $	-	0,06272	1,09E-03	3,34E-07	
15	$\max x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $	-	0,06272	1,09E-03	3,34E-07	
16	Критерій закінч.		продовж.	продовж.	закінч.	

Рис. 4.4. Розв'язання системи нелінійних рівнянь методом Ньютона-Рафсона (до прикладу 4.6)

Відповідь: $x_1 = 3,487$, $x_2 = 2,262$.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 4

1. Сформулювати математичну постановку завдання розв'язання систем нелінійних рівнянь.
2. Навести і пояснити алгоритм методу простої ітерації для розв'язання систем нелінійних рівнянь.
3. Навести і пояснити алгоритм методу Ньютона-Рафсона для розв'язання систем нелінійних рівнянь.
4. Яка умова закінчення обчислень за методами простої ітерації, Ньютона?
5. У чому відмінність між ітераційними методами простої ітерації та Ньютона?
6. Що таке збіжність ітераційної послідовності? Як перевіряється

збіжність ітераційної послідовності в ітераційних методах розв'язання систем нелінійних рівнянь?

7. Як обирається початкове значення під час розв'язання систем нелінійних рівнянь методами послідовного наближення?

8. Приймаючи у якості початкових значень $x_1^{(0)} = 80$, $x_2^{(0)} = 10$, розв'язати з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему рівнянь (4.2) з прикладу 4.1:

а) методом ітерацій;

б) методом Ньютона;

в) порівняти результати знаходження коренів різними чисельними методами.

9. Приймаючи у якості початкових значень $x_1^{(0)} = 2,5 \cdot 10^{-2}$, $x_2^{(0)} = 2,5 \cdot 10^{-4}$, розв'язати з точністю $\varepsilon = 0,001$ систему рівнянь (4.3) з прикладу 4.2:

а) методом ітерацій;

б) методом Ньютона;

в) порівняти результати знаходження коренів різними чисельними методами.

10. Досліджується процес:

$$(1) \quad 2A + B \rightleftharpoons C, \quad K_1 = \frac{C_C}{C_A^2 \cdot C_B} = 5 \cdot 10^{-4},$$

$$(2) \quad A + D \rightleftharpoons C, \quad K_2 = \frac{C_C}{C_A \cdot C_D} = 4 \cdot 10^{-2}.$$

Початкові концентрації (кмоль/м³): $C_{A,0} = 40$, $C_{B,0} = 15$, $C_{C,0} = 0$, $C_{D,0} = 10$.

Якщо досліджуваний процес протікає в стаціонарному режимі, то концентрації компонентів можуть бути визначені із залежностей:

$$C_A = C_{A,0} - 2 \cdot x_1 \cdot C_{D,0} - x_2 \cdot C_{D,0},$$

$$C_B = C_{B,0} \cdot (1 - x_1),$$

$$C_C = C_{C,0} + x_1 \cdot C_{B,0} + x_2 \cdot C_{D,0},$$

$$C_D = C_{D,0} \cdot (1 - x_2),$$

або

$$C_A = 40 - 30 \cdot x_1 - 10 \cdot x_2,$$

$$C_B = 15 - 15 \cdot x_1,$$

$$C_C = 15 \cdot x_1 + 10 \cdot x_2,$$

$$C_D = 10 - 10 \cdot x_2,$$

де x_1, x_2 — ступінь перетворення відповідно для реакцій (1) та (2).

Знайти значення ступенів перетворення x_1, x_2 із системи рівнянь (попередньо підставити до системи вирази $C_A = 40 - 30 \cdot x_1 - 10 \cdot x_2$ та ін. для концентрацій компонентів):

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = \frac{C_C}{C_A^2 \cdot C_B} - 5 \cdot 10^{-4} = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = \frac{C_C}{C_A \cdot C_D} - 4 \cdot 10^{-2} = 0. \end{cases}$$

Розв'язати систему нелінійних рівнянь з точністю $\varepsilon = 0,001$:

а) методом ітерацій;

б) методом Ньютона;

в) порівняти результати знаходження коренів різними чисельними методами.

У якості початкового наближення взяти $x_1^{(0)} = 0,5, x_2^{(0)} = 0,5$.

5 НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ

5.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 5

Наближення функцій – це розділ теорії функцій, який присвячений вивченню питань наближеного подання функцій [1, 3-5, 11, 17-19, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]. Ця задача виникає при розв'язанні великої кількості практичних і теоретичних задач.

Наближення функцій – знаходження для даної функції $f(x)$ іншої функції $g(x)$ з деякого певного класу функцій (наприклад, алгебраїчних багаточленів тощо), яка буде близькою до функції $f(x)$ в тому або іншому сенсі.

Функція $f(x)$ може бути отримана в результаті експериментальних досліджень і представлена у вигляді таблиці.

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

В такому вигляді дискретній множині значень аргументу x_i відповідає дискретна множина значень функції y_i ($y_i = f(x_i)$). В цьому випадку функціональна залежність $y = f(x)$ невідома. Такі функції називають *функціями, заданими таблично (табличними функціями)*. Задання функції таблицею є досить поширеним і практично важливим випадком.

На практиці при використанні табличної функції можуть знадобитись значення величини функції $f(x)$ в проміжних точках, що не є вузловими x_i . Отримати такі значення можна, наприклад, шляхом проведення додаткових (дороговартісних і тривалих) експериментів [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23]. Тому для розв'язання задач з отримання функції в проміжних точках і знадобиться задача наближення функцій, де табличну функцію заміняють аналітичною, яка буде зручною у використанні.

У деяких випадках залежність $y = f(x)$ відома, але вона настільки громіздка і складна (наприклад, містить складні для обчислення вирази, інтеграли тощо), що використовувати її в практичних розрахунках важко і

недоцільно. Таку функцію також можна замінити більш простою при збереженні точності обчислень.

Варіанти задачі про наближення функцій різняться залежно від того, які функції використовують для наближення, як шукають функцію $g(x)$ і як розуміється близькість функцій $f(x)$ і $g(x)$. В залежності від підходу до визначення наближеної функції розрізняють: *інтерполяцію функцій* та *апроксимацію функцій* [1, 3-5, 11, 17-19, 21-23, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

5.2 ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ

Інтерполювання функцій є окремим випадком задання наближення, функцій, коли потрібно, щоби у заданих точках x_i ($i = 0, 1, 2, 3, \dots, n$) (вузлах інтерполювання) значення функції $f(x)$ і функції $g(x)$ були рівними. Таким чином, загальна постановка задачі інтерполювання така.

Нехай деяка функція $y = f(x)$ на деякому відрізку $[a, b]$ задана своїми значеннями $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ (таблично задана функція).

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

При розв'язанні задачі інтерполювання потрібно знайти таку неперервну функцію $F(x)$, яка би в заданих точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ приймала ті ж самі значення, що і задана функція $f(x)$ ($y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$): $F(x_0) = y_0, F(x_1) = y_1, \dots, F(x_n) = y_n$. Така функція називається *інтерполюючою*. Точки x_i ($i = 0, 1, 2, 3, \dots, n$) називаються *вузлами інтерполяції*, а y_i – *вузловими значеннями*.

Геометрично це означає, що потрібно знайти криву $y = F(x)$, що проходить через задану систему точок з координатами (x_i, y_i) (рис. 5.1).

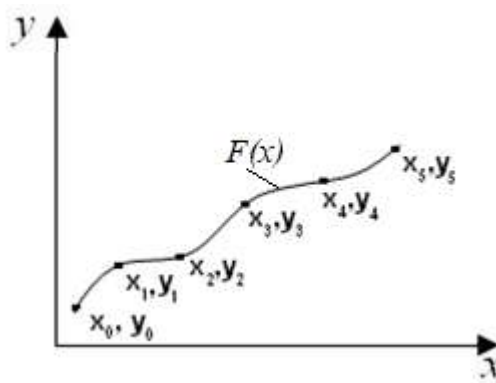


Рис. 5.1. Графічна інтерпретація інтерполяції

У такій загальній постановці задача інтерполювання може мати незліченне число розв'язків (бо через задані точки можна провести безліч кривих) або зовсім не мати розв'язку. Однак ця задача буде однозначною, якщо замість довільної функції $F(x)$ будемо шукати поліном $P_n(x)$. Ступінь цього полінома $P_n(x)$ не вище n і він задовольняє таким умовам: $P_n(x_0) = y_0$, $P_n(x_1) = y_1, \dots, P_n(x_n) = y_n$.

Отриманий *інтерполяційний поліном* $y = P_n(x)$ (інтерполяційна формула) зазвичай використовується для наближеного обчислення значень даної функції $f(x)$ при значеннях аргументу x , що відмінні від вузлів інтерполювання. Така операція називається *інтерполюванням функції* $f(x)$.

При цьому розрізняють *інтерполювання у вузькому розумінні*, коли значення аргументу x знаходиться між вузловими точками x_0 і x_n та *екстраполювання*, коли значення x знаходиться за межами відрізка інтерполяції $[x_0, x_n]$. Як для інтерполювання, так і екстраполювання функції використовують отриману інтерполяційну формулу.

Якщо заданий $n+1$ вузол інтерполяції, то за цими вузлами можна побудувати один інтерполяційний поліном n -го ступеня. У цьому випадку інтерполяцію називають *глобальною*, оскільки один поліном виду:

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n.$$

використовується для інтерполяції функції $f(x)$ на всьому інтервалі зміни аргументу x . Інтерполяційні поліноми можна будуватися і для різних частин інтервалу зміни x . У цьому випадку будемо мати *кусову* (або *локальну*) *інтерполяцію*.

Можливі різні форми запису інтерполяційного поліному (багаточлену) $P_n(x)$, які мають ті або інші обчислювальні особливості.

5.2.1 Інтерполяційна формула Лагранжа

Інтерполяційна формула Лагранжа є найбільш загальною формулою інтерполювання [1, 11, 18]. Вона застосовується при довільно заданих вузлах інтерполяції (як *рівновіддалених*, що мають постійний крок зміни аргументу x , так і *нерівновіддалених*). Якщо на відрізку $[a, b]$ задані $n + 1$ різних значень аргументу: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ і в цих вузлових точках відомі значення функції $f(x)$: $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$, то інтерполяційна формула Лагранжа у розгорнутому вигляді матиме вигляд:

$$\begin{aligned}
 P_n(x) = & y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3) \dots (x_0 - x_n)} + \\
 & + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \dots (x_1 - x_n)} + \dots \\
 & + y_i \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} + \\
 & \dots + y_n \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1)(x_n - x_2) \dots (x_n - x_{n-1})}.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

де x – значення аргументу, при якому необхідно знайти значення функції ($y = P_n(x)$).

Як видно з наведеної формули, в кожній точці x_i один із доданків приймає значення y_i , а всі інші доданки дорівнюють нулю. Тобто умова отримання інтерполяційної формули задовольняється. Поліном, що інтерполює функцію $f(x)$, має ступінь $n - 1$. При цьому слід зауважити, що при додаванні нового вузла доведеться перераховувати всі складові у формулі Лагранжа.

Інтерполяційну формулу Лагранжа можна записати більш компактно [1]:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} y_i.$$

Для обчислень за поліномом Лагранжа потрібно підставити значення вузлових точок x до формули.

Якщо $n = 1$ (таблична функція має 2 вузли інтерполяції)

x_0	x_1
y_0	y_1

то формула Лагранжа матиме вигляд:

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1. \quad (5.2)$$

Це і буде формула Лагранжа для лінійної інтерполяції. Геометричний сенс лінійної інтерполяції показаний на рис. 5.2.

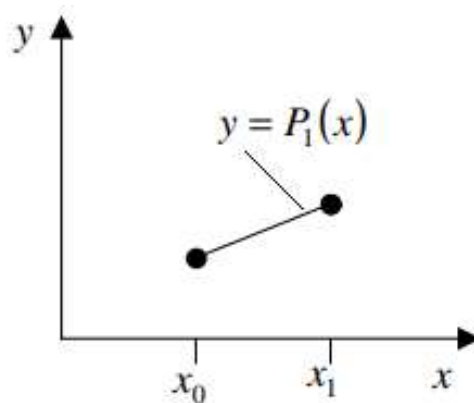


Рис. 5.2. Геометричний зміст лінійної інтерполяції

Геометрично це означає, що через дві точки з координатами (x_0, y_0) та (x_1, y_1) на площині проводиться пряма, яка і визначає значення функції в будь-якій проміжній точці.

Якщо $n = 2$ (таблична функція має 3 вузли інтерполяції)

x_0	x_1	x_2
y_0	y_1	y_2

то формула Лагранжа матиме вигляд:

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}y_2. \quad (5.3)$$

Це і буде формула Лагранжа для квадратичної інтерполяції, геометричний сенс якої показаний на рис. 5.3.

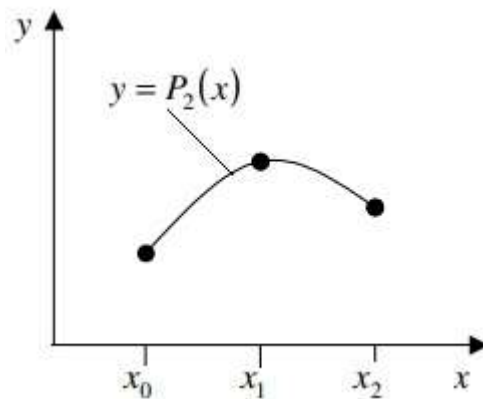


Рис. 5.3. Геометричний зміст квадратичної інтерполяції

З геометричної точки зору інтерполяційна функція є параболою, що проведена за трьома послідовними точками на площині (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , координати яких визначені таблицею, і за якою визначають значення функції в будь-якій проміжній точці.

Приклад 5.1. Кінематична в'язкість води від температури описується такою таблицею:

Температура, °C	0	5	10	20
В'язкість $\cdot 10^6$, м ² /с	1,787	1,519	1,307	1,004

Визначити кінематичну в'язкість води (м²/с) при температурі 7,5 °C.

Розв'язок: таблична функція має 4 вузли інтерполяції ($n = 3$). Позначимо температуру за x , а в'язкість - y і запишемо формулу Лагранжа для заданої функції.

$$P_3(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} y_1 +$$

$$+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} y_2 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} y_3.$$

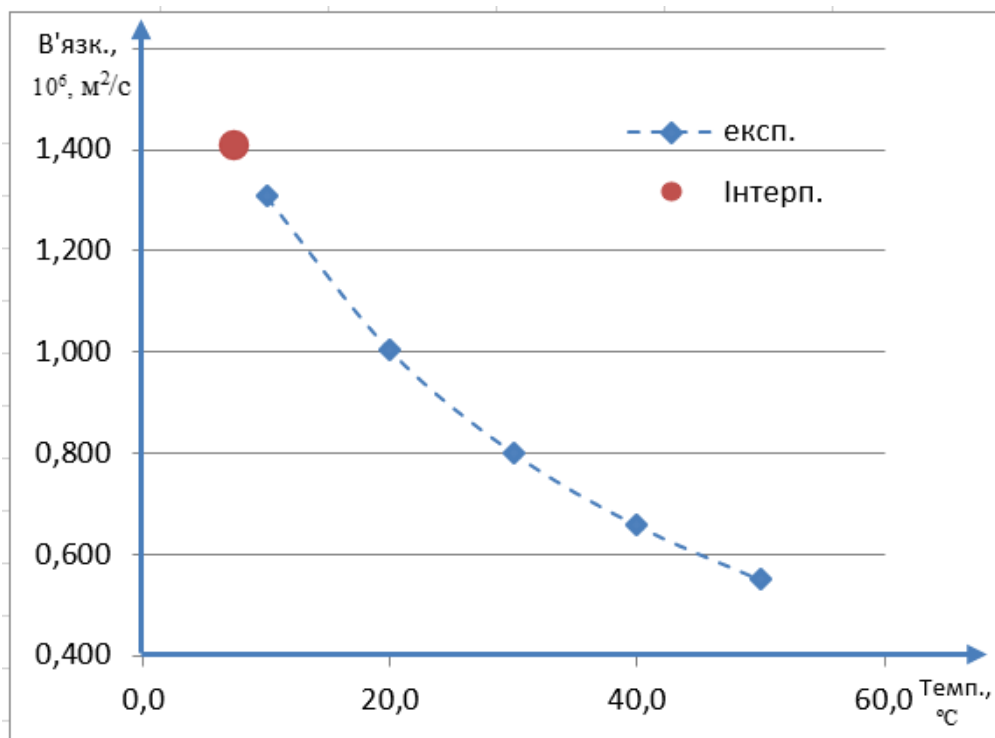
Підставимо $x = 7,5$ та значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$P_3(7,5) = \frac{(7,5 - 5)(7,5 - 10)(7,5 - 20)}{(0 - 5)(0 - 10)(0 - 20)} 1,787 +$$

$$+ \frac{(7,5 - 0)(7,5 - 10)(7,5 - 20)}{(5 - 0)(5 - 10)(5 - 20)} 1,519 +$$

$$+ \frac{(7,5 - 0)(7,5 - 5)(7,5 - 20)}{(10 - 0)(10 - 5)(10 - 20)} 1,307 +$$

$$+ \frac{(7,5 - 0)(7,5 - 5)(7,5 - 10)}{(20 - 0)(20 - 5)(20 - 10)} 1,004 = 1,4067.$$



Таким чином, кінематична в'язкість води при температурі 7,5 °C буде становити $1,4067 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).

Приклад 5.2. Задана таблична функція виду:

x	1	3	6
y	0,2	0,7	0,5

Визначити значення y при $x=2$.

Розв'язок: позначмо вузли інтерполяції $x_0 = 1$, $x_1 = 3$, $x_2 = 6$. Таблична функція має 3 вузли інтерполяції ($n = 2$). Скористаємося для розрахунку формулою Лагранжа для квадратичної інтерполяції (5.3):

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2.$$

Підставимо значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$P_2(2) = \frac{(2 - 3)(2 - 6)}{(1 - 3)(1 - 6)} \cdot 0,2 + \frac{(2 - 1)(2 - 6)}{(3 - 1)(3 - 6)} \cdot 0,7 + \frac{(2 - 1)(2 - 3)}{(6 - 1)(6 - 3)} \cdot 0,5 = \\ = 0,5133.$$

Отже, значення y при $x=2$ дорівнює $y = P_2(2) = 0,5133$.

Приклад 5.3. Знайти інтерполяційний багаточлен Лагранжа для табличної функції виду:

x	1	3	6
y	0,2	0,7	0,5

Розв'язок: таблична функція має 3 вузли інтерполяції ($n = 2$). Скористаємося для отримання розрахункового багаточлена формулою Лагранжа для квадратичної інтерполяції (5.3):

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \\ + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2.$$

Підставимо тільки значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$\begin{aligned}
P_2(2) &= \frac{(x-3)(x-6)}{(1-3)(1-6)} \cdot 0,2 + \frac{(x-1)(x-6)}{(3-1)(3-6)} \cdot 0,7 + \frac{(x-1)(x-3)}{(6-1)(6-3)} \cdot 0,5 = \\
&= (x^2 - 9x + 18) \frac{0,2}{10} + (x^2 - 7x + 6) \frac{0,7}{-6} + (x^2 - 4x + 3) \frac{0,5}{15} = \\
&= \left(\frac{0,2}{10} - \frac{0,7}{6} + \frac{0,5}{15} \right) x^2 + \left(-\frac{0,2}{10} 9 - \frac{0,7}{-6} 7 - \frac{0,5}{15} 4 \right) x + \\
&+ \left(\frac{0,2}{10} 18 - \frac{0,7}{6} 6 + \frac{0,5}{15} 3 \right) = -0,0633x^2 + 0,5033x - 0,24.
\end{aligned}$$

Отже, отримаємо: $y = P_2(x) = -0,0633x^2 + 0,5033x - 0,24$.

Отриманий багаточлен можна використовувати для швидких розрахунків при інтерполюванні даної табличної функції.

Визначимо значення y при $x=2$ (як у попередньому прикладі).

$$y = P_2(x) = -0,0633 \cdot 2^2 + 0,5033 \cdot 2 - 0,24 = 0,5133.$$

Як можна побачити, результати розрахунку значення функції збігаються.

Зауваження. Варто зазначити, що формула інтерполяційного багаточлена Лагранжа піддається впливу так званого *феномена Рунге*, який пов'язаний зі збільшенням коливань полінома на краях інтервалу при використанні поліномів високих ступенів (особливо при рівновіддалених вузлах інтерполяції). І тому наявність великої кількості точок далеко не завжди призводить до покращення точності інтерполяції. Підсумовуючи, можна сказати, що використання великої кількості вузлів інтерполяції призводить до збільшення ступеня інтерполяційного багаточлена і ускладнює обчислення, а також може збільшувати похибку обчислень. Для уникнення великих похибок весь відрізок розбивають на часткові відрізки (рис. 5.4) і будують інтерполяційні поліноми невисокого ступеня для різних частин інтервалу зміни x (наприклад, використовують лінійну або квадратичну інтерполяцію, що розглянуті вище) [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

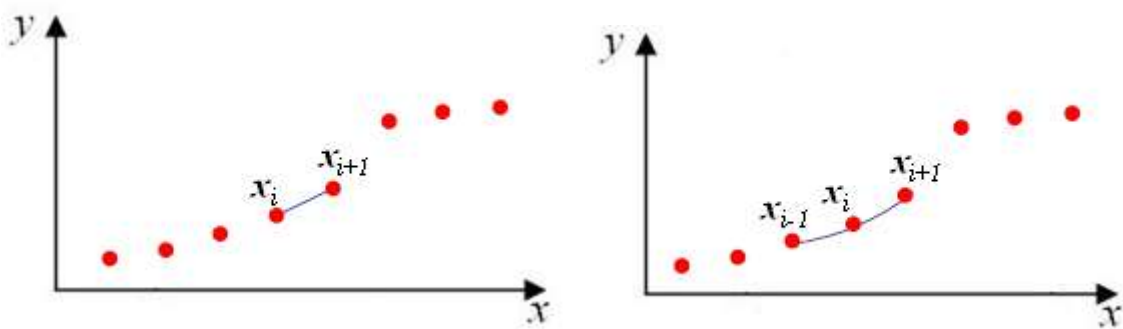


Рис. 5.4. Кускова (локальна) інтерполяція

У практичних розрахунках, щоб уникнути незручностей, при значній кількості вузлових точок використовують такий підхід. Біля заданого значення аргументу x , для якого необхідно обчислити значення функції $f(x)$, обирається декілька найближчих вузлів, і для цих вузлів будується інтерполяційний багаточлен невисокого ступеня. За ним і проводять розрахунок.

Примітка. Інтерполяційний багаточлен Лагранжа дуже зручний для програмування [6-8, 14, 15, 40-43, 47]. Рекомендації з програмної реалізації методу Лагранжа наведені у розділі 15.

5.2.1.1 Оцінка похибки за методом Лагранжа

Похибка обчислень за методом Лагранжа, що виникає при заміні функції $y = f(x)$ інтерполяційним поліномом $P_n(x)$ може бути оцінена величиною залишкового члену $R_n(x)$, що визначається за формулою [1, 11, 18]:

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x). \quad (5.4)$$

Якщо відомий аналітичний вираз функції $f(x)$ і можна знайти її похідні до $(n + 1)$ – порядку включно, то тоді можливо оцінити $R_n(x)$ у відповідності з теоремою.

Теорема. Якщо вузли інтерполювання x_i ($i = 0, 1, \dots, n$) різні та належать відрізка $[a, b]$, а функція $f(x)$ диференційована $n+1$ раз на відрізка $[a, b]$, то для будь-якої точки x з відрізка $x \in [a, b]$ існує така точка ξ всередині відрізка $\xi \in (a, b)$, що для визначення похибки інтерполювання справедлива рівність:

$$Rn(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n). \quad (5.5)$$

Позначивши:

$$M_{n+1} = \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} |f^{(n+1)}(x(\xi))|,$$

отримаємо формулу оцінку абсолютної похибки інтерполяційної формули Лагранжа:

$$|Rn(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)|. \quad (5.6)$$

5.2.1.2 Обернена інтерполяція за методом Лагранжа

Завдання оберненої інтерполяції для функції $y = f(x)$, що задана таблично, полягає в тому, щоб за заданим значенням функції y визначити відповідне їй значення аргументу x [1, 11, 18].

Інтерполяційний поліном Лагранжа у разі монотонної функції можна використовувати для розв'язання задачі оберненої інтерполяції. Тут достатньо прийняти y за незалежну змінну (аргумент), а x вважати функцією. Тоді отримаємо:

$$x = \sum_{i=0}^n \frac{(y - y_0)(y - y_1) \dots (y - y_{i-1})(y - y_{i+1}) \dots (y - y_n)}{(y_i - y_0)(y_i - y_1) \dots (y_i - y_{i-1})(y_i - y_{i+1}) \dots (y_i - y_n)} x_i. \quad (5.7)$$

Приклад 5.4. Для заданої таблично функції:

x	2	5	9
y	10	20	30

визначити, при якому значенні x функція $y=15$.

Розв'язок: позначмо вузли інтерполяції $y_0 = 10$, $y_1 = 20$, $y_2 = 30$. Таблична функція має 3 вузли інтерполяції ($n = 2$). Скористаємося для розрахунку формулою Лагранжа для квадратичної інтерполяції, яку можна

отримати з формули (5.7), при $n = 2$:

$$P_2(y) = \frac{(y - y_1)(y - y_2)}{(y_0 - y_1)(y_0 - y_2)}x_0 + \frac{(y - y_0)(y - y_2)}{(y_1 - y_0)(y_1 - y_2)}x_1 + \frac{(y - y_0)(y - y_1)}{(y_2 - y_0)(y_2 - y_1)}x_2.$$

Підставимо значення $y=15$ та з таблиці в формулу і отримаємо:

$$P^2(15) = \frac{(15 - 20)(15 - 30)}{(10 - 20)(10 - 30)}2 + \frac{(15 - 10)(15 - 30)}{(20 - 10)(20 - 30)}5 + \frac{(15 - 10)(15 - 20)}{(30 - 10)(30 - 20)}9 \approx 3,375.$$

Отже, значення x при $y = 15$ дорівнює $x = P_2(15) = 3,375$.

5.2.2 Інтерполяційні формули Ньютона

Для інтерполяції функцій з рівновіддаленими вузлами найчастіше використовуються інтерполяційні багаточлени Ньютона [1, 11, 18, 19]. В їх запису використовуються *скінченні різниці* функцій. Розглянемо їх.

5.2.2.1 Скінченні різниці

Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично.

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

Скінченною різницею першого порядку називають різницю між значеннями функції в двох сусідніх вузлах інтерполяції [1, 11, 17, 18]:

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

Скінченними різницями другого порядку називають різниці між скінченними різницями першого порядку в двох сусідніх вузлах інтерполяції:

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

Аналогічно отримують скінченні різниці більш високих порядків. Це різниці між скінченними різницями попереднього порядку в двох сусідніх вузлах інтерполяції. Наприклад, скінченні різниці n -го порядку:

$$\begin{aligned}\Delta^n y_0 &= \Delta^{n-1} y_1 - \Delta^{n-1} y_0, \\ \Delta^n y_1 &= \Delta^{n-1} y_2 - \Delta^{n-1} y_1, \\ \Delta^n y_2 &= \Delta^{n-1} y_3 - \Delta^{n-1} y_2, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots\end{aligned}$$

Скінченні різниці вищих порядків можуть бути вираженими безпосередньо через функції. Наприклад, скінченна різниця другого порядку:

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i.$$

При цьому, скінченні різниці будь-яких порядків можна обчислювати послідовно за рекурентними формулами.

Наприклад:

Скінченні різниці першого порядку

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0; \Delta y_1 = y_2 - y_1, \dots$$

Скінченні різниці другого порядку

$$\Delta^2 y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0, \Delta^2 y_1 = y_3 - 2y_2 + y_1, \dots$$

тощо.

Скінченні різниці різних порядків зручно розташовувати у таблиці горизонтальної форми (або діагональної форми). При використанні для

інтерполяційних формул Ньютона більш зручним є горизонтальне розташування скінченних різниць (таблиця 5.1).

Таблиця 5.1. Горизонтальна форма розташування скінченних різниць

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	
x_2	y_2	Δy_2		
x_3	y_3			

Зв'язок між скінченними різницями та похідними функції (докладніше питання розглянуте в розділі чисельного диференціювання).

Відомо, що похідна $f'(x)$ від функції $y = f(x)$ є межею нескінченно малого прирощення функції до нескінченно малого прирощення аргументу за умови, що це прирощення аргументу прагне нуля:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta f(x)}{h}.$$

Якщо при обчисленні скінченної різниці $\Delta f(x)$ величина кроку h буде малою, то буде справедлива наближена рівність:

$$f'(x) \approx \frac{\Delta f(x)}{h}.$$

Таким чином, при наближених обчисленнях значення похідної можна замінити відношенням скінченних різниць.

При визначенні другої похідної від функції записуємо:

$$f''(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta^2 f(x)}{h^2} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}.$$

При застосуванні правила Лопітала, можна записати:

$$f''(x) \approx \frac{\Delta^2 f(x)}{h^2}.$$

Аналогічно:
$$f^{(n)}(x) \approx \frac{\Delta^n f(x)}{h^n}.$$

Ці формули зручно використовувати, коли похідну обчислювати складно або задані лише табличні значення функції $f(x)$.

Приклад 5.5. Залежність тиску P від температури задана таблицею:

t, °C	15	20	25	30	35
P, кПа	12,81	17,56	23,78	31,84	42,19

Побудувати горизонтальну таблицю скінченних різниць для подальших розрахунків.

Розв'язок:

t	p	Δp	$\Delta^2 p$	$\Delta^3 p$	$\Delta^4 p$
15	12,81	4,75	1,47	0,37	0,08
20	17,56	6,22	1,84	0,45	
25	23,78	8,06	2,29		
30	31,84	10,35			
35	42,19				

5.2.2.2 Перша інтерполяційна формула Ньютона

Нехай функція $y = f(x)$ задана вузловими значеннями $y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) і при цьому вузли інтерполяції є рівновіддаленими: $x_{i-1} - x_i = h = \text{const}$.

Обчислення значень функції для проміжних значень аргументів, що знаходяться на початку таблиці, зручно виконувати із використанням першої інтерполяційної формули Ньютона. У цьому випадку інтерполяційний багаточлен має вигляд [1, 11, 18]:

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2! h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3! h^3}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n}(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}). \quad (5.8)$$

На практиці першу інтерполяційну формулу Ньютона (5.8) представляють у дещо іншому вигляді. Для цього вводиться нова змінна q :

$$q = \frac{x - x_0}{h}.$$

Ця змінна визначає число кроків, що необхідне для досягнення числа x з точки x_0 .

Тоді можна записати:

$$\begin{aligned}\frac{x-x_1}{h} &= \frac{x-(x_0+h)}{h} = q - 1; \quad \frac{x-x_2}{h} = q - 2; \\ \frac{x-x_3}{h} &= q - 3; \dots; \quad \frac{x-x_n}{h} = q - n + 1.\end{aligned}$$

З урахуванням прийнятих позначень перша інтерполяційна формула Ньютона набуде вигляду:

$$\begin{aligned}P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \\ \dots + \frac{q(q-1)(q-2)\dots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0.\end{aligned}\tag{5.9}$$

Як видно із запису інтерполяційної формули Ньютона, її кожен член не залежить від усіх вузлів інтерполяції, що притаманне багаточлену Лагранжа. Також зрозуміло, що при додаванні нового вузла в таблицю не потрібно перераховувати всі складові формули Ньютона, на відміну від формули Лагранжа. Бо будь-який k -й член формули Ньютона залежить від свого вузла, а додавання нового вузла призведе лише додавання нового члена у формулу.

Цю формулу доцільно використовувати для інтерполювання ($x > x_0$) або екстраполювання ($x < x_0$) функції в околі початкового значення x_0 , де значення q мале за абсолютною величиною ($q < 1$) [1, 11, 18]. При розрахунках використовується верхній рядок горизонтальної таблиці скінченних різниць.

Приклад 5.6. Залежність кінематичної в'язкості води від температури описується такою таблицею:

Температура, °C	10	20	30	40	50
В'язкість · 106, м2/с	1,307	1,004	0,801	0,658	0,551

Визначити кінематичну в'язкість води (м²/с) при температурах 12 °C та

9 °С.

Розв'язок: таблицна функція має 5 вузлів інтерполяції. Позначимо температуру x , а в'язкість y . Крок $h=10$. Задані точки знаходяться в околі x_0 . Тому скористаємось першою інтерполяційною формулою Ньютона. Побудуємо горизонтальну таблицю скінченних різниць для подальших розрахунків.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
10	1,307	-0,303	0,1	-0,04	0,016
20	1,004	-0,203	0,06	-0,024	
30	0,801	-0,143	0,036		
40	0,658	-0,107			
50	0,551				

Запишемо формулу Ньютона для заданої функції ($n = 4$):

$$P_4(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)(q-3)}{4!}\Delta^4 y_0.$$

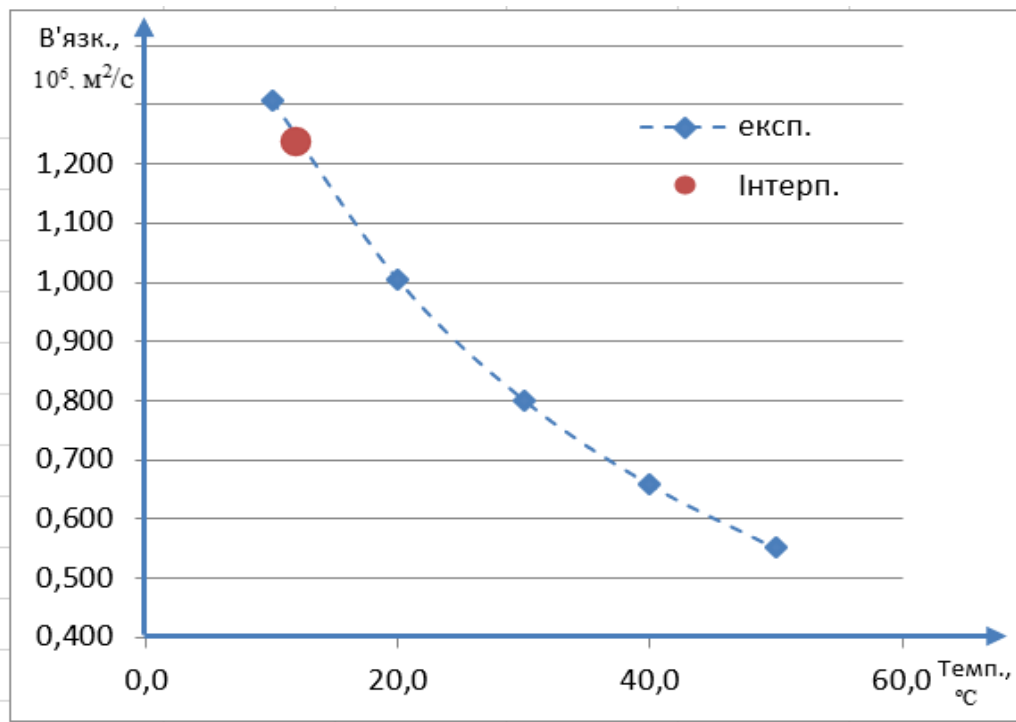
Знайдемо значення функції в точці $x = 12$.

$$\text{Знайдемо } q (x_0 = 10): q = \frac{x-x_0}{h} = \frac{12-10}{10} = 0,2.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$P_4(12) = 1,307 + 0,2 \cdot (-0,303) + \frac{0,2(0,2-1)}{2!}0,1 + \frac{0,2(0,2-1)(0,2-2)}{3!}(-0,04) + \frac{0,2(0,2-1)(0,2-2)(0,2-3)}{4!}0,016 = 1,2359.$$

Кінематична в'язкість води при температурі 12°C буде становити $1,2359 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені у 10^6 разів).



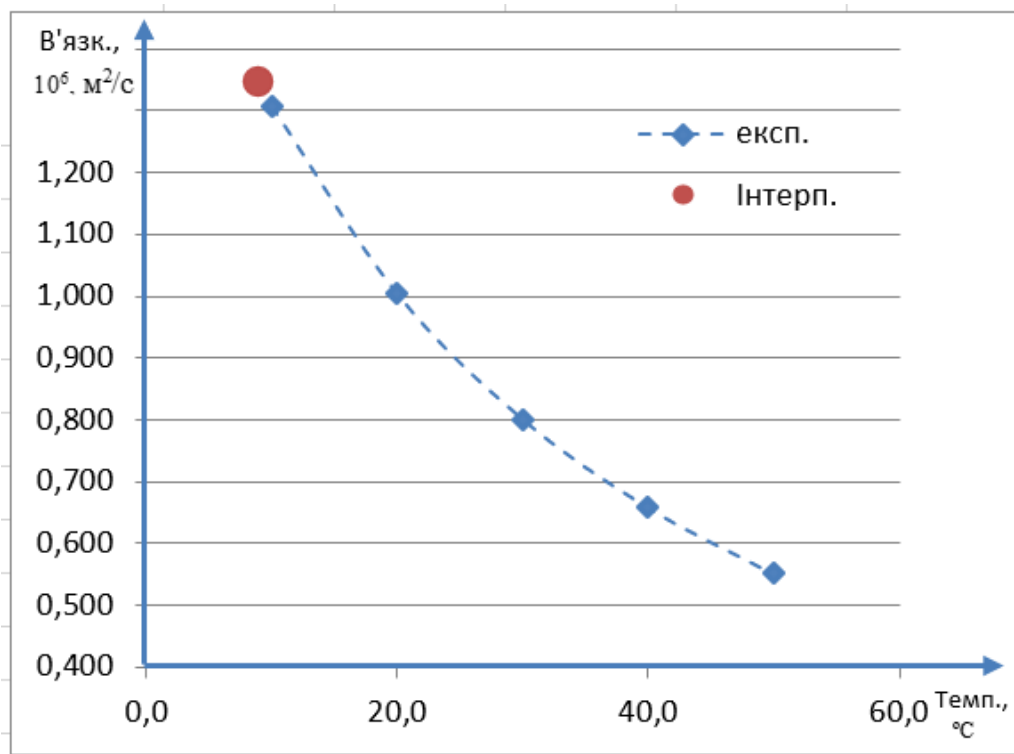
Знайдемо значення функції в точці $x = 9$. В цьому випадку вирішуємо задачу екстраполяції, бо точка знаходиться поза інтервалом.

$$\text{Знайдемо } q (x_0 = 10): q = \frac{x - x_0}{h} = \frac{9 - 10}{10} = -0,1.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$\begin{aligned} P_4(12) = & 1,307 + (-0,1) \cdot (-0,303) + \frac{-0,1(-0,1 - 1)}{2!} \cdot 0,1 + \\ & + \frac{-0,1(-0,1 - 1)(-0,1 - 2)}{3!} \cdot (-0,04) + \\ & + \frac{-0,1(-0,1 - 1)(-0,1 - 2)(-0,1 - 3)}{4!} \cdot 0,016 = 1,3448. \end{aligned}$$

Кінематична в'язкість води при температурі 9 °C буде становити $1,3448 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).



При інтерполюванні функцій для значень аргументу, що знаходяться на відстані більшій за крок h від вузлової точки x_0 , формулу Ньютона доцільно перетворити, змінивши початок відліку. Якщо, наприклад, значення аргументу x знаходиться між вузовими точками $x_i < x < x_{i+1}$, то потрібно прийняти за новий вузол x_0 вузол x_i , й визначити q :

$$q = \frac{x - x_i}{h}$$

і скористатись перетвореною формулою виду:

$$P_n(x_i + qh) = y_i + q\Delta y_i + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_i + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_i + \dots + \frac{q(q-1)(q-2)\dots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_i \quad (5.10)$$

При розрахунках використовується рядок горизонтальної таблиці скінченних різниць, що відповідає значенню аргументу x_i .

Приклад 5.7. Для табличної функції, що показує залежність кінематичної в'язкості води від температури (див. приклад 5.6), визначити

кінематичну в'язкість води ($\text{м}^2/\text{с}$) при температурі $25\text{ }^{\circ}\text{C}$.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
10	1,307	-0,303	0,1	-0,04	0,016
20	1,004	-0,203	0,06	-0,024	
30	0,801	-0,143	0,036		
40	0,658	-0,107			
50	0,551				

Розв'язок: задана точка знаходиться в першій половині таблиці. Тому для розрахунку скористаємось першою інтерполяційною формулою Ньютона. Як видно з таблиці скінченних різниць, значення x знаходиться між вузловими точками $x=20$ та $x=30$. Тоді $x_i = x_1 = 20$. Рядок скінченних різниць, де $x_i = x_1 = 20$, включає три скінченні різниці. Розрахункова формула при $n = 3$ матиме вигляд:

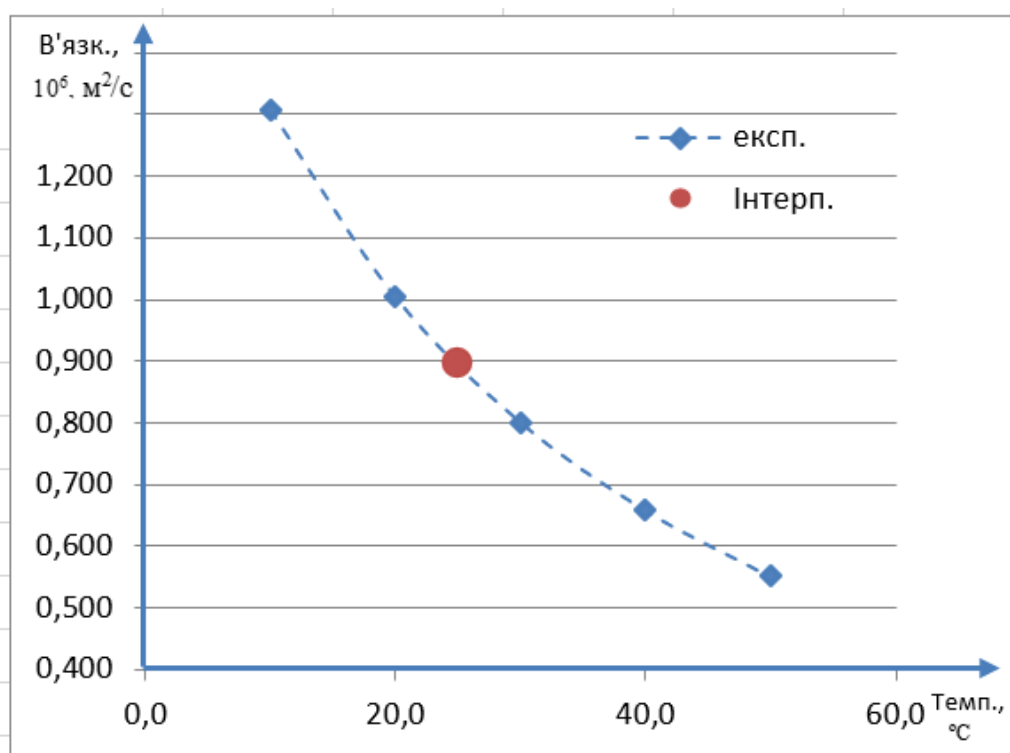
$$P_3(x_2 + qh) = y_1 + q\Delta y_1 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_1 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_1.$$

$$\text{Знайдемо } q (x_1 = 20): q = \frac{x-x_0}{h} = \frac{25-20}{10} = -0,5.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$\begin{aligned} P_3(25) &= 1,004 + 0,5 \cdot (-0,203) + \frac{0,5(0,5-1)}{2!} 0,06 + \\ &+ \frac{0,5(0,5-1)(0,5-2)}{3!} (-0,024) = 0,8935. \end{aligned}$$

Кінематична в'язкість води при температурі $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ буде становити $0,8935 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).



Якщо обрати $n = 1$, то отримаємо з формули (5.9) формулу *лінійної інтерполяції*:

$$P_1(x) = y_0 + q\Delta y_0. \quad (5.11)$$

При $n = 2$ матимемо формулу *квадратичної інтерполяції*:

$$P_2(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0. \quad (5.12)$$

Перша інтерполяційна формула Ньютона використовується для обчислення значень функції для проміжних значень аргументів, що знаходяться у першій половині таблиці. При застосуванні першої інтерполяційної формули Ньютона зручно користуватися горизонтальною таблицею скінченних різниць, тому що при такій організації таблиці потрібні значення різниць функції перебувають у відповідному горизонтальному рядку таблиці. При великій кількості вузлових точок ступінь полінома Ньютона може бути визначена з таблиці скінченних різниць. Ступінь полінома n зазвичай вибирають так, щоб скінченні різниці $\Delta^n y_i$ були постійними із заданим ступенем точності (одна з найважливіших властивостей скінченних різниць полягає у такому: якщо скінченні різниці m -го порядку ($m < n$)

постійні, то функція є поліномом m -го ступеня. Тоді і формула Ньютона повинна бути не вище m -го ступеня). За початкове значення x_0 приймають те з табличних значень аргументу, яке є найбільш близьким до заданого значення x (таким чином змінюється порядок відліку). Цей вузол підбирають для конкретного значення x так, щоби величина $q = (x_i - x) / h$ приймала значення в діапазоні від 0 до 1.

5.2.2.3 Друга інтерполяційна формула Ньютона

При інтерполюванні (екстраполюванні) функцій для значень аргументу x , близьких до максимального вузла x_n , використовується друга інтерполяційна формула Ньютона [1, 11, 17]:

$$P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2! h^2}(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3! h^3}(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n}(x - x_n) \dots (x - x_1). \quad (5.13)$$

На практиці другу інтерполяційну формулу Ньютона (5.13) представляють у дещо іншому вигляді. Для цього вводиться нова змінна q :

$$\frac{x - x_n}{h} = q.$$

Ця змінна визначає число кроків, що необхідне для досягнення числа x з точки x_n .

Тоді можна записати:

$$\frac{x - x_{n-1}}{h} = \frac{x - (x_n - h)}{h} = q + 1; \quad \frac{x - x_{n-2}}{h} = q + 2; \\ \frac{x - x_{n-3}}{h} = q + 3; \dots; \frac{x - x_1}{h} = q + n - 1.$$

З урахуванням прийнятих позначень друга інтерполяційна формула Ньютона набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
P_n(x) = & y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3} \\
& + \\
& + \dots + \frac{q(q+1)(q+2)\dots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0.
\end{aligned}
\tag{5.14}$$

У такому вигляді друга інтерполяційна формула Ньютона зручна для практичного використання.

Цю формулу доцільно використовувати для інтерполювання ($x < x_n$) або екстраполювання ($x > x_n$) функції в околі кінцевого значення x_n , де значення q мале за абсолютною величиною ($q < 1$).

Приклад 5.8. Для табличної функції, що показує залежність кінематичної в'язкості води від температури (див. приклад 5.6). Визначити кінематичну в'язкість води ($\text{м}^2/\text{с}$) при: температурах 45 та 52 °С.

Розв'язок: позначимо температуру x , а в'язкість y . Задані точки знаходяться в околі x_n . Тому скористаємось другою інтерполяційною формулою Ньютона ($n=4$).

$$\begin{aligned}
P_4(x) = & y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3} + \\
& + \frac{q(q+1)(q+2)(q+3)}{4!}\Delta^4 y_{n-4}.
\end{aligned}$$

Скінченні різниці, що потрібні для проведення розрахунків у таблиці скінченних різниць підкреслимо.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
10	1,307	-0,303	0,1	-0,04	<u>0,016</u>
20	1,004	-0,203	0,06	<u>-0,024</u>	
30	0,801	-0,143	<u>0,036</u>		
40	0,658	<u>-0,107</u>			
50	<u>0,551</u>				

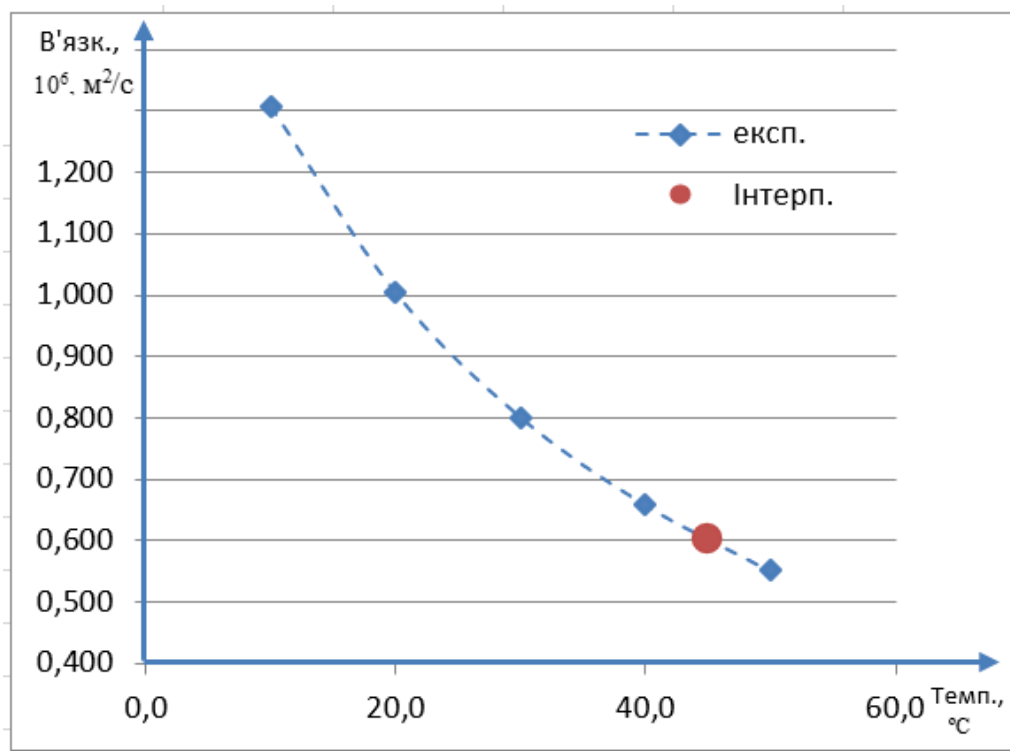
Знайдемо значення функції в точці $x = 45$.

$$\text{Знайдемо } q (x_n = 50): \quad q = \frac{x-x_n}{h} = \frac{45-50}{10} = -0,5.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$\begin{aligned}
 P_4(45) = & 0,551 + (-0,5) \cdot (-0,107) + \frac{-0,5(-0,5 + 1)}{2!} 0,036 + \\
 & + \frac{-0,5(-0,5 + 1)(-0,5 + 2)}{3!} (-0,024) + \\
 & + \frac{-0,5(-0,5 + 1)(-0,5 + 2)(-0,5 + 3)}{4!} 0,016 = 0,6009.
 \end{aligned}$$

Кінематична в'язкість води при температурі 45°C буде становити $0,6009 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).



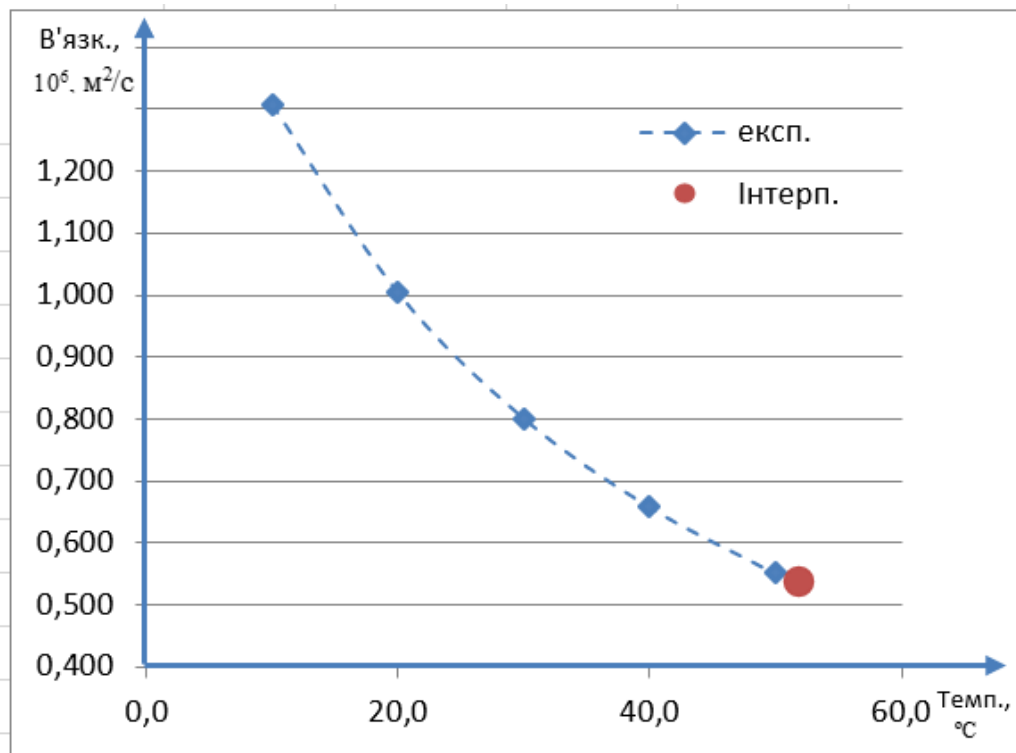
Знайдемо значення функції в точці $x = 52$. В цьому випадку вирішуємо задачу екстраполявання, оскільки точка знаходиться поза інтервалом.

$$\text{Знайдемо } q (x_n = 50): q = \frac{x - x_n}{h} = \frac{52 - 50}{10} = 0,2.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$P_4(45) = 0,551 + 0,2 \cdot (-0,107) + \frac{0,2(0,2 + 1)}{2!} 0,036 + \\ + \frac{0,2(0,2 + 1)(0,2 + 2)}{3!} (-0,024) + \\ + \frac{0,2(0,2 + 1)(0,2 + 2)(0,2 + 3)}{4!} 0,016 = 0,5329.$$

Кінематична в'язкість води при температурі 52 °С буде становити $0,53429 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).



При інтерполюванні функцій для значень аргументу, що знаходяться на відстані більшій за крок h від вузлової точки x_n , другу формулу Ньютона доцільно перетворити, змінивши початок відліку. Якщо, наприклад, значення аргументу x знаходиться між вузловими точками $x_{i-1} < x < x_i$, то потрібно прийняти за новий вузол x_n вузол x_i , визначити q :

$$q = \frac{x - x_i}{h}.$$

і скористатись перетвореною формулою виду:

$$\begin{aligned}
P_n(x_i - qh) = & y_i + q\Delta y_{i-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{i-2} + \\
& + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{i-3} + \\
& \dots + \frac{q(q+1)\dots(q+m-1)}{m!}\Delta^m y_i + \dots
\end{aligned}
\tag{5.15}$$

Приклад 5.9. Для табличної функції, що показує залежність кінематичної в'язкості води від температури (див. приклад 5.6). Визначити кінематичну в'язкість води ($\text{м}^2/\text{с}$) при температурі 36°C .

Задана точка знаходяться в другій половині таблиці. Тому для розрахунку скористаємось другою інтерполяційною формулою Ньютона (5.15). Як видно з таблиці скінченних різниць значення x знаходиться між вузловими точками $x=30$ та $x=40$. Тоді $x_i = x_4 = 40$. Рядок скінченних різниць, де $x_i = x_4 = 40$, включає три скінченні різниці. Розрахункова формула при $n = 3$ матиме вигляд:

$$P_3(x_4 - qh) = y_4 + q\Delta y_3 + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_2 + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_1.$$

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
10	1,307	-0,303	0,1	-0,04	0,016
20	1,004	-0,203	0,06	-0,024	
30	0,801	-0,143	0,036		
40	0,658	-0,107			
50	0,551				

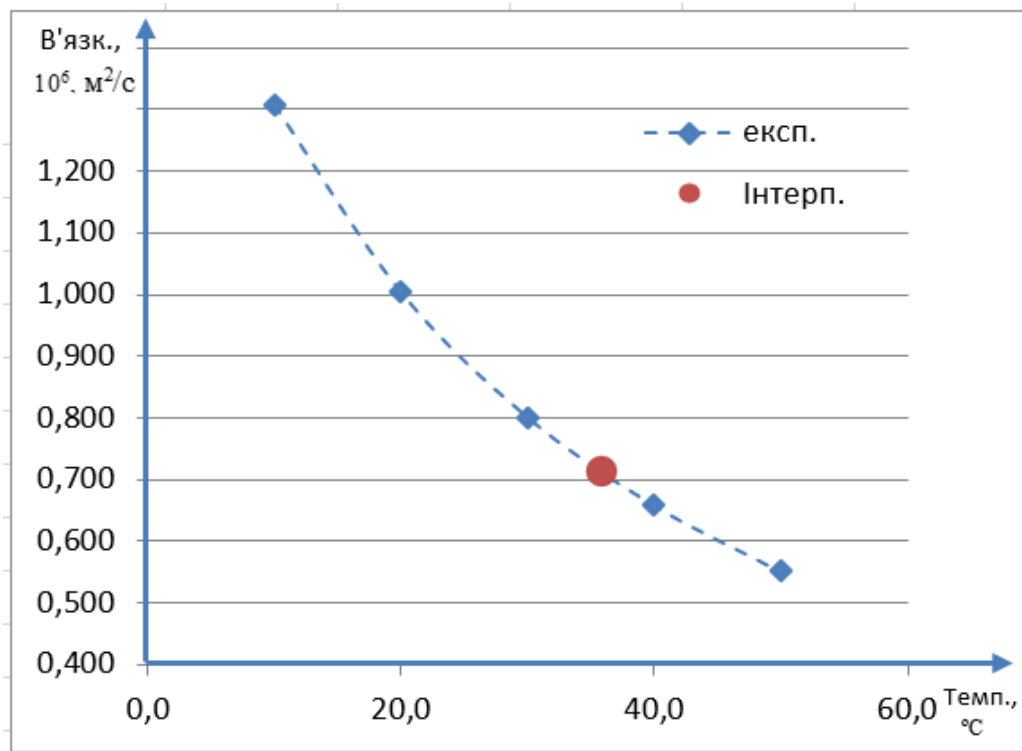
Позначимо кольором потрібні скінченні різниці в таблиці скінченних різниць.

$$\text{Знайдемо } q (x_i = 40): \quad q = \frac{x - x_i}{h} = \frac{36 - 40}{10} = -0,4.$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$\begin{aligned}
P_3(36) = & 0,658 + (-0,4) \cdot (-0,143) + \frac{-0,4(-0,4+1)}{2!}0,06 + \\
& + \frac{-0,4(-0,4+1)(-0,4+2)}{3!}(-0,04) = 0,7106.
\end{aligned}$$

Кінематична в'язкість води при температурі 36 °С буде становити $0,7106 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ (з урахуванням того, що значення в'язкості в таблиці збільшені 10^6 разів).



Друга інтерполяційна формула Ньютона використовується для обчислення значень функції для проміжних значень аргументів, що знаходяться у другій половині таблиці [1, 11, 17]. Визначення порядку розрахункової формули і початкових наближень аналогічне до першої інтерполяційної формули Ньютона.

6.1.2.4. Оцінка похибки інтерполяційних формул Ньютона

Для оцінки похибок інтерполяційних многочленів Ньютона можна використати формулу для оцінки абсолютної похибки інтерполяційної формули Лагранжа (5.5) [1, 11, 18]:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n).$$

Для інтерполяційних формул Ньютона вузлові точки рівновіддалені $x_k - x_{k-1} = h$ (де $h = \text{const}$ – крок інтерполяції).

З урахуванням того, що для першої інтерполяційної формули Ньютона:

$$q = \frac{x - x_0}{h},$$

отримаємо формулу для визначення залишкового члена першої інтерполяційної формули Ньютона:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q-1)(q-2) \dots (q-n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad (5.16)$$

де ξ – деяке проміжне значення аргументу на інтервалі інтерполювання.

З урахуванням того, що для другої інтерполяційної формули Ньютона:

$$q = \frac{x - x_0}{h},$$

отримаємо формулу для визначення залишкового члена другої інтерполяційної формули Ньютона:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q+1)(q+2) \dots (q+n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi). \quad (5.17)$$

Формули (5.16) і (5.17) використовують, коли відомий аналітичний вигляд функції.

При інтерполюванні функції, що задана таблично, аналітичний вигляд функції не відомий. Також при практичних обчисленнях порядок інтерполяційних формул Ньютона визначається тим стовпчиком скінченних різниць, які в межах заданої точності можна вважати постійними. Припускаючи, що в таблиці скінченних різниць для функції $y = f(x)$ різниці $(n+1)$ -го порядку $\Delta^{n+1}y$ майже постійні при досить малому кроці h і враховуючи зв'язок між скінченними різницями і похідними, можна записати:

$$f^{(n+1)}(\xi) \approx \frac{\Delta^{n+1}y_0}{h^{n+1}}.$$

Тоді залишковий член першої інтерполяційної формули Ньютона

матиме вигляд:

$$R_n(x) \approx \frac{q(q-1)(q-2) \dots (q-n)}{(n+1)!} \Delta^{n+1} y_0, \quad (5.18)$$

а для другої інтерполяційної формули Ньютона:

$$R_n(x) \approx \frac{q(q+1)(q+2) \dots (q+n)}{(n+1)!} \Delta^{n+1} y_n. \quad (5.19)$$

Формули (5.18) і (5.19) використовують, коли функція $y = f(x)$ задана таблично.

5.2.2.4 Обернена інтерполяція за методом Ньютона

Вирішити задачу оберненої інтерполяції при використанні інтерполяційних формул Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції по аналогії зі оберненою інтерполяцією за Лагранжем неможливо [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]. Якщо прийняти y за незалежну змінну (аргумент), а x вважати функцією, то вузлові точки практично у всіх випадках стануть нерівновіддаленими. Тому цю задачу при використанні інтерполяційних формул Ньютона вирішують по іншому.

Нехай потрібно знайти значення в околі точки y_0 . Скористаємося *першою інтерполяційною формулою Ньютона* для заміни функції.

$$y = y_0 + q \Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \dots + \frac{q(q-1) \dots (q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0.$$

Знайдемо q :

$$\begin{aligned} q = \frac{y - y_0}{\Delta y_0} - \frac{\Delta^2 y_0}{2! \Delta y_0} q(q-1) - \dots \\ - \frac{\Delta^n y_0}{n! \Delta y_0} q(q-1) \dots (q-n+1). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Уведемо позначення:

$$c^0 = \frac{y - y^0}{\Delta y^0},$$

$$c_1 = \frac{\Delta^2 y_0}{2! \Delta y_0},$$

$$\dots \dots \dots \dots \dots \dots$$

$$c_n = \frac{\Delta^n y_0}{n! \Delta y_0}.$$

і отримаємо:

$$q_i = c_0 - c_1 q_{i-1}(q_{i-1} - 1) - \dots - c_n q_{i-1}(q_{i-1} - 1)(q_{i-1} - n + 1). \quad (5.21)$$

Таким чином, отримана ітераційна залежність: $q_i = \varphi(q_{i-1})$.

Потрібне значення q визначимо за методом ітерацій. Ітераційний процес закінчується після досягнення заданої точності:

$$|q_{i+1} - q_i| \leq \varepsilon.$$

За початкове наближення q_0 приймемо:

$$q^0 = \frac{y - y^0}{\Delta y^0}. \quad (5.22)$$

Шукане значення q – це значення q_{i+1} , що знайдене в останній ітерації.

Визначивши значення $q^* = q_{i+1}$ і з урахуванням, що

$$q^* = \frac{x - x_0}{h},$$

знаходимо необхідне значення аргументу x :

$$x = x_0 + q^* h$$

Приклад 5.10. Для таблично заданої функції:

x	1,0	1,2	1,4
y	35	55	63

Визначити, при якому значенні x функція $y = 40$. Точність розрахунку $\varepsilon = 0,001$.

Розв'язок: вузли інтерполяції рівновіддалені. Значення y знаходиться в околі точки y_0 . Скористаємося першою інтерполяційною формулою Ньютона.

Побудуємо таблицю кінцевих різниць.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$
1,0	35	20	-12
1,2	55	8	
1,4	63		

Порядок першої інтерполяційної формули Ньютона визначаємо, як і при розв'язанні прямої задачі – $n = 2$; $h = 0,2$. Тоді:

$$q_i = c_0 - c_1 q_{i-1}(q_{i-1} - 1),$$

$$c_0 = \frac{y - y_0}{\Delta y_0},$$

$$c_1 = \frac{\Delta^2 y_0}{2! \Delta y_0}.$$

Розрахуємо значення коефіцієнтів c_i :

$$c_0 = \frac{y - y_0}{\Delta y_0} = \frac{40 - 35}{20} = 0,25;$$

$$c_1 = \frac{\Delta^2 y_0}{2! \Delta y_0} = \frac{-12}{2 \cdot 20} = -0,3.$$

Отримане ітераційне рівняння матиме вид:

$$q_i = 0,25 + 0,3 q_{i-1}(q_{i-1} - 1).$$

Початкове наближення:

$$q_0 = c_0 = \frac{y - y^0}{\Delta y^0} = 0,25.$$

Проведемо розрахунки до досягнення заданої точності. Знайдемо q_1 :

$$q_1 = 0,25 + 0,3 q_0(q_0 - 1) = 0,25 + 0,3 \cdot 0,25 \cdot (0,25 - 1) = 0,1938.$$

Перевірка досягнення точності:

$$|0,1938 - 0,25| \geq 0,001.$$

Знайдемо q_2 :

$$q_2 = 0,25 + 0,3 q_1(q_1 - 1) = 0,25 + 0,3 \cdot 0,1938 \cdot (0,1938 - 1) = 0,2031.$$

Перевірка досягнення точності:

$$|0,2031 - 0,1938| \geq 0,001.$$

Знайдемо q_3 :

$$q_3 = 0,25 + 0,3 q_2(q_2 - 1) = 0,25 + 0,3 \cdot 0,2031 \cdot (0,2031 - 1) = 0,2014.$$

Перевірка досягнення точності:

$$|0,2014 - 0,2031| \geq 0,001.$$

Знайдемо q_4 :

$$q_4 = 0,25 + 0,3 q_3(q_3 - 1) = 0,25 + 0,3 \cdot 0,2014 \cdot (0,2014 - 1) = 0,2017.$$

Перевірка досягнення точності:

$$|0,2017 - 0,2014| \leq 0,001.$$

Тоді: $q^* = q_4 = 0,2017$.

Визначимо значення аргументу:

$$x = x_0 + q^*h = 1,0 + 0,2017 \cdot 0,2 = 1,0403.$$

Примітка. Обернена інтерполяція за першою інтерполяційною формулою Ньютона є ітераційним процесом і дуже зручне для програмування. Рекомендації з програмної реалізації оберненої інтерполяції за першою інтерполяційною формулою Ньютона наведені в розділі 15.

Аналогічно можна застосувати розглянутий підхід і для розв'язання задачі оберненої інтерполяції з використанням *другої інтерполяційної формули Ньютона*.

Скористаємося другою інтерполяційною формулою Ньютона для заміни функції.

$$y = y_n + q \Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1) \dots (q+n-1)}{n!} \Delta^n y^0.$$

Знайдемо q :

$$\begin{aligned} q = & \frac{y - y_n}{\Delta y_n^{-1}} - \frac{q(q+1)}{2! \Delta y_n^{-1}} \Delta^2 y_n^{-2} - \\ & \dots - \frac{q(q+1) \dots (q+n-1)}{n! \Delta y_n^{-1}} \Delta^n y^0. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Введемо позначення:

$$\begin{aligned} c^0 &= \frac{y - y_n}{\Delta y_n^{-1}}, \\ c_1 &= \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2! \Delta y_{n-1}}, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ c_n &= \frac{\Delta^n y_0}{n! \Delta y_{n-1}}, \end{aligned}$$

і отримаємо:

$$q_i = c_0 - c_1 q_{i-1}(q_{i-1} + 1) - \dots - c_n q_{i-1}(q_{i-1} + 1)(q_{i-1} + n + 1). \quad (5.24)$$

Таким чином, отримана ітераційна залежність: $q_i = \varphi(q_{i-1})$.

Потрібне значення q визначимо за методом ітерацій. Ітераційний процес закінчується після досягнення заданої точності:

$$|q_{i+1} - q_i| \leq \varepsilon.$$

За початкове наближення q_0 приймемо:

$$q^0 = \frac{y - y_n}{\Delta y_n^{-1}}. \quad (5.25)$$

Шукане значення q – це значення q_{i+1} , що знайдене в останній ітерації.

Визначивши значення $q^* = q_{i+1}$ і з урахуванням, що

$$q^* = \frac{x - x_n}{h},$$

знаходимо необхідне значення аргументу x :

$$x = x_n + q^* h.$$

Приклад 5.11. Для таблично заданої функції:

x	10	13	16	19	22
y	1,308	1,203	1,111	1,030	0,958

визначити, при якому значенні аргументу функція становить: $y = 1,06$.
Точність: $\varepsilon = 0,001$.

Розв'язок: вузли інтерполяції рівновіддалені. Значення y в околі точки y_n (друга половина таблиці). Скористаємося другою інтерполяційною формулою Ньютона. Складемо таблицю скінченних різниць:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
10	1,308	-0,105	0,013	-0,002
13	1,203	-0,092	0,011	-0,002
16	1,111	-0,081	0,009	
19	1,030	-0,072		
22	0,958			

Порядок другої інтерполяційної формули Ньютона визначаємо, як і при розв'язанні прямої задачі – $n=3$. $h=3$. Значення $y = 1,06$ знаходиться між точками $y = 1,111$ та $y = 1,030$. Обираємо $x_n = 19$ та $y_n = 1,030$. Значення з таблиці, що необхідні для розрахунків виділимо кольором. Тоді:

$$q_i = c_0 - c_1 q_{i-1}(q_{i-1} + 1) - c_2 q_{i-1}(q_{i-1} + 1)(q_{i-1} + 2),$$

$$c_0 = \frac{y - y_n}{\Delta y_n^{-1}},$$

$$c_1 = \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2! \Delta y_{n-1}},$$

$$c_n = \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{n! \Delta y_{n-1}}.$$

Розрахуємо значення коефіцієнтів c_i :

$$c_0 = \frac{y - y_n}{\Delta y_{n-1}} = \frac{1,06 - 1,030}{-0,081} = -0,3704;$$

$$c_1 = \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2! \Delta y_{n-1}} = \frac{0,011}{2 \cdot (-0,081)} = -0,0679;$$

$$c_2 = \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{n! \Delta y_{n-1}} = \frac{-0,002}{6 \cdot (-0,081)} = 0,0041.$$

Отримане ітераційне рівняння матиме вид:

$$q_i = -0,3704 - 0,0679 q_{i-1}(q_{i-1} + 1) - 0,0041 q_{i-1}(q_{i-1} + 1)(q_{i-1} + 2).$$

Початкове наближення:

$$q_0 = c_0 = \frac{y - y_n}{\Delta y_n^{-1}} = -0,3704.$$

Проведемо розрахунки до досягнення заданої точності.

Знайдемо q_1 :

$$q_1 = -0,3704 + 0,0679 q_0(q_0 + 1) - 0,0041 q_0(q_0 + 1)(q_0 + 2),$$

$$q_1 = -0,3704 + 0,0679 \cdot (-0,3704)(-0,3704 + 1) - 0,0041 \cdot (-0,3704)(-0,3704 + 1)(-0,3704 + 2) = -0,3847.$$

Перевірка досягнення точності:

$$|-0,3847 - (-0,3704)| \geq 0,001.$$

Знайдемо q_2 :

$$\begin{aligned} q_2 &= -0,3704 + 0,0679 q_1(q_1 + 1) - 0,0041 q_1(q_1 + 1)(q_1 + 2), \\ q_2 &= -0,3704 + 0,0679 \cdot (-0,3847)(-0,3847 + 1) - 0,0041 \cdot (-0,3847) \cdot \\ &\quad \cdot (-0,3847 + 1)(-0,3847 + 2) = -0,3849. \end{aligned}$$

Перевірка досягнення точності:

$$|-0,3849 - (-0,3847)| \leq 0,001.$$

Тоді: $q^* = q_2 = -0,3849$.

Визначимо значення аргументу:

$$x = x_0 + q^* h = 19 + (-0,3849) \cdot 3 = 17,8453.$$

Примітка. Обернена інтерполяція за другою інтерполяційною формулою Ньютона є ітераційним процесом і дуже зручне для програмування [6-8, 14, 15, 40-43, 47]. Рекомендації з програмної реалізації зворотного інтерполювання за другою інтерполяційною формулою Ньютона наведені в розділі 15.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 5

1. Сформулюйте задачу інтерполяції функцій. Наведіть геометричну інтерпретацію задачі інтерполяції.
2. В чому полягає відмінність інтерполяції та екстраполяції функцій?
3. При якому розташуванні вузлів інтерполяції застосовують інтерполяційну формулу Лагранжа?
4. Чи застосовується інтерполяційна формула Лагранжа для екстраполяції функцій?
5. Як вирішується задача зворотної інтерполяції функцій при інтерполяції за Лагранжем?

6. Як визначити похибку інтерполяції при застосуванні формули Лагранжа?
7. В чому відмінність при застосуванні першої і другої інтерполяційних формул Ньютона?
8. Поняття скінченних різниць.
9. Зв'язок скінченних різниць і похідних.
10. Як визначити похибку інтерполяції при застосуванні інтерполяційних формул Ньютона?
11. Як правильно обрати x_0 і x_n при використанні інтерполяційних формул Ньютона?
12. Як визначити ступінь інтерполяційних формул Ньютона?
13. Вигляд інтерполяційної формули Лагранжа та інтерполяційних формул Ньютона для лінійної інтерполяції?
14. Вигляд інтерполяційної формули Лагранжа та інтерполяційних формул Ньютона для квадратичної інтерполяції.
15. Чи застосовуються інтерполяційні формули Ньютона для екстраполяції функцій?
16. В чому полягають особливості зворотної інтерполяції при використанні інтерполяційних формул Ньютона?
17. Для заданої таблично функції виду

x	x_0	x_1	x_2	x_3
y	y_0	y_1	y_2	y_3

записати загальний вигляд першої інтерполяційної формули Ньютона (врахувати всі вузли інтерполяції).

18. Для заданої таблично функції виду

x	x_0	x_1	x_2	x_3
y	y_0	y_1	y_2	y_3

записати загальний вигляд другої інтерполяційної формули Ньютона (врахувати всі вузли інтерполяції).

19. Для заданої таблично функції виду

x	x_0	x_1	x_2	x_3
y	y_0	y_1	y_2	y_3

записати загальний вигляд інтерполяційної формули Лагранжа (врахувати всі вузли інтерполяції).

20. Температурна залежність тиску (P) та питомого об'єму (v) насиченої водяної пари наведені в таблиці¹:

$t, ^\circ\text{C}$	3,0	6,0	9,0	12,0	15,0	18,0
$P, \text{кПа}$	0,7577	0,9349	1,1477	1,4022	1,7051	2,0640
$v, \text{м}^3/\text{кг}$	168,132	137,734	113,386	93,784	77,926	65,038

а) знайти з використанням формули Лагранжа значення тиску (P) та питомого об'єму (v) при $t = 2 ^\circ\text{C}$, $7 ^\circ\text{C}$, $16 ^\circ\text{C}$ (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

б) знайти з використанням формул Ньютона значення тиску (P) та питомого об'єму (v) при $t = 2 ^\circ\text{C}$, $7 ^\circ\text{C}$, $16 ^\circ\text{C}$ (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

в) оцінити похибки інтерполювання за формулами Лагранжа та Ньютона для пп. а) та б) та зробити висновки щодо точності вказаних формул.

21. Результати експериментальних досліджень зведені в таблицю

x	x	10	20	30	40
y	y	8	19	32	52

знайти з використанням формул Ньютона значення функції y при $x = 15$.

22. Експериментатором було отримано наведені у таблиці дані щодо тиску насиченої пари (P) етанолу в умовах паро-рідинної рівноваги при різних значеннях температури (T).

№	1	2	3	4	5
T, K	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15
$P, \text{кПа}$	7,4527	9,3326	12,5056	15,6654	20,5450
№	6	7	8	9	
T, K	323,15	328,15	333,15	338,15	
$P, \text{кПа}$	25,4246	32,2507	40,5500	50,3825	

¹ CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. Ed. by Lide D. R. 2015. CRC Press. 2666 p

а) знайти з використанням формули Лагранжа значення тиску (P) при $T = 290\text{ K}$, 305 K , 330 K (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

б) знайти з використанням формул Ньютона значення тиску (P) при $T = 290\text{ K}$, 305 K , 330 K (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

в) оцінити похибки інтерполювання за формулами Лагранжа та Ньютона для пп. а) та б) та зробити висновки щодо точності вказаних формул.

23. Результати експериментальних досліджень зведені в таблицю

x	10	20	30	40
y	8	19	32	52

знайти з використанням формул Ньютона значення функції y при $x = 42$.

24. У таблиці наведено експериментальні дані щодо середньої молярної теплоємності (c_p) азоту – кількості теплоти, потрібної для нагріву 1 моль газу від 298 K до заданої температури (T) при атмосферному тиску.

T, K	373,0	473,0	573,0	673,0	773,0	873,0	973,0
$c_p, \text{Дж}/(\text{моль} \cdot \text{K})$	29,19	29,29	29,46	29,68	29,97	30,27	30,56

а) знайти з використанням формули Лагранжа значення середньої молярної теплоємності (c_p) для нагріву азоту до температур $T = 400\text{ K}$, 800 K , 1000 K (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

б) знайти з використанням формул Ньютона значення середньої молярної теплоємності (c_p) для нагріву азоту до температур $T = 400\text{ K}$, 800 K , 1000 K (обґрунтувати, поліном якого ступеня доцільно побудувати);

в) оцінити похибки інтерполювання за формулами Лагранжа та Ньютона для пп. а) та б) та зробити висновки щодо точності вказаних формул.

25. Результати експериментальних досліджень зведені в таблицю

x	4	7	12	18
y	6	12	22	33

знайти з використанням формули Лагранжа значення функції y при $x = 15$.

6 НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЇ СПЛАЙНАМИ

6.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 6

У випадку даних з достатньо великою кількістю вузлів інтерполювання використання інтерполяційних методів Лагранжа та Ньютона для *всього відрізка інтерполювання* $[a, b]$ згідно правила Рунге (див. розділ 5) призводить до значних похибок наближення. Зокрема, традиційні методи інтерполювання (методи Лагранжа, Ньютона тощо) можуть виявитися неефективними для наборів даних із немонотонною зміною функції (тобто з наявністю екстремумів та перегинів) [1, 3-5, 11, 17-19, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]. У цьому випадку, як зазначалося вище, рекомендовано поділити відрізок інтерполювання $[a, b]$ на окремі ділянки, і на кожній з таких ділянок на основі обмеженої кількості вузлів будувати інтерполяційний поліном «невисокого» ступеня. При цьому точність інтерполювання зростає, але графік загального інтерполяційного поліному (для всього відрізка інтерполювання $[a, b]$) матиме «злами» (тобто цей графік матиме точки, де похідна не є безперервною).

Натомість, сплайн-інтерполяція (зокрема, сплайн-інтерполяція із використанням поліномів третього ступеня) дає змогу описати дані на відрізку інтерполювання $[a, b]$ *гладкою неперервною кривою* [1].

Інтерполяція кубічними сплайнами є *окремим випадком кусково-поліноміальної інтерполяції*. В залежності від ступеня поліномів, які використовуються, розрізняють сплайн-інтерполяцію поліномами першого ступеня (*лінійну сплайн-інтерполяцію*), сплайн-інтерполяцію поліномами другого ступеня (*квадратичну сплайн-інтерполяцію*), сплайн-інтерполяцію поліномами третього ступеня (*кубічну сплайн-інтерполяцію*) і т.д.

До прикладної математики термін «сплайн» було запозичено з креслярської практики, де «сплайн» – універсальне лекало, тобто спеціальна гнучка лінійка для креслення вручну. Для побудови кривих ліній потрібної форми кресляр закріплював лінійку-сплайн у двох точках (на кінцях лінійки), вигинав сплайн потрібним чином, і проводив вздовж нього криву.

З математичної точки зору, можливу поведінку (вигин) тонкого гнучкого

Найбільш поширеною і практично значимою є кубічна сплайн-інтерполяція, у випадку якої вихідна таблична функція між будь-якими двома сусідніми вузлами інтерполюється окремим кубічним поліномом [1].

- на кожному відрізку між сусідніми вузлами інтерполяції $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ є кубічним поліномом;
- безперервна разом зі своїми першою та другою похідними у всіх точках $x \in [a, b]$.

$$y(x) \approx \begin{cases} S_1(x), x_0 \leq x \leq x_1 \\ S_2(x), x_1 \leq x \leq x_2 \\ \\ S_n(x), x_{n-1} \leq x \leq x_n. \end{cases}. \quad (6.1)$$
$$S_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3, \quad (6.2)$$

$$j = 1, 2, \dots, n.$$
$$0 \leq x - x_j \leq h.$$

6.2 ПРИНЦИПИ ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ КУБІЧНОГО СПЛАЙНУ

Для визначення коефіцієнтів a_j, b_j, c_j, d_j у (6.1), (6.2) необхідно скласти систему з $(4 \cdot n)$ рівнянь для усіх елементарних відрізків $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$.

1. З умови безперервності функції $S(x) = \{S_1(x), S_2(x), \dots, S_{n-1}(x)\}$ можна вивести $(4 \cdot n)$ рівнянь (6.3), (6.4):

$$\begin{aligned} S_j(x_{j-1}) &= y_{j-1}, \\ S_j(x_j) &= y_j, \\ j &= 1, 2, \dots, n, \end{aligned}$$

тобто

$$a_j = y_{j-1}, \quad (6.3)$$

$$a_j + b_j h_j + c_j h_j^2 + d_j h_j^3 = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (6.4)$$

2. З умови безперервності першої похідної функції $S'(x)$ можна вивести $(n - 1)$ рівнянь (6.5):

$$\begin{aligned} S'_j(x_j) &= S'_{j+1}(x_j), \\ j &= 1, 2, \dots, n - 1. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Оскільки з (6.2) похідна $S'_j = b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2$, з умови безперервності (6.5) отримуємо:

$$\begin{aligned} b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2 &= b_{j+1}, \text{ тобто} \\ b_j + 2c_j h_j + 3d_j h_j^2 - b_{j+1} &= 0, \\ j &= 1, 2, \dots, n - 1. \end{aligned} \quad (6.6)$$

3. З умови безперервності другої похідної функції $S''(x)$ можна вивести $(n - 1)$ рівнянь (6.8):

$$S_j''(x_j) = S_{j+1}''(x_j), \quad j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (6.7)$$

Оскільки з (6.2) друга похідна $S_j'' = 2c_j + 6d_j(x - x_j)$, з умови безперервності (6.7) отримуємо:

$$\begin{aligned} 2c_j + 6d_j(x - x_j) &= 2c_{j+1}, \text{ то } \delta \text{ то} \\ 2c_j + 6d_j h_j - c_{j+1} &= 0, \\ j &= 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \tag{6.8}$$

5. Останні два рівняння системи для визначення коефіцієнтів a_j, b_j, c_j, d_j у (6.1)-(6.2) знаходять з умов закріплення кінців сплайну. Зокрема, можна задати умови закріплення для похідної функції $S''(x)$: $S''(x_0) = 0$; $S''(x_n) = 0$. Тоді

$$c_1 = 0 \tag{6.9}$$

$$c_n + 3d_n h_n = 0. \quad (6.10)$$

Таким чином, для визначення коефіцієнтів кубічного сплайну (6.1)-(6.2):

[illegible]

необхідно скласти та розв'язати систему з $(4 \cdot n)$ лінійних алгебраїчних рівнянь з $(4 \cdot n)$ невідомими (6.3), (6.4), (6.6), (6.8), (6.10):

$$\left\{ \begin{array}{l} a_j = y_{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n \\ a_j + b_j h_j + c_j h_j^2 + d_j h_j^3, \quad j = 1, 2, \dots, n \\ b_j + 2c_j h_j + 3d_j h_j^2 - b_{j+1} = 0, j = 1, 2, \dots, n-1 \\ 2c_j + 6d_j h_j - c_{j+1} = 0, j = 1, 2, \dots, n-1. \\ c_n + 3d_n h_n = 0. \\ c_1 = 0. \end{array} \right. \quad (6.12)$$

Для розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь (6.12) можна скористатися відомими методами розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (див. відповідний розділ вище). Однак слід зауважити, що матриця коефіцієнтів даної системи рівнянь після підстановки констант і зведення подібних завжди набуває специфічної структури: вона заповнена ненульовими елементами тільки вздовж головної діагоналі. Для розв'язання систем лінійних рівнянь з матрицями системи такого роду (вони мають назву *тридіагональних матриць*) розроблено спеціальні ефективні чисельні методи, зокрема, метод Томаса (метод прогонки).

6.3 АЛГОРИТМ ОБЧИСЛЕННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ КУБІЧНОГО СПЛАЙНУ МЕТОДОМ ТОМАСА

Алгоритм обчислення коефіцієнтів кубічного сплайну методом прогонки можна стисло описати такими кроками (наведено алгоритм для $n = 4$):

I. Етап «прямого ходу».

1. Обраховують h_j – довжини усіх елементарних відрізків $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$:

$$h_j = x_j - x_{j-1}, j = 1, 2, \dots, n - 1.$$

2. З умови безперервності функції обчислюють коефіцієнти a_j :

$$a_j = y_{j-1}, j = 1, 2, \dots, n.$$

3. Обчислюють допоміжні скінченно-різницеві співвідношення k_j, m_j :

$$k_j = 3 \left(\frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{y_{j-1} - y_{j-2}}{h_{j-1}} \right), m_j = 2(h_{j-1} + h_j), j = 2, \dots, n.$$

4. Обчислюють «прогонкові» коефіцієнти α_j, β_j :

- a) $\alpha_1 = 0, \beta_1 = 0;$
 b) $\alpha_2 = k_2/m_2, \beta_2 = h_2/m_2;$
 c) $\alpha_j = \frac{k_j - h_{j-1}\alpha_{j-1}}{m_j - h_{j-1}\beta_{j-1}}, \beta_j = \frac{1}{m_j - h_{j-1}\beta_{j-1}}, j = 3, 4, \dots, n.$

II. Етап «зворотного ходу».

5. Визначають коефіцієнти c_j :

- a) $c_{n+1} = 0$ (в даному випадку, $c_5 = 0$);
 b) $c_j = \alpha_j - \beta_j c_{j+1}, j = 1, 2, \dots, n.$

6. Обчислюють коефіцієнти d_j :

$$d_j = \frac{c_{j+1} - c_j}{3h_j}, j = 1, 2, \dots, n.$$

7. Знаходять коефіцієнти b_j :

$$b_j = \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{h_j}{3} \cdot (c_{j+1} + 2c_j), j = 1, 2, \dots, n.$$

Після того, як знайдені константи a_j, b_j, c_j, d_j сплайну (6.11), інтерполяційним кубічним сплайном можна користуватися безпосередньо, або після належних алгебраїчних перетворень – відкриття дужок та зведення подібних.

Зауваження. Отриманий шляхом сплайн-інтерполяції кусково-неперевний поліном $S(x) = \{S_1(x), S_2(x), \dots, S_{n-1}(x)\}$ використовують шляхом підстановки значення аргументу окремо для кожного із відрізків відрізків $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ інтервалу $[a, b]$ ¹.

¹ Див. такі статті:

- Chikwendu, C & Oduwole, Kehinde & Okoro, Samuel. (2015). An Application of Spline and Piecewise Interpolation to Heat Transfer (Cubic Case). 5. 28-39.
- Halang, W. A., Langlais, R., & Kugler, E. (1978). Cubic spline interpolation for the calculation of retention indices in temperature-programmed gas-liquid chromatography. Analytical Chemistry, 50(13), 1829–1832. doi:10.1021/ac50035a026
- Dunfield, L. G., & Read, J. F. (1972). Determination of Reaction Rates by the Use of Cubic Spline Interpolation. The Journal of Chemical Physics, 57(5), 2178–2183. doi:10.1063/1.1678550, та ін.

Приклад 6.1. Внаслідок дослідження процесу розділення двокомпонентної суміші *n*-декану та *n*-тетрадекану (у мольному співвідношенні 50/50), отримано множину точок експериментальної рівноважної кривої дистиляції¹. У табл. 5.xx наведено залежність температури суміші *y*, °C від об'єму дистиляту *x*, %. Знайти наближення представлених даних за допомогою сплайну третього порядку.

Таблиця 6.1. До побудови сплайну: експериментальні вузли кривої дистиляції

<i>x</i> , %	0	15	40	60	85
<i>y</i> , °C	166	188	207	240	243

Розв'язок: розрахунки із визначення коефіцієнтів кубічного сплайну зведено до таблиці (рис. 6.1, а), зокрема:

– на етапі «прямого ходу»:

1. Обраховуємо h_j – довжини усіх елементарних відрізків ($j = 1, 2, 3, 4$):

$$h_1 = x_1 - x_0 = 15,0 - 0,0 = 15,0,$$

$$h_2 = x_2 - x_1 = 40,0 - 15,0 = 25,0 \text{ і т. д.}$$

2. З умови безперервності функції обчислюємо коефіцієнти a_j ($j = 1, 2, 3, 4$):

$$a_1 = y_0 = 166,0,$$

$$a_2 = y_1 = 188,0 \text{ і т. д.}$$

3. Обчислюємо допоміжні скінченно-різницеві співвідношення k_j, m_j ($j = 2, 3, 4$):

$$k_2 = 3 \left(\frac{y_2 - y_1}{h_2} - \frac{y_1 - y_0}{h_1} \right) = -2,12 \text{ і т. д.}$$

$$m_2 = 2(h_1 + h_2) = 80,0 \text{ і т. д.}$$

4. Обчислюємо «прогонкові» коефіцієнти α_j, β_j :

¹ Ferris, A. M., & Rothamer, D. A. (2016). Methodology for the experimental measurement of vapor–liquid equilibrium distillation curves using a modified ASTM D86 setup. *Fuel*, 182, 467–479.

$$\alpha_1 = 0, \quad \beta_1 = 0;$$

$$\alpha_2 = k_2/m_2 = -0,0265,$$

$$\beta_2 = h_2/m_2 = 0,3125,$$

$$\alpha_3 = \frac{k_3 - h_2\alpha_2}{m_3 - h_2\beta_2} = 0,0405,$$

$$\beta_3 = \frac{1}{m_3 - h_2\beta_2} = 0,2433,$$

$$\alpha_4 = \frac{k_4 - h_3\alpha_3}{m_4 - h_3\beta_3} = -0,0634,$$

$$\beta_3 = \frac{1}{m_4 - h_3\beta_3} = 0,2937.$$

– на етапі «зворотного ходу»:

5. Визначаємо коефіцієнти c_j :

$$c_5 = 0,$$

$$c_4 = \alpha_4 - \beta_4 c_5 = -0,0634,$$

$$c_3 = \alpha_3 - \beta_3 c_4 = -0,0560 \text{ і т. д.}$$

6. Обчислюємо коефіцієнти d_j ($j = 1, 2, \dots, n$):

$$d_4 = \frac{c_5 - c_4}{3h_4} = 0,0008,$$

$$d_3 = \frac{c_4 - c_3}{3h_3} = -0,0020 \text{ і т. д.}$$

7. Знаходимо коефіцієнти b_j ($j = 1, 2, \dots, n$):

$$b_1 = \frac{y_1 - y_0}{h_1} - \frac{h_1}{3} \cdot (c_2 + 2c_1) = 1,6866 \text{ і т. д.}$$

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Інтерполювання кубічним сплайном $y(x) \approx \begin{cases} a_1 + b_1(x-x_1) + c_1(x-x_1)^2 + d_1(x-x_1)^3, x_0 \leq x \leq x_1 \\ a_2 + b_2(x-x_2) + c_2(x-x_2)^2 + d_2(x-x_2)^3, x_1 \leq x \leq x_2 \\ \dots \dots \dots \\ a_n + b_n(x-x_n) + c_n(x-x_n)^2 + d_n(x-x_n)^3, x_{n-1} \leq x \leq x_n \end{cases}$											
2	i	x_i	y_i	h_i	a_i	κ_i	m_i	α_i	β_i	c_i	d_i	b_i
3	Вихідні дані			Прямий хід						Зворотній хід		
4	0	0,00	166,0							0,0		
5	1	15,0	188,0	15,0	166,0			0,0	0,0	0,0000	-0,0010	1,6866
6	2	40,0	207,0	25,0	188,0	-2,12	80,00	-0,0265	0,3125	-0,0440	0,0013	1,0267
7	3	60,0	240,0	20,0	207,0	2,67	90,00	0,0405	0,2433	0,0560	-0,0020	1,3265
8	4	85,0	243,0	25,0	240,0	-4,59	90,00	-0,0634	0,2937	-0,0634	0,0008	1,1774
9	5									0,0		

а)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
11												
12		x_i	y_i	S_i			t	a_i	b_i	c_i	d_i	
13		0,00	166,000	166,000			1	166,00	1,6866	0,0000	-0,0010	
14		2,50		170,201			2	188,00	1,0267	-0,0440	0,0013	
15		5,00		174,311			3	207,00	1,3265	0,0560	-0,0020	
16		7,50		178,237			4	240,00	1,1774	-0,0634	0,0008	
24		35,83		202,349								
25		40,00	207,000	207,000								
26		43,33		211,970								
27		46,67		217,742								
28		50,00		223,873								
29		53,33		229,921								
30		56,67		235,444								
31		60,00	240,000	240,000								
32		64,17		243,865								
33		68,33		245,895								
34		72,50		246,456								
35		76,67		245,916								
36		80,83		244,642								
37		85,00	243,000	243,000								

б)

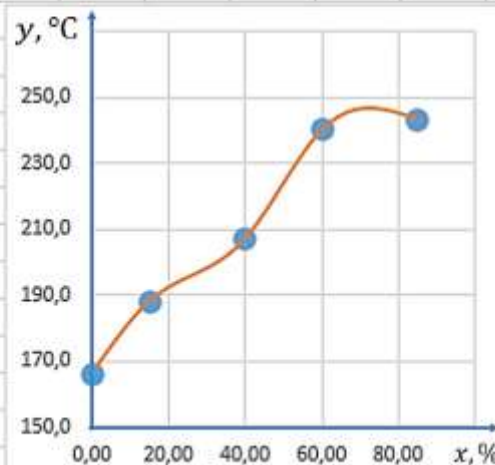


Рис. 6.1. Апроксимація експериментальних даних кубічним сплайном:
а) розрахунок коефіцієнтів сплайну методом прогонки, б) порівняння інтерполюючого сплайну із вихідними експериментальними точками

Остаточно, шуканий сплайн третього ступеня матиме вигляд:

$$P_3(x) = \begin{cases} 166 + 1,687(x - 0) + 0(x - 0)^2 - 0,001(x - 0)^3 & 0 \leq x \leq 15 \\ 188 - 1,027(x - 15) - 0,044(x - 15)^2 + 0,001(x - 15)^3 & 15 \leq x \leq 40 \\ 207 - 1,327(x - 40) + 0,006(x - 40)^2 - 0,002(x - 40)^3 & 40 \leq x \leq 60 \\ 240 + 1,177(x - 60) - 0,063(x - 60)^2 + 0,001(x - 60)^3 & 60 \leq x \leq 85 \end{cases}$$

Як вже було зазначено вище, отриманий шляхом сплайн-інтерполяції кусково-неперевний поліном використовують шляхом підстановки значення аргументу окремо для кожного із відрізків $[0, 15]$, $[15, 40]$, $[40, 60]$, $[60, 85]$ інтервалу $[0, 85]$. Наприклад (див. рис. 6.1, б):

$$\begin{aligned} P_3(7,5) \\ x \in [0, 15] &= 166 + 1,687(7,5 - 0) + 0(7,5 - 0)^2 - \\ &- 0,001(7,5 - 0)^3 = 178,237, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_3(53,33) \\ x \in [40, 60] &= 207 - 1,327(53,33 - 40) + 0,006(53,33 - 40)^2 - \\ &- 0,002(53,33 - 40)^3 = 229,921 \text{ і т.п.} \end{aligned}$$

Розрахунок у внутрішніх вузлах:

$$\begin{aligned} P_3(60,0) \\ x \in [40, 60] &= 207 - 1,327(60 - 40) + 0,006(60 - 40)^2 - \\ x \in [60, 85] &- 0,002(60 - 40)^3 = 240 + 1,177(60 - 60) - \\ &- 0,063(60 - 60)^2 + 0,001(60 - 60)^3 = 240 \text{ і т.п.} \end{aligned}$$

Якість наближення експериментальних даних побудованим сплайном оцінимо графічно (рис. 6.1, б).

Зауваження. Контроль якості сплайн-інтерполювання, крім оцінювання близькості побудованого сплайну до вихідних вузлів інтерполювання, часто передбачає також контроль *граничних умов*: для *внутрішніх вузлів* інтерполювання мають збігатись значення сусідніх сплайнів $S_i(x_j) = S_{i+1}(x_j)$, а також відповідні значення першої і другої похідних $S'_i(x_j) = S'_{i+1}(x_j)$, $S''_i(x_j) = S''_{i+1}(x_j)$, $i = 1, 2, \dots, (n - 2)$, $j = 1, 2, \dots, n$:

$$S'_j = b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2, j = 1, 2, \dots, n;$$

$$S''_j = 2c_j + 6d_j(x - x_j), j = 1, 2, \dots, n.$$

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 6

1. Пояснити термін «сплайн». Сформулювати переваги сплайн-інтерполяції порівняно з традиційною інтерполяцією (за формулами Лагранжа, Ньютона тощо).
2. Пояснити, чому наближення функції сплайнами називають «інтерполяцією».
3. Сформулювати математичну постановку завдання наближення функції сплайнами. Що таке кубічна сплайн-функція?
4. Навести і пояснити принципи визначення коефіцієнтів кубічного сплайну.
5. Навести і пояснити алгоритм обчислення коефіцієнтів кубічного сплайну методом Томаса (прогонки).
6. Температурна залежність тиску (P) та питомого об'єму (v) насиченої водяної пари наведені в таблиці¹:

$t, ^\circ\text{C}$	0,01	3,0	6,0	9,0	12,0	15,0	18,0
$P, \text{кПа}$	0,6113	0,7577	0,9349	1,1477	1,4022	1,7051	2,0640
$v, \text{м}^3/\text{кг}$	206,136	168,132	137,734	113,386	93,784	77,926	65,038

- Знайти з використанням кубічного сплайну значення тиску (P) та питомого об'єму (v) при $t = 2 ^\circ\text{C}$, $7 ^\circ\text{C}$, $16 ^\circ\text{C}$.
7. Ставиться задача визначення кількості теплоти, потрібної для доведення до кипіння ємності з водою, яка знаходиться за певної заданої температури t . Для цієї мети потрібно обчислити питому теплоємність (C_p) води за вказаної температури t . Значення питомої теплоємності води як функція часу наведено в таблиці:

¹ CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. Ed. by Lide D. R. 2015. CRC Press. 2666 p

$t, ^\circ\text{C}$	22	42	52	82	100
$C_p, \text{Дж}/(\text{кг} \cdot ^\circ\text{C})$	4181	4179	4186	4199	4217

Знайти з використанням кубічного сплайну значення питомої теплоємності (C_p) при $t = 30 ^\circ\text{C}$, $61 ^\circ\text{C}$, $80 ^\circ\text{C}$.

8. У нижченаведеній таблиці представлено температурну залежність виходу хімічної реакції (Y):

$t, ^\circ\text{C}$	165	180	195	225	250	280	300
$Y, \%$	77,1	81,4	84,5	85,1	89,4	91,6	94,8

Побудувати на основі наведених даних кубічний сплайн.

9. У таблиці наведено експериментальні дані щодо середньої молярної теплоємності (c_p) азоту при зміні температури від 298 К до заданого значення (T) за атмосферного тиску.

T, K	373,0	473,0	573,0	673,0	773,0	873,0	973,0
$c_p, \text{Дж}/(\text{моль} \cdot \text{K})$	29,19	29,29	29,46	29,68	29,97	30,27	30,56

Побудувати на основі наведених даних кубічний сплайн.

10. Досліджувався насос сушарки в складі хіміко-технологічної системи. Робоча характеристика насоса – значення витрати (F) в залежності від потужності (P), – представлено у таблиці¹:

$P, \text{Вт}$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
$F, \text{см}^3/\text{хв}$	0	493	800	1144	1441	2049	2119	2392	3226	3472	3546

Побудувати на основі наведених даних кубічний сплайн.

11. Досліджується хімічний реактор, рідке середовище якого поділено горизонтальною областю сильного температурного градієнта (температурного стрибка, «термоклин») на дві температурні зони.

Значення температури (t) за висотою реактора (h) наведено в таблиці:

¹ Chetan R. Sohaliya and Harish D. Doctor. The Use of Piecewise Polynomial Interpolation in Chemical Engineering. J. Int. Acad. Phys. Sci. 2015. 19(4): 321-8.

$h, \text{ м}$	0,0	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0
$t, ^\circ\text{C}$	72	69	59	21	13	11	10

Границя температурних зон може бути визначена як точка перегину залежності «температура-висота». З курсу математичного аналізу відомо, що точка перегину кривої (стаціонарна точка) відповідає умові $d^2t/dh^2 = 0$.

а) побудувати кубічний сплайн за наданими даними;

б) із умови $d^2t/dh^2 = 0$ визначити координату границі температурних зон реактора.

7 НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ

7.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 7

Важливою задачею про наближення функцій є апроксимація функцій. У загальному розумінні *апроксимація* це науковий метод, що передбачає заміну певних об'єктів іншими, які близькі до вихідних, але є більш простими. Таким чином при розв'язанні задачі апроксимації таблична функція, де представлені результати експериментальних досліджень (або інша громіздка функція), замінюється досить простою аналітичною функцією, що має мінімальні відхилення від вихідної функції [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]. Формули, які отримані в результаті розв'язання такого роду завдань з обробки експериментальних даних, називаються *емпіричними*.

Розглянуті вище інтерполяційні формули зазвичай застосовуються лише у випадках, коли кількість вузлів інтерполяції невелика і отримані табличні дані є досить точними і похибки при їх отриманні можна не враховувати. Якщо вихідні дані були отримані з високою точністю, то можна вихідну функцію замінити наближеною функцією, яка проходить через всі вузлові точки. На практиці експериментально отримані дані завжди мають похибку і іноді досить значну. Тому інтерполювання даних, що отримані з великими похибками, стає недоцільним. Крім того, при великій кількості вузлів інтерполяції інтерполяційні формули стають громіздкими, що значно ускладнює операції з такими формулами [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23].

Тоді можна вихідну функцію замінити наближеною функцією, графік якої проходить таким чином, щоб її відхилення від усіх заданих точок було мінімальним. Але при цьому графік функції не обов'язково проходитиме через всі точки (рис. 7.1).

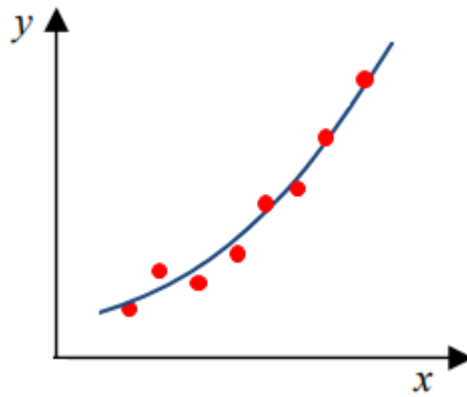


Рис. 7.1. Приклад проходження графіку апроксимаційної функції відносно вузлових точок

Така апроксимація зменшує похибку початкових даних і усереднює їх вплив на результат апроксимації [1, 11, 18].

7.2 ТОЧКОВЕ КВАДРАТИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Якщо наближення будується на заданій дискретній множині заданих точок, то апроксимацію називають точковою [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23].

Припустимо, що функція $y = f(x)$ задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

Потрібно знайти апроксимуючу функцію $\hat{y} = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$, котра в точках x_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$ приймає значення, $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_n$, які би були дуже близькими до значень $y_1, y_2, \dots, y_n$ (рис. 7.2), де $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ – коефіцієнти, які потрібно визначити. При цьому, $m \leq n$.

Відповідно до методу найменших квадратів, за міру відхилення апроксимуючої функції $\hat{y}_1$ від даної функції $y = f(x)$ на множині точок приймають величину S , яка повинна прийняти мінімальне значення [1, 11, 17]:

$$S = \sum_{i=1}^n [\hat{y}_i - f(x_i)]^2 = \min \text{ або } S = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 = \min. \quad (7.1)$$

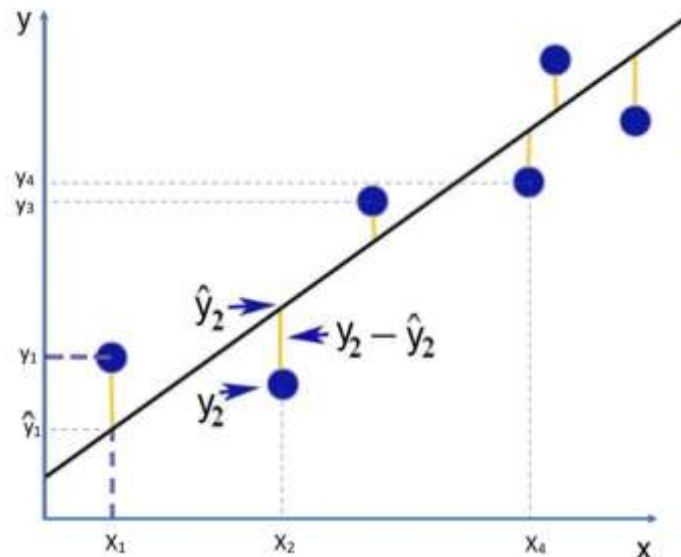


Рис. 7.2. Розташування значень апроксимуючої функції відносно вузлових точок

Сутність *методу найменших квадратів* (МНК) полягає у знаходженні таких значень коефіцієнтів апроксимуючої функції $\hat{y} = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$, при яких би сума квадратів відхилень між функціями була мінімальною.

У багатьох випадках в якості апроксимуючої функції обирають поліном виду [1, 11, 18]:

$$Q(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_mx^m.$$

Тоді формула (7.1) набуває вигляду:

$$S = \sum_{i=1}^n [Q(x_i) - f(x_i)]^2 = \min. \quad (7.2)$$

Пошук апроксимуючої функції, яка найкращим чином описує задану функцію, при розв'язанні задачі апроксимації можна поділити на два етапи [1, 3-5, 11, 16-19, 21-23]:

- 1) визначення виду апроксимуючої функції;
- 2) визначення значень коефіцієнтів обраної апроксимуючої функції.

7.2.1 Вибір виду апроксимуючої функції

Вибір виду апроксимуючої функції, тобто залежності, якою можна описати реальні дані – це окреме завдання, яке часто вирішується методом проб і послідовних наближень. Для визначення виду апроксимуючої функції

необхідно експериментальні точки нанести на графік і провести наближену плавну криву таким чином, щоб вузлові точки були рівномірно розташовані навколо неї, як показано на рис. 7.3. В окремих випадках наближена крива може проходити через деякі експериментальні точки.

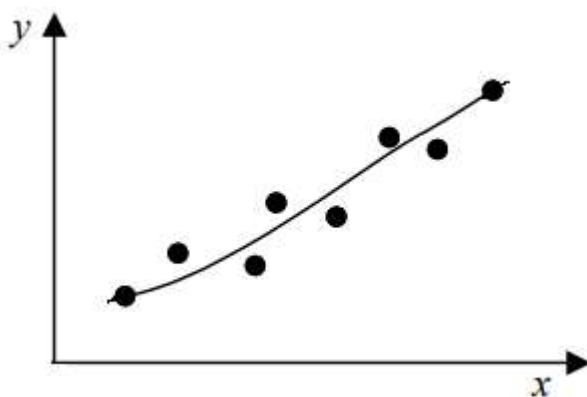


Рис. 7.3. Графічний вибір апроксимуючої функції

Коли встановлено графічний вигляд шуканої функціональної залежності, завдання полягає у виборі її аналітичного опису, тобто у підборі виду апроксимуючої функції [1, 11, 17-19]. Перевага віддається простим формулам, що мають достатню точність.

Далі побудована крива зіставляються з сімейством графіків ряду типових функцій, які зазвичай використовуються для цілей апроксимації (лінійною, логарифмічною, показниковою, ступеневою, гіперболічною, квадратичною тощо).

Визначення виду апроксимуючої функції за графіком, побудованим за експериментальними даними, не завжди є очевидним і тому іноді доводиться перевіряти декілька варіантів обраної апроксимуючої функції, а потім за певними критеріями вибирати кращу [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

У ряді випадків апроксимуюча функція заздалегідь відома, і тоді потрібно знайти лише її коефіцієнти [1, 11, 18].

Наприклад, експериментальні дані отримані для визначення залежності швидкості реакції, що каталізується ферментом, від концентрації субстрату, яка описується рівняння Міхаеліса – Ментен такого виду:

$$v = \frac{V_m \cdot S}{S + K_m},$$

де V_m – максимальна швидкість реакції; K_m – константа Міхаеліса; S – концентрація субстрату.

Інший приклад – експериментальні дані, що отримані для визначення енергії активації за рівнянням Арреніуса, яке описує вплив температури T на константу швидкості хімічної реакції k швидкості реакції і має вигляд:

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}},$$

де A – передекспоненційний множник, що не залежить від температури; E_a – енергія активації; R – універсальна газова стала.

Існує також аналітичний метод вибору апроксимуючої функції, що базується на використанні деяких аналітичних критеріїв для вибору загального виду апроксимуючої функції. Метод оперує з обмеженою кількістю функцій і наведений в [додатку В](#).

7.2.2 Визначення коефіцієнтів апроксимуючої функції

Нехай вид апроксимуючої функції визначений – $\hat{y} = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$. Підставимо обрану функцію в формулу МНК (7.1).

$$S = \sum_{i=1}^n (\phi(x_i, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m) - y_i)^2 = \min.$$

Згідно МНК, найкраще наближення апроксимуючої функції φ до заданої табличної буде досягнуто при мінімальному значенні S . Тоді задача визначення значень коефіцієнтів: $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$, що забезпечують мінімальне значення S може бути розв'язана з використанням методу математичного аналізу – дослідження функції на екстремум. Як відомо, необхідною умовою екстремуму функції декількох змінних є рівність нулю всіх часткових похідних по всім невідомим в точці екстремуму. Тому необхідно знайти часткові похідні по невідомим параметрам $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$,

а потім прирівняти до нуля. Отримані рівняння представляють собою систему лінійних алгебраїчних рівнянь, де в якості невідомих виступають коефіцієнти апроксимуючої функції [1, 11, 18]:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0. \end{cases} \quad (7.3)$$

Коефіцієнти апроксимуючої функції знаходяться шляхом розв’язання системи (7.3) будь-яким з відомих методів розв’язку систем. Отримані числові значення коефіцієнтів підставляємо в обрану апроксимуючу функцію $\hat{y} = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв’язком задачі апроксимації.

Точність апроксимуючої функції можна оцінити за значенням середнього квадратичного відхилення, яке визначають за формулою [1, 11, 17]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 1}}, \quad (7.4)$$

де n – кількість табличних значень.

Якщо точність наближення виявилась недостатньою (середнє квадратичне відхилення має велике значення), то потрібно буде повернутися до вибору апроксимуючої залежності і після вибору заново повторити всі обчислення.

7.3 ЛІНІЙНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

В якості апроксимуючої залежності обрано апроксимуючий поліном

першого ступеня $Q_1(x) = a_0 + a_1 \cdot x$. Потрібно знайти коефіцієнти полінома a_0 і a_1 .

Підставимо в рівняння (7.2) обраний апроксимуючий поліном:

$$S = \sum_{i=1}^n [a_0 + a_1 \cdot x_i - y_i]^2. \quad (7.5)$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів (a_0 і a_1) знайдемо часткові похідні за цими параметрами і прирівняємо знайдені похідні нулю.

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0 \text{ та } \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0.$$

В результаті отримаємо систему виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i - y_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i - y_i) \cdot x_i = 0. \end{cases}$$

Виконавши найпростіші перетворення, отримаємо систему для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності.

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i. \end{cases} \quad (7.6)$$

Розв'язавши систему відомими методами (наприклад, за методом Крамера), знайдемо невідомі коефіцієнти a_0 , a_1 .

Позначимо: $Sx = \sum_{i=1}^n x_i$, $Sy = \sum_{i=1}^n y_i$, $S2x = \sum_{i=1}^n x_i^2$, $Sxy = \sum_{i=1}^n x_i y_i$.

Знайдемо:

$$\Delta = \begin{vmatrix} n & Sx \\ Sx & S2x \end{vmatrix} = n \cdot S2x - Sx \cdot Sx,$$

$$\Delta_{a0} = \begin{vmatrix} S_y & S_x \\ S_{xy} & S_{2x} \end{vmatrix} = S_y \cdot S_{2x} - S_{xy} \cdot S_x,$$

$$\Delta_{a1} = \begin{vmatrix} n & S_y \\ S_x & S_{xy} \end{vmatrix} = n \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y.$$

Тоді:

$$a_0 = \frac{S_y \cdot S_{2x} - S_{xy} \cdot S_x}{n \cdot S_{2x} - S_x \cdot S_x},$$

$$a_1 = \frac{n \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y}{n \cdot S_{2x} - S_x \cdot S_x}.$$

Після підстановки знайдених коефіцієнтів в апроксимуючу функцію (поліном першого порядку) отримаємо апроксимуючу залежність для заданих табличних даних.

Приклад 7.1. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

x	2	6,2	10,7	14,9	20,5
y	0,95	2,9	5,1	6,8	9,6

Потрібно знайти апроксимуючу функцію, що описує задану табличну функцію. Кількість пар значень $n=5$.

Розв'язок: для вибору виду апроксимуючої функції скористаємось графічним методом для чого побудуємо графік заданої табличної функції (рис. 7.4).

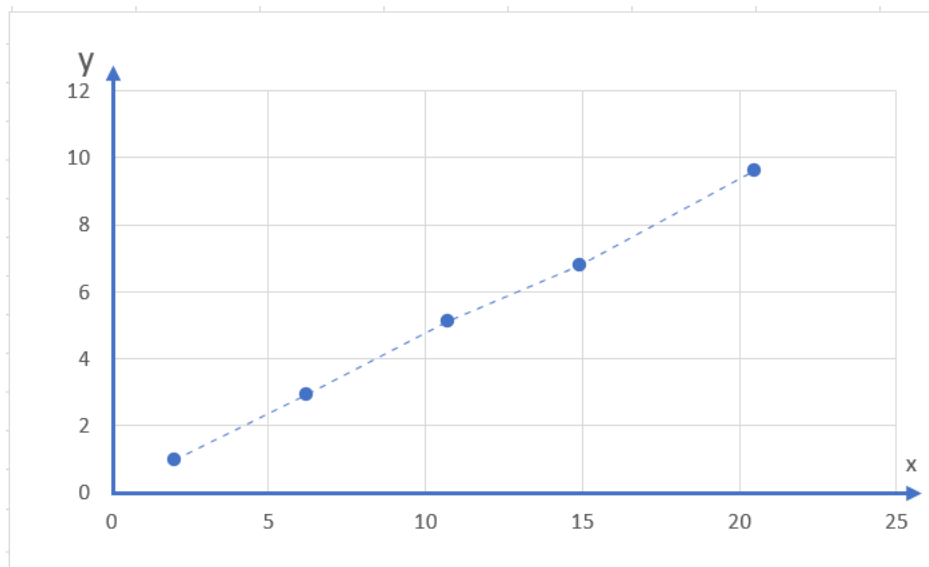


Рис. 7.4. Графічний вибір апроксимуючої функції

Як можна побачити, побудований графік є практично прямою лінією. Тому в якості апроксимуючої залежності обираємо апроксимуючий поліном першого ступеня $Q_1(x) = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для визначення коефіцієнтів полінома a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), що отримана для визначення коефіцієнтів лінійних апроксимуючих залежностей.

Обчислення коефіцієнтів системи, що стоять перед невідомими a_0 , a_1 представимо у вигляді таблиці 7.1.

Таблиця 7.1. Визначення коефіцієнтів системи нормальних рівнянь

i	x	y	x^2	$x \cdot y$
1	2	0,95	4	1,9
2	6,2	2,9	38,44	17,98
3	10,7	5,1	114,49	54,57
4	14,9	6,8	222,01	101,32
5	20,5	9,6	420,25	196,8
Σ	54,30	25,35	799,19	372,59

За отриманими в таблиці 7.1 даними складемо систему нормальних рівнянь:

$$\begin{cases} 5a_0 + 54,30a_1 = 25,35 \\ 54,30a_0 + 799,19a_1 = 372,59. \end{cases}$$

Знайдемо a_0 й a_1 за формулами Крамера.

$$\Delta = \begin{vmatrix} 5 & 54,3 \\ 54,3 & 799,19 \end{vmatrix} = 1\,047,46, \Delta a_0 = \begin{vmatrix} 25,35 & 54,3 \\ 372,57 & 799,19 \end{vmatrix} = 28,92;$$

$$\Delta a_1 = \begin{vmatrix} 5 & 25,35 \\ 54,3 & 372,57 \end{vmatrix} = 486,34;$$

$$a_0 = \frac{\Delta a_0}{\Delta} = \frac{28,92}{1\,047,46} = 0,0276, a_1 = \frac{\Delta a_1}{\Delta} = \frac{486,34}{1\,047,46} = 0,4643.$$

Отже, шуканий поліном має вигляд:

$$\hat{y} = 0,0276 + 0,4643x.$$

Порівнюємо вихідні значення для y з відповідними значеннями $\hat{y}$, що розраховані за отриманою апроксимуючою функцією і представимо у вигляді таблиці 7.2.

Таблиця 7.2. Порівняння експериментальних і розрахованих даних

i	x	y	$\hat{y}$	$\hat{y} - y$	$(\hat{y} - y)^2$
1	2	0,95	0,9562	-0,0062	3,844E-05
2	6,2	2,9	2,9063	-0,0063	3,919E-05
3	10,7	5,1	4,9956	0,1044	0,0108973
4	14,9	6,8	6,9457	-0,1457	0,0212197
5	20,5	9,6	9,5458	0,0542	0,0029431
					$\Sigma = 0,03514$

Розрахуємо середнє квадратичне відхилення за формулою (7.4):

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 1}} = \sqrt{\frac{0,03514}{5 - 1}} = 0,09.$$

Побудуємо суміщений графік двох функцій: табличної функції $y = f(x)$ та апроксимуючої функції $\hat{y} = \hat{f}(x)$.

Як видно з рис. 7.5, графіки функцій практично збігаються, що свідчить про досить точну апроксимацію вихідних даних поліномом першого ступеня. Значення середнього квадратичного відхилення σ і значення y та $\hat{y}$ (таблиця 7.2) вказують на прийнятні результати лінійної апроксимації і на те, що отримана залежність достатньо точно описує експериментальні дані.

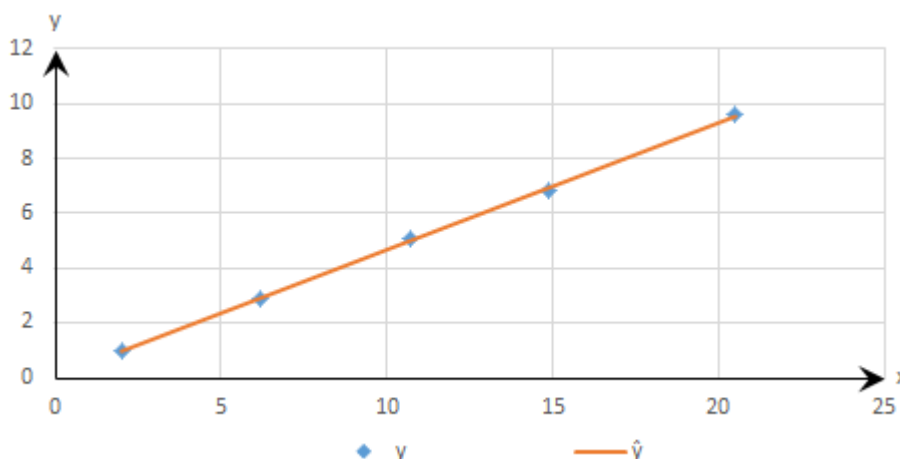


Рис. 7.5. Суміщений графік табличної функції $y = f(x)$ (показаний маркерами (♦ y)) та графік апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$ (показаний суцільною кривою — $\hat{y}$)

Примітка. Розрахунки для лінійної апроксимації дуже зручно запрограмувати. Рекомендації з програмної реалізації розрахунків для лінійної апроксимації наведені в розділі 15.

У багатьох практичних випадках апроксимація експериментальних даних лінійними рівняннями дає цілком задовільні результати і може використовуватися для аналізу та прогнозування [1, 3-5, 11, 16-19, 27-29, 45].

Однак через різноманітність і складність хіміко-технологічних процесів обмежитися розглядом лише лінійних моделей неможливо. Багато хімічних залежностей не є лінійними за своєю суттю, і тому їх апроксимація лінійними рівняннями, безумовно, не може дати позитивного результату.

7.4 КВАДРАТИЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

В якості апроксимуючої залежності обрано апроксимуючий поліном другого ступеня $Q_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$. Потрібно знайти коефіцієнти полінома a_0 , a_1 і a_2 .

Підставимо в рівняння (7.2) обраний апроксимуючий поліном:

$$S = \sum_{i=1}^n [a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 - y_i]^2. \quad (7.7)$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів (a_0 , a_1 і a_2) знайдемо часткові похідні за цими параметрами і прирівняємо знайдені похідні нулю.

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0 \text{ та } \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0.$$

В результаті отримаємо систему виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 - y_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 - y_i) \cdot x_i = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_2} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 - y_i) \cdot x_i^2 = 0. \end{cases}$$

Виконавши найпростіші перетворення отримаємо систему для визначення невідомих коефіцієнтів квадратичної апроксимуючої залежності.

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n x_i^2 \cdot y_i. \end{cases} \quad (7.8)$$

Розв'язавши систему відомими методами (наприклад, за методом Крамера), знайдемо невідомі коефіцієнти a_0 , a_1 , a_2 .

Позначимо:

$$Sx = \sum_{i=1}^n x_i, S2x = \sum_{i=1}^n x_i^2, S3x = \sum_{i=1}^n x_i^3, S4x = \sum_{i=1}^n x_i^4,$$

$$Sy = \sum_{i=1}^n y_i, Sxy = \sum_{i=1}^n x_i y_i, S2xy = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i.$$

Знайдемо:

$$\Delta = \begin{vmatrix} n & S_x & S_{2x} \\ S_x & S_{2x} & S_{3x} \\ S_{2x} & S_{3x} & S_{4x} \end{vmatrix}.$$

$$\Delta = n \cdot S_{2x} \cdot S_{4x} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_{2x} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_{2x} - \\ - S_{2x} \cdot S_{2x} \cdot S_{2x} - S_x \cdot S_x \cdot S_{4x} - n \cdot S_{3x} \cdot S_{3x}.$$

$$\Delta_{a0} = \begin{vmatrix} S_y & S_x & S_{2x} \\ S_{xy} & S_{2x} & S_{3x} \\ S_{2xy} & S_{3x} & S_{4x} \end{vmatrix}.$$

$$\Delta_{a0} = S_y \cdot S_{2x} \cdot S_{4x} + S_{xy} \cdot S_{3x} \cdot S_{2x} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_{2xy} - \\ - S_{2x} \cdot S_{2x} \cdot S_{2xy} - S_x \cdot S_{xy} \cdot S_{4x} - S_{3x} \cdot S_{3x} \cdot S_y.$$

$$\Delta_{a1} = \begin{vmatrix} n & S_y & S_{2x} \\ S_x & S_{xy} & S_{3x} \\ S_{2x} & S_{2xy} & S_{4x} \end{vmatrix}.$$

$$\Delta_{a1} = n \cdot S_{xy} \cdot S_{4x} + S_x \cdot S_{2xy} \cdot S_{2x} + S_y \cdot S_{3x} \cdot S_{2x} - \\ - S_{2x} \cdot S_{xy} \cdot S_{2x} - S_x \cdot S_y \cdot S_{4x} - n \cdot S_{2xy} \cdot S_{3x}.$$

$$\Delta_{a2} = \begin{vmatrix} n & S_x & S_y \\ S_x & S_{2x} & S_{xy} \\ S_{2x} & S_{3x} & S_{2xy} \end{vmatrix}.$$

$$\Delta_{a2} = n \cdot S_{2x} \cdot S_{2xy} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_y + S_x \cdot S_{xy} \cdot S_{2x} - \\ - S_{2x} \cdot S_{2x} \cdot S_y - S_x \cdot S_x \cdot S_{2xy} - n \cdot S_x \cdot S_{xy}.$$

Тоді:

$$a_0 = \frac{\Delta_{a0}}{\Delta}, \quad a_1 = \frac{\Delta_{a1}}{\Delta}, \quad a_2 = \frac{\Delta_{a2}}{\Delta}.$$

Після підстановки знайдених коефіцієнтів в апроксимуючу функцію отримаємо апроксимуючу залежність для заданих табличних даних.

Приклад 7.2. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

x	3	3,5	4	4,5	5	5,5	6	6,5
y	88,1	116	147,7	183,8	223,3	267,5	315	367

Потрібно знайти апроксимуючу функцію, що описує задану табличну функцію. Кількість пар значень $n=8$.

Розв'язок: для вибору виду апроксимуючої функції скористаємось графічним методом для чого побудуємо графік заданої табличної функції (рис. 7.6).

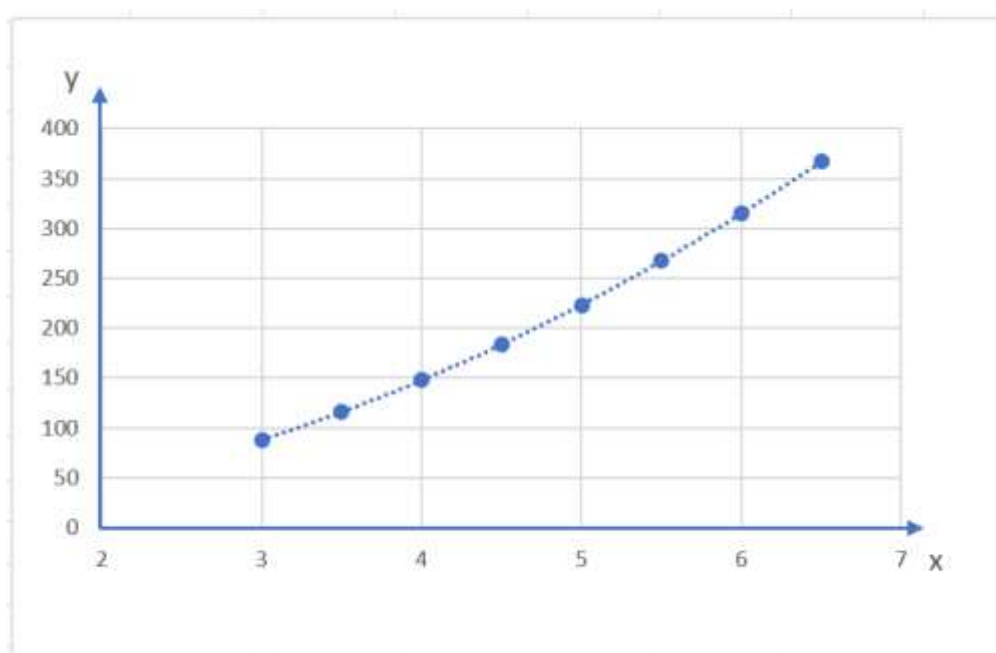


Рис. 7.6. Графічний вибір апроксимуючої функції

Як можна побачити, побудований графік схожий на гілку параболи. Тому в якості апроксимуючої залежності обираємо апроксимуючий поліном другого порядку $Q_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$.

Для визначення коефіцієнтів багаточлена a_0 , a_1 та a_2 скористаємось системою (7.8), що отримана для визначення коефіцієнтів квадратичних апроксимуючих залежностей.

Обчислення коефіцієнтів системи, що стоять перед невідомими a_0 , a_1 та a_2 і представимо у вигляді таблиці 7.3.

Таблиця 7.3. Визначення коефіцієнтів системи нормальних рівнянь

i	x	y	x^2	x^3	x^4	$x \cdot y$	$x^2 \cdot y$
1	3	88,1	9	27	81	264,3	792,9
2	3,5	116	12,25	42,875	150,0625	406	1421
3	4	147,7	16	64	256	590,8	2363,2
4	4,5	183,8	20,25	91,125	410,0625	827,1	3721,95
5	5	223,3	25	125	625	1116,5	5582,5
6	5,5	267,5	30,25	166,375	915,0625	1471,25	8091,875
7	6	315	36	216	1296	1890	11340
8	6,5	367	42,25	274,625	1785,063	2385,5	15505,75
Σ	38	1708,4	191	1007	5518,25	8951,45	48819,18

За отриманими в таблиці 7.3 даними складемо систему нормальних рівнянь:

$$\begin{cases} 8a_0 + 38a_1 + 191a_2 = 1708,4 \\ 38a_0 + 191a_1 + 1007a_2 = 8951,45 \\ 191a_0 + 1007a_1 + 5518,25a_2 = 48819,175. \end{cases}$$

Знайдемо a_0 , a_1 та a_2 за формулами Крамера:

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 1708,4 & 38 & 191 \\ 8951,45 & 191 & 1007 \\ 48819,175 & 1007 & 5518,25 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 38 & 191 \\ 38 & 191 & 1007 \\ 191 & 1007 & 5518,25 \end{vmatrix}} = \frac{4275,6}{882} = 4,8476;$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 8 & 1708,4 & 191 \\ 38 & 8951,45 & 1007 \\ 191 & 48819,175 & 5518,25 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 38 & 191 \\ 38 & 191 & 1007 \\ 191 & 1007 & 5518,25 \end{vmatrix}} = \frac{3341,94}{882} = 3,7890;$$

$$a_2 = \frac{\begin{vmatrix} 8 & 38 & 1708,4 \\ 38 & 191 & 8951,45 \\ 191 & 1007 & 48819,175 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 38 & 191 \\ 38 & 191 & 1007 \\ 191 & 1007 & 5518,25 \end{vmatrix}} = \frac{7045,08}{882} = 7,9867.$$

Отже, шуканий поліном має вигляд:

$$Q(x) = 4,8476 + 3,7890 \cdot x + 7,9867 \cdot x^2.$$

Порівняємо вихідні значення для y з відповідними значеннями $\hat{y} = Q(x)$, що розраховані за отриманою апроксимуючою функцією і представимо у вигляді таблиці 7.4.

Таблиця 7.4. Порівняння експериментальних і розрахованих даних

i	x	y	$\hat{y}$	$\hat{y} - y$	$(\hat{y} - y)^2$
1	3	88,1	88,0949	-0,0051	2,601E-05
2	3,5	116	115,946175	-0,053825	0,00290
3	4	147,7	147,7908	0,0908	0,00824
4	4,5	183,8	183,628775	-0,171225	0,02932
5	5	223,3	223,4601	0,1601	0,02563
6	5,5	267,5	267,284775	-0,215225	0,04632
7	6	315	315,1028	0,1028	0,01057
8	6,5	367	366,914175	-0,085825	0,00737
					$\Sigma = 0,1304$

Розрахуємо середнє квадратичне відхилення за формулою (7.4):

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 1}} = \sqrt{\frac{0,1304}{8 - 1}} = 0,01863.$$

Побудуємо суміщений графік двох функцій: табличної функції $y = f(x)$ та апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$.

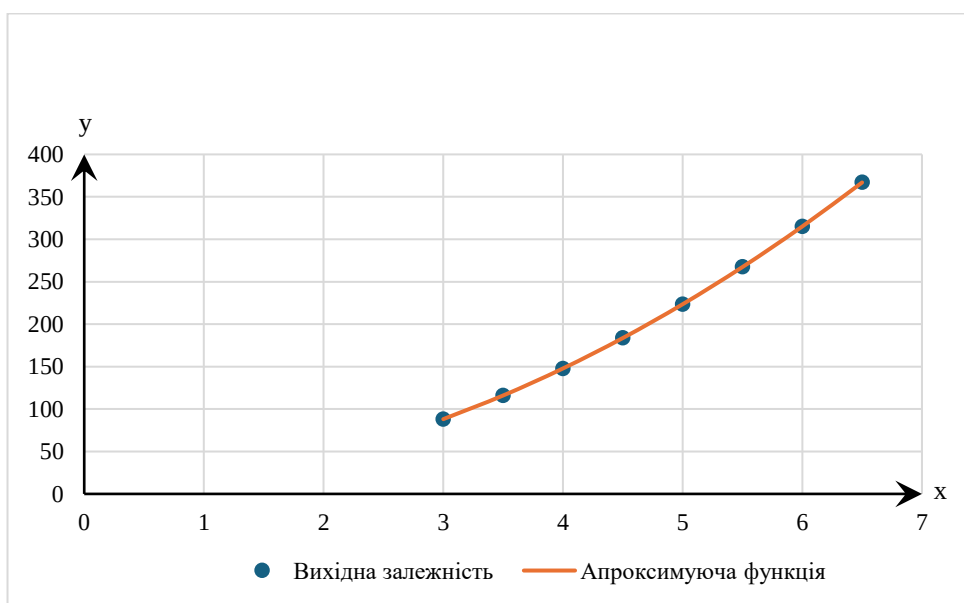


Рис. 7.7. Суміщений графік табличної функції $y = f(x)$ (показаний маркерами (● Вихідна залежність)) та графік апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$ (показаний суцільною кривою — Апроксимуюча функція)

Як видно з рис. 7.7, графіки функцій практично збігаються, що свідчить про досить точну апроксимацію вихідних даних поліномом другого порядку. Значення середнього квадратичного відхилення σ і значення y та $\hat{y}$ (таблиця 7.4) вказують на прийнятні результати квадратичної апроксимації і на те, що отримана залежність достатньо точно описує експериментальні дані.

Примітка. Розрахунки для лінійної апроксимації дуже зручно запрограмувати [6-8, 14, 15, 31, 40-43, 38-40, 47]. Рекомендації з програмної реалізації розрахунків для лінійної апроксимації наведені в розділі 15.

В практичних розрахунках нелінійний взаємозв'язок двох змінних досить часто апроксимують поліномом другого ступеня. В деяких випадках, коли точність квадратичного полінома недостатня, підвищують ступінь полінома і виконують кубічну апроксимацію.

7.5 КУБІЧНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

В якості апроксимуючої залежності обрано апроксимуючий поліном третього ступеня $Q_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x^3$. Потрібно знайти коефіцієнти полінома a_0 , a_1 , a_2 і a_3 .

Підставимо в рівняння (7.2) обраний апроксимуючий поліном:

$$S = \sum_{i=1}^n [a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + a_3 \cdot x_i^3 - y_i]^2. \quad (7.9)$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів (a_0 , a_1 , a_2 і a_3) знайдемо часткові похідні за цими параметрами і прирівняємо знайдені похідні нулю:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0 \text{ та } \frac{\partial S}{\partial a_3} = 0.$$

У результаті отримаємо систему виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + a_3 \cdot x_i^3 - y_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + a_3 \cdot x_i^3 - y_i) \cdot x_i = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_2} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + a_3 \cdot x_i^3 - y_i) \cdot x_i^2 = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_3} = 2 \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + a_3 \cdot x_i^3 - y_i) \cdot x_i^3 = 0. \end{cases}$$

Виконавши найпростіші перетворення отримаємо систему для визначення невідомих коефіцієнтів кубічної апроксимуючої залежності.

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^4 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^5 = \sum_{i=1}^n x_i^2 \cdot y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^4 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^5 + a_3 \sum_{i=1}^n x_i^6 = \sum_{i=1}^n x_i^3 \cdot y_i. \end{cases} \quad (7.10)$$

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо невідомі коефіцієнти a_0 , a_1 , a_2 і a_3 .

Після підстановки знайдених коефіцієнтів в апроксимуючу функцію отримаємо апроксимуючу залежність для заданих табличних даних.

При використанні апроксимуючих поліномів ступеня вище другого розв'язання лінійної системи рівнянь для визначення коефіцієнтів апроксимуючої залежності доцільно реалізувати методом Гауса.

Недоліком поліноміальної апроксимації є неможливість в деяких випадках досягнути потрібної точності. При цьому для підвищення точності апроксимації потрібно збільшувати кількість членів полінома, що ускладнює розрахунки, призводить до обчислювальних помилок і не завжди дає очікуваний результат [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

7.6 НЕПОЛІНОМІАЛЬНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

При дослідженні нелінійних зв'язків між експериментальними даними принципове значення має вибір форми залежності (рівняння, за допомогою якого найточніше описується наявний зв'язок).

Для відшукування параметрів нелінійних апроксимуючих функцій (емпіричних залежностей) використовують два підходи [1, 11, 16-19, 21-23]:

- 1) заснований на лінеаризації емпіричних залежностей і полягає в тому, що за допомогою спеціальних перетворень нелінійну залежність представляють у вигляді лінійного співвідношення між параметрами;
- 2) застосовується, коли виконати відповідні перетворення не вдається.

Практичні завдання, що пов'язані з відшукуванням параметрів нелінійних залежностей, де спеціальні перетворення виконати не вдається, розв'язуються аналогічно до тих прийомів, що застосовуються для знаходження параметрів поліноміального зв'язку за МНК [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

Нехай вихідна функція задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$. В якості апроксимуючої залежності обрано апроксимуюча функція виду: $\hat{y} = a \cdot x^b$ (ступенева функція). Функція нелінійна. Потрібно знайти коефіцієнти обраної апроксимуючої функції a і b .

Підставимо в рівняння (7.1) обрану апроксимуючу функцію:

$$S = \sum_{i=1}^n [a \cdot x_i^b - y_i]^2. \quad (7.11)$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів (a і b) знайдемо часткові похідні за цими параметрами і прирівняємо знайдені похідні до нуля:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \text{ та } \frac{\partial S}{\partial b} = 0.$$

В результаті отримаємо систему виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^n (a \cdot x_i^b - y_i) \cdot x_i^b = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^n (a \cdot x_i^b - y_i) \cdot x_i^b \ln x_i = 0. \end{cases}$$

Виконавши найпростіші перетворення, отримаємо систему для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності.

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^n x_i^{2b} = \sum_{i=1}^n y_i x_i^b \\ a \sum_{i=1}^n x_i^{2b} \ln x_i = \sum_{i=1}^n y_i x_i^b \ln x_i. \end{cases} \quad (7.12)$$

В результаті отримана система з двох нелінійних рівнянь із двома невідомими, розв'язок якої дозволить визначити коефіцієнти обраної апроксимуючої функції a і b . При цьому слід зауважити, що розв'язок нелінійних систем є більш складним завданням в порівнянні з розв'язанням лінійних. Більшість наявних методів розв'язку нелінійних систем є ітераційними, а найефективнішим і широко вживаним є метод Ньютона (див. розділ 4).

Розглянемо підхід, що заснований на лінеаризації емпіричних залежностей («метод вирівнювання») [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

7.6.1 Лінеаризація нелінійних залежностей

Нелінійні залежності у деяких випадках можна перетворити до лінійного вигляду шляхом виконання деяких перетворень.

Для лінеаризації нелінійних емпіричних залежностей використовують такі прийоми [1, 11, 16-19]:

- заміна змінних;
- логарифмування обох частин рівняння;
- комбінований (комбінацією попередніх).

Нехай функція $y = f(x)$ задана таблично своїми значеннями x_i та y_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

x	x_1	x_0	$\dots$	x_n
y	y_1	y_0	$\dots$	y_n

Розглянемо найбільше використовувані нелінійні залежності для опису експериментальних даних, що допускають зведення їх до лінійних.

1. Апроксимація ступеневою функцією

В якості апроксимуючої залежності обрано ступеневу функцію виду:

$$y = a \cdot x^b, \quad (7.13)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b [1, 11, 17-19].

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $u = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього прологарифмуємо залежність (7.13) і отримаємо:

$$\lg(y) = \lg(a) + b \cdot \lg(x).$$

Введемо позначення:

$$z = \lg(y), q = \lg(x), a_0 = \lg(a), a_1 = b \quad (7.14)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot q.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу і функції:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n q_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot z_i. \end{cases}$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

q	$q_1 = \lg(x_1)$	$q_2 = \lg(x_2)$	$\dots$	$q_n = \lg(x_n)$
z	$z_1 = \lg(y_1)$	$z_2 = \lg(y_2)$	$\dots$	$z_n = \lg(y_n)$

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0, a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = 10^{a_0}$ та $b = a_1$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану ступеневу функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

2. Апроксимація показниковими функціями

В якості апроксимуючої залежності обрано показникову функцію виду:

$$y = a \cdot b^x, \quad (7.15)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b [1, 11, 17-19].

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього прологарифмуємо залежність (7.15) і отримаємо:

$$\lg(y) = \lg(a) + x \cdot \lg(b).$$

Уведемо позначення:

$$z = \lg(y), a_0 = \lg(a), a_1 = \lg(b) \quad (7.16)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot x.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу і функції:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i \cdot z_i \end{cases} \quad (7.17)$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

x	x_1	x_2	$\dots$	x_n
z	$z_1 = lg(y_1)$	$z_2 = lg(y_2)$	$\dots$	$z_n = lg(y_n)$

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0, a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = 10^{a_0}$ та $b = 10^{a_1}$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану показникову функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

У багатьох випадках використовується різновид показникової функції – експоненційна функція виду [1, 11, 17-19]:

$$y = a \cdot e^{bx}. \quad (7.18)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b .

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього прологарифмуємо залежність (7.18) і отримаємо:

$$lg(y) = lg(a) + b \cdot x \cdot lg(e).$$

Введемо позначення:

$$z = lg(y), a_0 = lg(a), a_1 = blg(e) \quad (7.19)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot x.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.17), а для роботи з цією системою вихідну табличну функцію замінимо такою

x	x_1	x_2	$\dots$	x_n
z	$z_1 = \lg(y_1)$	$z_2 = \lg(y_2)$	$\dots$	$z_n = \lg(y_n)$

Розв'язавши систему знайдемо коефіцієнти a_0, a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = 10^{a_0}$ та $b = \frac{a_1}{\lg e}$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану експоненційну функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

3. Апроксимація дробово-раціональними функціями

В якості апроксимуючої залежності обрано дробово-раціональну функцію виду [1, 11, 17-19]:

$$y = \frac{1}{a \cdot x + b}, \quad (7.20)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b .

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього знайдемо зворотну залежність функції (7.20) і отримаємо:

$$\frac{1}{y} = a \cdot x + b.$$

Уведемо позначення:

$$z = \frac{1}{y}, a_0 = b, a_1 = a \quad (7.21)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot x.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу і функції:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i \cdot z_i. \end{cases}$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

x	x_1	x_2	$\dots$	x_n
z	$z_1 = 1/y_1$	$z_2 = 1/y_2$	$\dots$	$z_n = 1/y_n$

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0 , a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = a_1$ та $b = a_0$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану дробово-раціональну функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

У ряді випадків використовується дробово-раціональна функцію виду:

$$y = \frac{x}{a \cdot x + b}, \quad (7.22)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b .

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього знайдемо обернену залежність функції (7.22) і отримаємо:

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}.$$

Введемо позначення:

$$z = \frac{1}{y}, q = \frac{1}{x}, a_0 = a, a_1 = b \quad (7.23)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot q.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу і функції:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n q_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot z_i. \end{cases}$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

q	$q_1 = 1/x_1$	$q_2 = 1/x_2$	...	$q_n = 1/x_n$
z	$z_1 = 1/y_1$	$z_2 = 1/y_2$	...	$z_n = 1/y_n$

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0 , a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = a_0$ та $b = a_1$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану дробово-раціональну функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

4. Апроксимація логарифмічною функцією

В якості апроксимуючої залежності обрано логарифмічну функцію виду:

$$y = a \cdot \ln(x) + b, \quad (7.24)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b [1, 11, 17-19].

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $u = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього введемо такі позначення:

$$q = \ln(x), a_0 = b, a_1 = a \quad (7.25)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$y = a_0 + a_1 \cdot q$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n q_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot y_i. \end{cases}$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

q	$q_1 = \ln(x_1)$	$q_2 = \ln(x_2)$	$\dots$	$q_n = \ln(x_n)$
y	y_1	y_2	$\dots$	y_n

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0, a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = a_1$ та $b = a_0$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану логарифмічну функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

5. Апроксимація гіперболічною функцією

В якості апроксимуючої залежності обрано гіперболічну функцію виду:

$$y = a + \frac{b}{x}, \quad (7.26)$$

яка визначається коефіцієнтами a і b [1, 11, 17-19].

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього введемо такі позначення:

$$q = \frac{1}{y}, a_0 = a, a_1 = b \quad (7.27)$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$y = a_0 + a_1 \cdot q.$$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою (7.6), з відповідною заміною аргументу і функції:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n q_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot y_i. \end{cases}$$

Для роботи з цією системою потрібно вихідну табличну функцію замінити такою:

q	$q_1 = 1/x_1$	$q_2 = 1/x_2$	$\dots$	$q_n = 1/x_n$
y	y_1	y_2	$\dots$	y_n

Розв'язавши систему відомими методами, знайдемо коефіцієнти a_0, a_1 .

Після визначення коефіцієнтів повернемося до прийнятих раніше позначень: $a = a_0$ та $b = a_1$.

Отримані числові значення коефіцієнтів a і b підставляємо в обрану гіперболічної функцію, яка зі знайденими коефіцієнтами і буде розв'язком задачі апроксимації.

Приклад 7.3. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

x	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5
y	4,2	6	8,2	10,7	13,7	17	20,7	24,7

Потрібно знайти апроксимуючу функцію, що описує задану табличну функцію. Кількість пар значень $n=8$.

Розв'язок: вибір виду апроксимуючої функції здійснено аналітичним методом (див. [додаток В](#), приклад В.1). За цим методом обрана дробово-раціональна функція (емпірична формула) виду (7.22):

$$y = \frac{x}{a \cdot x + b},$$

яка визначається коефіцієнтами a і b .

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $y = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього знайдемо обернену залежність функції і отримаємо:

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}.$$

Введемо позначення згідно з (7.23):

$$z = \frac{1}{y}, q = \frac{1}{x}, a_0 = a, a_1 = b$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку: $z = a_0 + a_1 \cdot q$.

Вихідну табличну функцію замінюємо на таку:

q	$q_1 = 1/x_1$	$q_2 = 1/x_2$	...	$q_n = 1/x_n$
z	$z_1 = 1/y_1$	$z_2 = 1/y_2$	...	$z_n = 1/y_n$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n q_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot z_i. \end{cases}$$

Обчислення коефіцієнтів системи, що стоять перед невідомими a_0 , a_1 представимо у вигляді таблиці 7.5.

Таблиця 7.5. Визначення коефіцієнтів системи нормальних рівнянь

i	x	y	q	z	q^2	$q \cdot z$
1	0,75	4,2	1,3333	0,2381	1,7778	0,3175
2	1	6	1	0,1667	1	0,1667
3	1,25	8,2	0,8	0,122	0,64	0,0976
4	1,5	10,7	0,6667	0,0935	0,4444	0,0623
5	1,75	13,7	0,5714	0,073	0,3265	0,0417
6	2	17	0,5	0,0588	0,25	0,0294
7	2,25	20,7	0,4444	0,0483	0,1975	0,0215
8	2,5	24,7	0,4	0,0405	0,16	0,0162
Σ	13	105,2	5,7159	0,8408	4,7963	0,7528

За отриманими в таблиці 7.5 даними складемо систему нормальних рівнянь:

$$\begin{cases} 8a_0 + 5,7159a_1 = 0,8408 \\ 5,7159a_0 + 4,7963a_1 = 0,7528. \end{cases}$$

Знайдемо a_0 і a_1 за формулами Крамера.

$$D = \begin{vmatrix} 8 & 5,7159 \\ 5,7159 & 4,7963 \end{vmatrix} = 5,6989.$$

$$D_0 = \begin{vmatrix} 0,8408 & 5,7159 \\ 0,7528 & 4,7963 \end{vmatrix} = -0,2702.$$

$$D_1 = \begin{vmatrix} 8 & 0,8408 \\ 5,7159 & 0,7528 \end{vmatrix} = 1,2165.$$

$$a_0 = \frac{D_0}{D} = -0,0474; \quad a_1 = \frac{D_1}{D} = 0,2135.$$

З урахуванням (7.23): $a = -0,0474$; $b = 0,2135$.

Отже, шукана апроксимуюча залежність має вигляд:

$$y = \frac{x}{-0,0474 \cdot x + 0,2135}$$

Порівняємо вихідні значення для y з відповідними значеннями $\hat{y}$, що розраховані за отриманою апроксимуючою функцією і представимо у вигляді таблиці 7.6.

Таблиця 7.6. Порівняння експериментальних і розрахованих даних

i	x	y	$\hat{y}$	$\hat{y} - y$	$(\hat{y} - y)^2$
1	0,75	4,2	4,2147	0,0147	0,0002
2	1	6	6,0205	0,0205	0,0004
3	1,25	8,2	8,1037	-0,096	0,0093
4	1,5	10,7	10,534	-0,166	0,0277
5	1,75	13,7	13,405	-0,295	0,0871
6	2	17	16,849	-0,151	0,0227
7	2,25	20,7	21,058	0,3576	0,1278
8	2,5	24,7	26,316	1,6158	2,6108
					$\Sigma = 2,886$

Розрахуємо середнє квадратичне відхилення за формулою (7.4):

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 1}} = \sqrt{\frac{2,886}{8 - 1}} = 0,6421.$$

Побудуємо суміщений графік двох функцій: табличної функції $y = f(x)$ та апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$.

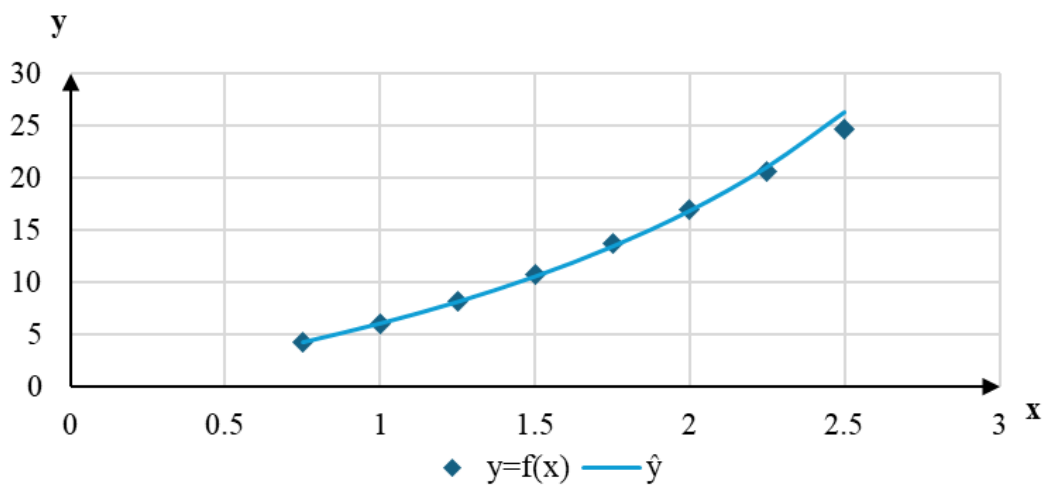


Рис. 7.8. Суміщений графік табличної функції $y = f(x)$ (показаний маркерами (♦ $y=f(x)$)) та графік апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$ (показаний суцільною кривою $\hat{y}$).

Як видно з рис. 7.8, графіки функцій практично пристають, що свідчить про досить точну апроксимацію вихідних даних дробово-раціональною функцією. Значення середнього квадратичного відхилення σ і незначні розбіжності між y та $\hat{y}$ (таблиця 7.6) вказують на прийнятні результати апроксимації і на те, що отримана залежність достатньо точно описує експериментальні дані.

Приклад 7.4. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

x	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5
y	5	12,1	23,4	40,6	64,2	96,1	136,9	187,6

Потрібно знайти апроксимуючу функцію, що описує задану табличну функцію. Кількість пар значень $n=8$.

Розв'язок: вибір виду апроксимуючої функції здійснено аналітичним методом (див. [додаток В](#), приклад В.2). За цим методом обрана ступенева функція (емпірична формула) виду (7.13):

$$y = a \cdot x^b,$$

яка визначається коефіцієнтами a і b .

Перетворимо цю функцію до лінійного вигляду $u = a_0 + a_1 \cdot x$.

Для цього прологарифмуємо функцію і отримаємо:

$$\lg(y) = \lg(a) + b \cdot \lg(x).$$

Уведемо позначення згідно з (7.14):

$$z = \lg(y), q = \lg(x), a_0 = \lg(a), a_1 = b$$

і отримаємо лінійний поліном першого порядку:

$$z = a_0 + a_1 \cdot q.$$

Вихідну табличну функцію замінюємо на таку:

q	$q_1 = \lg(x_1)$	$q_2 = \lg(x_2)$	$\dots$	$q_n = \lg(x_n)$
z	$z_1 = \lg(y_1)$	$z_2 = \lg(y_2)$	$\dots$	$z_n = \lg(y_n)$

Для визначення невідомих коефіцієнтів лінійної апроксимуючої залежності a_0 і a_1 скористаємось системою:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \sum_{i=1}^n q_i = \sum_{i=1}^n z_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n q_i + a_1 \sum_{i=1}^n z_i^2 = \sum_{i=1}^n q_i \cdot z_i \end{cases}$$

Обчислення коефіцієнтів системи, що стоять перед невідомими a_0 , a_1 представимо у вигляді таблиці 7.7.

Таблиця 7.7. Визначення коефіцієнтів системи нормальних рівнянь

i	x	y	q	z	q^2	$q \cdot z$
1	1,5	5	0,1761	0,6990	0,0310	0,1231
2	2	12,1	0,3010	1,0828	0,0906	0,3260
3	2,5	23,4	0,3979	1,3692	0,1584	0,5449
4	3	40,6	0,4771	1,6085	0,2276	0,7675
5	3,5	64,2	0,5441	1,8075	0,2960	0,9834
6	4	96,1	0,6021	1,9827	0,3625	1,1937
7	4,5	136,9	0,6532	2,1364	0,4267	1,3955
8	5	187,6	0,6990	2,2732	0,4886	1,5889
Σ	26	565,9	3,8505	12,9594	2,0814	6,9229

Побудуємо в площині ХОУ графік залежності $z = a_0 + a_1 \cdot q$ для перевірки її лінійності.

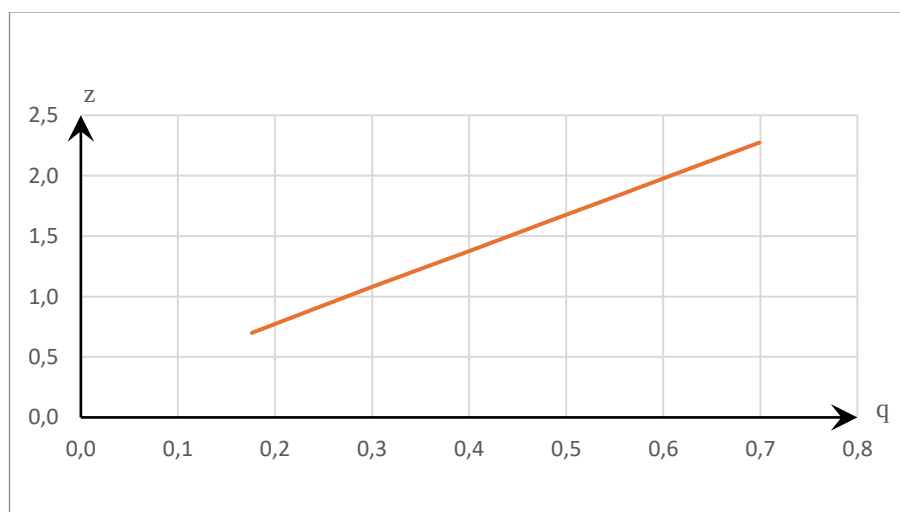


Рис. 7.9. Графік перетвореної функції $z = a_0 + a_1 \cdot q$

За отриманими в таблиці 7.7 даними складемо систему нормальних рівнянь:

$$\begin{cases} 8a_0 + 3,8505a_1 = 12,9594 \\ 3,85043a_0 + 2,0814a_1 = 6,9229. \end{cases}$$

Знайдемо a_0 і a_1 за формулами Крамера.

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 12,9594 & 3,8505 \\ 6,9229 & 2,0814 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 3,8505 \\ 3,8505 & 2,0814 \end{vmatrix}} = 0,1734.$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 8 & 12,9594 \\ 3,8505 & 6,9229 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 3,8505 \\ 3,8505 & 2,0814 \end{vmatrix}} = 3,0054.$$

З урахуванням (7.14): $a = 10^{-0,0474} = 1,49075$; $b = 3,0054$.

Отже, шукана апроксимуюча залежність має вигляд:

$$y = 1,49075 \cdot x^{3,0054}.$$

Порівняємо вихідні значення для y з відповідними значеннями $\hat{y}$, що розраховані за отриманою апроксимуючою функцією і представимо у вигляді таблиці 7.8.

Таблиця 7.8. Порівняння експериментальних і розрахованих даних

i	x	y	$\hat{y}$	$\hat{y} - y$	$(\hat{y} - y)^2$
1	1,5	5	5,0423	0,0423	0,0018
2	2	12,1	11,9707	-0,1293	0,0167
3	2,5	23,4	23,4085	0,0085	0,0001
4	3	40,6	40,4897	-0,1103	0,0122
5	3,5	64,2	64,3498	0,1498	0,0224
6	4	96,1	96,1249	0,0249	0,0006
7	4,5	136,9	136,9524	0,0524	0,0027
8	5	187,6	187,9703	0,3703	0,1371
Σ					$\Sigma = 0,1937$

Розрахуємо середнє квадратичне відхилення за формулою (7.4):

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{0,1937}{8-1}} = 0,1663.$$

Побудуємо суміщений графік двох функцій: табличної функції $y = f(x)$ та апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$.

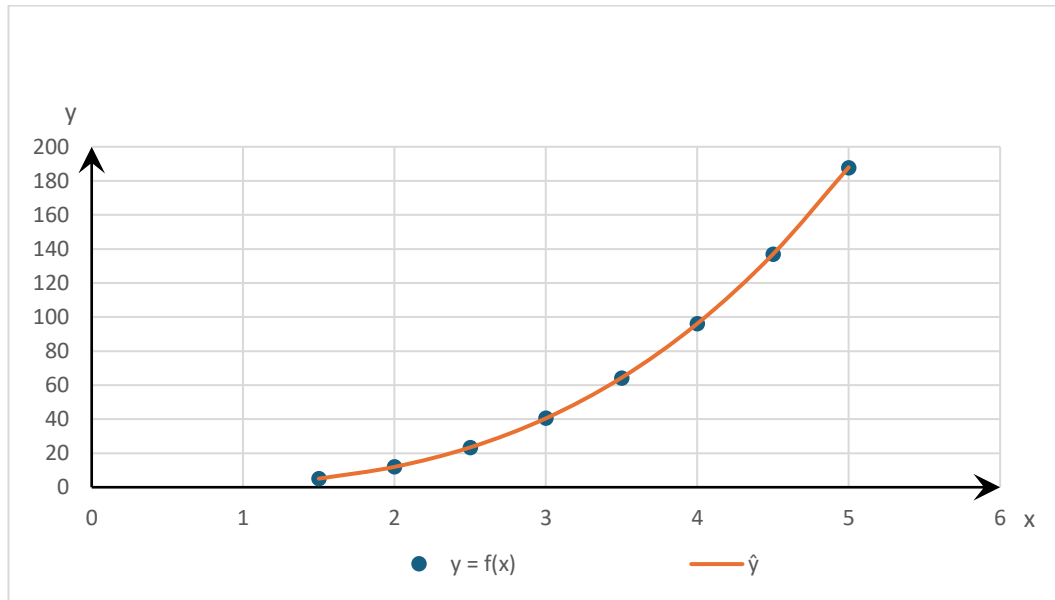


Рис. 7.10. Суміщений графік табличної функції $y = f(x)$ (показаний маркерами (● $y = f(x)$) та графік апроксимуючої функції $\hat{y} = f(x)$ (показаний суцільною кривою (— $\hat{y}$)

Як видно з рис. 7.10, графіки функцій практично пристають, що свідчить про досить точну апроксимацію вихідних даних ступеневою функцією. Значення середнього квадратичного відхилення σ і незначні розбіжності між y та $\hat{y}$ (таблиця 7.8) вказують на прийнятні результати апроксимації і на те, що отримана залежність достатньо точно описує експериментальні дані.

Зауваження. Крім розглянутих методів апроксимації функцій також існують методи апроксимації функцій з використанням ортогональних поліномів Чебишева та інші методи [1, 3-5, 11, 17-19, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 7

1. Сформулюйте задачу апроксимації функцій. Наведіть геометричну інтерпретацію задачі інтерполяції.
2. В чому полягає відмінність інтерполяції та апроксимації функцій?
3. Яке наближення називають точковою апроксимацією?
4. Чому метод найменших квадратів отримав таку назву?
5. В чому полягає графічний вибір виду апроксимуючої функції?
6. В чому полягає аналітичний вибір виду апроксимуючої функції?
7. Як отримати нормальну систему рівнянь для випадку квадратичної апроксимації?
8. Як отримати нормальну систему рівнянь для випадку лінійної апроксимації?
9. Як лінеаризувати показникові нелінійні залежності?
10. Як лінеаризувати ступеневі нелінійні залежності?
11. Як лінеаризувати дробово-раціональні нелінійні залежності?
12. Як визначити похибку апроксимації?
13. Що слід зробити, якщо похибка отриманої апроксимуючої функції завелика?
14. Як отримати нормальну систему рівнянь для апроксимуючої функції виду $y(x) = a_0 + a_1 \ln x + a_2 x^2$?
15. Проведіть лінійну апроксимацію заданої табличної функції.

x	1,1	1,4	1,7	2	2,3	2,6
y	6,84	5,84	5,21	4,74	4,42	4,16

16. Як отримати нормальну систему рівнянь для апроксимуючої функції виду $y(x) = a_0 + a_1 x^3$?
17. Проведіть квадратичну апроксимацію заданої табличної функції.

x	0,5	0,8	1,1	1,4	1,7
y	10,5	7,57	5,94	4,04	2,71

18. Чи може отримана апроксимуюча функція бути використана для

знаходження значення функції в точках інтервалу, що відрізняються від табличних (вузлових)?

19. В таблиці представлені значення експериментально отриманої функції X_i та $Y_{\text{експер}_i}$ ($i = 1, 2, \dots, 7$), а також значення функції $Y_{\text{розрах}_i}$, що визначені за апроксимаційною формулою. Визначити середнє квадратичне відхилення.

i	1	2	3	4	5	6	7
X	3,1	5,2	7,3	9,4	11,5	13,6	15,7
Y _{експер}	4,4	8,8	12,1	17,1	21,3	24,1	29,2
Y _{розрах}	4,63	8,64	12,65	16,66	20,67	24,68	28,68

20. Проведіть квадратичну апроксимацію заданої табличної функції за методом найменших квадратів і визначте значення функції при $x = 2,6$.

x	1	2	3	4	5
y	3,4	4,4	2,9	1,6	0,9

21. Методика лабораторного визначення іонів міді у водному розчині (у вигляді аміаку) спектрофотометричним методом передбачає побудову калібрувального графіку – залежності оптичної щільності (A) стандартних розчинів від концентрації (C) вказаних розчинів. Результати вимірювань серії стандартних розчинів для побудови калібрувального графіку представлено в таблиці.

C, мг/см ³	0,01	0,02	0,04	0,05	0,10	0,15	0,20
A	0,0045	0,0150	0,0315	0,0410	0,0855	0,1270	0,1670

Проведіть лінійну апроксимацію наведених даних для подальшого визначення невідомої концентрації міді в досліджуваному розчині.

22. Теоретичне (віріальне) рівняння стану реального газу має вигляд:

$$Z = \frac{P}{\rho \cdot R \cdot T} = A + B \cdot \rho + C \cdot \rho^2 + D \cdot \rho^3,$$

де $R = 0,08206 \frac{\text{дм}^3 \cdot \text{атм}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ – універсальна газова стала, $\rho, \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$ – густина газу, T, K – температура газу, $P, \text{Па}$ – тиск газу, A, B, C, D – відповідно, перший, другий, третій та четвертий віріальні коефіцієнти ($A = 1$).

З метою визначення коефіцієнтів віріального рівняння стану реального газу для азоту за температури $T = 200 K$ було проведено експериментальні дослідження, результати яких представлено в таблиці:

$P, 10^5 \text{Па}$	3,50	5,75	8,00	10,25	12,50	14,75	17,00	19,25
$\rho, \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$	0,2242	0,3837	0,5519	0,7322	0,9282	1,1431	1,3804	1,6435

Виконавши апроксимацію наведених даних за методом найменших квадратів, знайдіть віріальні коефіцієнти для заданої системи.

Вказівка. Рекомендується виконати перетворення рівняння стану до вигляду:

$$\frac{z - 1}{\rho} = B + C \cdot \rho + D \cdot \rho^2.$$

23. Експериментальні дані щодо тиску пари (p) суміші гліцерин-вода в залежності від масової частки гліцерину в(ω) суміші при $T = 293 K$ наведено у таблиці:

p	0,00	0,20	0,30	0,40	0,50	0,55	0,60
ω	1,000	0,965	0,909	0,829	0,824	0,813	0,730
p	0,65	0,70	0,75	0,80	0,85	0,90	1,00
ω	0,720	0,664	0,583	0,490	0,386	0,290	0,000

Підберіть вигляд апроксимуючої залежності, що найбільш точно наближує наведені експериментальні дані, знайдіть коефіцієнти цієї апроксимуючої залежності.

8 ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ФУНКЦІЙ

8.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 8

При розв'язанні багатьох практичних задач виникає необхідність визначення похідних від заданих функцій [1, 11, 13, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

Чисельні методи обчислення значень похідної від функції зазвичай використовуються в таких випадках [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45]:

- вихідна функція задана таблично (наприклад, отримана в результаті експериментальних досліджень);
- вихідна функція задана у вигляді складного аналітичного виразу, безпосереднє диференціювання якого утруднено;
- вихідна функція визначається складним обчислювальним алгоритмом і аналітичне визначення функції відсутнє.

Крім того, формули чисельного диференціювання широко використовуються при розробці обчислювальних методів для вирішення ряду завдань.

У курсі математичного аналізу доведено, що для достатньо близьких безперервних функцій різниця між їх похідними може бути досить значною, що вказує на обмежену точність формул чисельного диференціювання.

Тому найчастіше формули чисельного диференціювання використовують для визначення першої та другої похідних.

Формули чисельного диференціювання можна побудувати безпосередньо із визначення похідної функції, з використанням методів наближення функцій тощо.

8.2 ФОРМУЛИ ЧИСЕЛЬНОГО ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ, ЩО БАЗУЮТЬСЯ НА ПОНЯТТІ ПОХІДНОЇ

За визначенням, перша похідна є межею відношення приросту функції до приросту незалежної змінної при прагненні до нуля приросту незалежної змінної:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{dx \rightarrow 0} \frac{f(x + dx) - f(x)}{dx}.$$

При заміні приросту dx на кінцеву величину Δx отримуємо вираз:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

Позначимо значення функції в точці x_i , як f_i , а в точці $x + \Delta x$ як f_{i+1} .

У результаті формула чисельного диференціювання для визначення першої похідної матиме вигляд:

$$f'(x) = f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (8.1)$$

Для таблично заданої функції виду:

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

формула матиме вигляд.

$$y'(x) = y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (8.2)$$

При рівновіддалених вузлових точках $h = x_{i+1} - x_i = \text{const}$ можна записати:

$$y'(x) = y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}. \quad (8.3)$$

Формули (8.1)-(8.3) передбачають, що значення аргументу x утворюють зростаючу послідовність. Як видно з цих виразів, значення похідної в точці оцінюється за значеннями функції у цій та наступній точках. Формули називають *правою різницевою схемою* обчислення першої похідної.

За аналогією складається *ліва різницева схема* обчислення першої похідної.

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x}.$$

Формула чисельного диференціювання для визначення першої похідної матиме вигляд:

$$f'(x) = f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}. \quad (8.4)$$

Для таблично заданої функції формула матиме вигляд:

$$y'(x) = y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}. \quad (8.5)$$

При рівновіддалених вузлових точках $h = x_{i+1} - x_i = \text{const}$:

$$y'(x) = y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}. \quad (8.6)$$

Точність обчислення похідних за цими двома схемами однакова. Оцінку похибки обчислення похідної отримують розкладанням функції $f(x)$ в ряд Тейлора. Величина точності обчислення залежить від значення кроку h (або Δx). Похибка обчислення похідної буде зменшуватись при зменшенні кроку диференціювання. При цьому слід дотримуватись такої практичної рекомендації: для обчислення першої похідної із заданою точністю ε приблизне значення кроку визначається за формулою: $h \approx \sqrt{\varepsilon}$. Слід мати на увазі, що подальше зменшення кроку може погіршити результат обчислення похідної. Для табличної функції величина кроку дорівнює різниці між сусідніми вузловими точками таблиці.

Точність обчислення похідних зростає при застосуванні *схеми двосторонньої (центральної) різниці*. У цьому випадку вираз для похідної має вигляд:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2 \cdot \Delta x}.$$

Тоді формула чисельного диференціювання для визначення першої

похідної матиме вигляд:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (8.7)$$

Для таблично заданої функції формула матиме вигляд:

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (8.8)$$

При рівновіддалених вузлових точках $h = x_{i+1} - x_i = \text{const}$:

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2 \cdot h}. \quad (8.9)$$

Точність обчислення похідних при застосуванні схеми центральної різниці при однаковому кроці h буде на порядок вище за попередні схеми розрахунку.

Примітка. Для крайніх вузлових точок визначення значення похідних за допомогою описаних вище методів неможливе (за правою схемою в точці x_n ; за лівою схемою в точці x_0 ; за центральною схемою в точках x_0 та x_n).

Приклад 8.1. Нехай задана функція $y = 2x^2$, яка також представлена таблично:

x	0	0,5	1	1,5	2	2,5
y	0	0,5	2	4,5	8	12,5

Розрахувати значення похідної за центральною схемою.

Розв'язок: вузлові точки рівновіддалені, крок $h = 0,5$. Перша похідна від функції має вигляд: $y' = 4x$.

Визначимо похідні у вузлових точках за аналітичною формулою, за правою різницевою схемою, за лівою різницевою схемою та за центральною різницевою схемою. Дані запишемо в таблицю.

x	аналітична формула	права схема	ліва схема	центральна схема
	$y' = 4x$	$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$	$y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$	$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2 \cdot h}$
0	0	1		
0,5	2	3	1	2
1	4	5	3	4
1,5	6	7	5	6
2	8	9	7	8
2,5	10		9	

Як видно з результатів, що наведені в таблиці, значення похідної розраховані за центральною схемою в даному прикладі збігаються з точними значеннями, що розраховані за аналітичною формулою похідної.

Обчислення другої похідної функції

Для визначення другої похідної функції потрібно взяти похідну від першої похідної функції:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{df}{dx} \right).$$

Тоді при використанні правої різницевої схеми друга похідна від табличної функції с постійним кроком h матиме вигляд:

$$f''_i = \frac{f'_{i+1} - f'_i}{h} = \frac{\frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h}}{h} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}. \quad (8.10)$$

Для таблично заданої функції формула матиме вигляд:

$$y''_i = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \quad (8.11)$$

При використанні лівої різницевої схеми друга похідна від табличної функції с постійним кроком h матиме вигляд:

$$f''_i = \frac{f'_i - f'_{i-1}}{h} = \frac{\frac{f_i - f_{i-1}}{h} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h}}{h} = \frac{f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}{h^2}. \quad (8.12)$$

Для таблично заданої функції формула матиме вигляд:

$$y_i'' = \frac{y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}}{h^2}. \quad (8.13)$$

При використанні центральної схеми друга похідна від функції с постійним кроком h матиме вигляд:

$$f_i'' = \frac{f'_{i+1} - f'_{i-1}}{2h} = \frac{\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{f_{i-1} - f_{i-3}}{2h}}{2h} = \frac{f_{i+1} - 2f_{i-1} + f_{i-3}}{(2h)^2}. \quad (8.14)$$

Для таблично заданої функції формула матиме вигляд:

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_{i-1} + y_{i-3}}{(2h)^2}. \quad (8.15)$$

При обчисленні похідної більш високого порядку (наприклад, третього) слід взяти похідну від отриманої формули (наприклад, другого). Збільшення порядку похідної при чисельному диференціюванні табличної функції потребує збільшення кількості вузлових точок, що задіяні в розрахунковій формулі. Але слід зазначити, що при обчисленні похідних вищих порядків можливе значне зростання похибок. Тому наведені схеми чисельного диференціювання практично не використовуються для обчислення похідних вище другого порядку [1, 11, 13].

8.3 ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ПРИ ВИКОРИСТАННІ ІНТЕРПОЛЯЦІЙНИХ ФОРМУЛ

Більш загальний підхід до розв'язання задачі чисельного диференціювання заснований на використанні інтерполяційних формул [1, 13].

Нехай на відрізку $[a, b]$ потрібно знайти похідні від функції $y = f(x)$, що представлена у вигляді таблиці.

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

При отриманні формул для чисельного диференціювання задану функцію на відрізку замінюють наближеною функцією (інтерполяційною або апроксимуючою). Зазвичай вихідну функцією замінюють інтерполяційною функцією (найчастіше поліномом $P_n(x)$) [1, 11, 13, 21-23, 27-29, 39, 45], і вважають, що:

$$f'(x) \approx P'_n(x).$$

Аналогічно знаходять похідні другого та більш вищих порядків.

Якщо похибка обчислень $R_n(x)$ за інтерполяційним поліномом відома:

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x),$$

то можна визначити похибку похідної інтерполяційної функції:

$$r(x) = f'(x) - P'_n(x) = R'_n(x).$$

Тобто похибка похідної інтерполяційної функції дорівнює похідній від похибки цієї функції. Це твердження справедливе і для похідних вищих порядків [1, 13].

При цьому слід зауважити, що чисельне диференціювання є менш точним, ніж інтерполяція [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39]. Навіть близькість ординат функцій $y = f(x)$ та $y = P_n(x)$, не гарантує близькості похідних (тангенсів кутів нахилу дотичних).

8.3.1 Чисельне диференціювання на основі першої формули Ньютона

Нехай функція $y = f(x)$ представлена у вигляді таблиці і при цьому вузли інтерполяції є рівновіддаленими: $x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$. Для знаходження похідних $f'(x), f''(x)$ в точках першої половини таблиці замінимо функцію $y = f(x)$ першим інтерполяційним багаточленом Ньютона:

$$f(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \\ + \dots + \frac{q(q-1)(q-2)\dots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0.$$

Перепишемо формулу, обравши $n = 5$ і розкриваючи дужки:

$$f(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q^2 - q}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{q^3 - 3q^2 + 2q}{6}\Delta^3 y_0 + \\ + \frac{q^4 - 6q^3 + 11q^2 - 6q}{24}\Delta^4 y_0 + \\ + \frac{q^5 - 10q^4 + 35q^3 - 50q^2 + 24q}{120}\Delta^5 y_0 + \dots$$

Знайдемо $f'(x)$ враховуючи, що:

$q = \frac{x-x_0}{h}$ і те, що шукаємо похідну від складної функції

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \cdot \frac{df(x)}{dq} \quad \left(\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \right).$$

Тоді:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 \frac{2q-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6} \Delta^3 y_0 + \Delta^4 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} + \frac{5q^4-40q^3+105q^2-100q+24}{120} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (8.16)$$

Формула (8.16) може бути застосована для розрахунку перших похідних при значеннях аргументу в околі вузла x_0 . При визначенні похідної для значень аргументу, що знаходяться на відстані більшій за крок h від вузлової точки x_0 , потрібно прийняти за новий вузол x_0 найближчий вузол x_i (див. розділ 5). Диференціюванням формули (8.16) можна отримати формулу для визначення другої похідної.

Оскільки:

$$f''(x) = \frac{d(f'(x))}{dx} = \frac{d(f'(x))}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} \quad \left(\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \right),$$

отримуємо:

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 (q-1) \Delta^3 y_0 + \frac{6q^2 - 18q + 11}{12} \Delta^4 y_0 + \frac{2q^3 - 12q^2 + 21q - 10}{12} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (8.17)$$

Формула (8.17) може бути застосована для розрахунку других похідних від функції. Аналогічно можна визначити й похідні функції вищих порядків.

При визначенні похідних у вузлових точках формули (8.16) та (8.17) спрощуються, оскільки табличне значення аргументу в цих точках приймається за x_0 і тоді $q = 0$.

У результаті формула визначення першої похідної у вузлових точках матиме вигляд:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \frac{\Delta^5 y_0}{5} - \dots \right], \quad (8.18)$$

а для другої похідної:

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \frac{5}{6} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (8.19)$$

Приклад 8.2. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

x	1	1,2	1,4	1,6	1,8
y	0,4852	0,5721	0,6511	0,7223	0,7881

Знайти значення першої та другої похідних для заданої функції в точках $x = 1,05$ та $x = 1,2$.

Розв'язок: побудуємо для заданої функції таблицю скінченних різниць для подальших розрахунків.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
1	0,4852	0,0869	-0,0079	0,0001	0,0023
1,2	0,5721	0,079	-0,0078	0,0024	
1,4	0,6511	0,0712	-0,0054		
1,6	0,7223	0,0658			
1,8	0,7881				

Крок $h=0,2$. Задані точки знаходяться в першій половині таблиці. Тому для розрахунків слід використати формули (8.16) та (8.17), що отримані на основі першої інтерполяційної формули Ньютона.

Знайдемо значення похідних в точці $x = 1,05$.

Знайдемо q ($x_0 = 1,0$): $q = \frac{x-x_0}{h} = \frac{1,05-1,0}{0,2} = 0,25$.

Запишемо формулу для визначення першої похідної ($n = 4$):

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

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f'(1,05) = \frac{1}{0,2} \left[0,0869 + \frac{2 \cdot 0,25 - 1}{2} (-0,0079) + \frac{3 \cdot 0,25^2 - 6 \cdot 0,25 + 2}{6} 0,0001 + \frac{2 \cdot 0,25^3 - 9 \cdot 0,25^2 + 11 \cdot 0,25 - 3}{12} 0,0023 \right] = 0,4437.$$

Отже, значення першої похідної в точці $x = 1,05$ буде становити 0,4437.

Запишемо формулу для визначення другої похідної ($n = 4$):

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 + (q-1) \Delta^3 y_0 + \frac{6q^2-18q+11}{12} \Delta^4 y_0 \right].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і

отримаємо:

$$f''(1,05) = \frac{1}{0,2^2} [-0,0079 + (0,25 - 1) \cdot 0,0001 + \\ + \frac{6 \cdot 0,25^2 - 18 \cdot 0,25 + 11}{12} 0,0023] = -0,1664.$$

Отже, значення другої похідної в точці $x = 1,05$ буде становити $(-0,1664)$.

Знайдемо значення похідних в точці $x = 1,2$. Точка збігається з вузловою ($q=0$). Тому похідні будемо шукати за спрощеними формулами (8.18) та (8.19). Потрібні значення скінченних різниць виділимо в таблиці скінченних різниць кольором.

Запишемо формулу для визначення першої похідної ($n = 4$):

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} \right].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f'(1,2) = \frac{1}{0,2} \left[0,0869 - \frac{-0,0079}{2} + \frac{0,0001}{3} - \frac{0,0023}{4} \right] = 0,4515.$$

Отже, значення першої похідної в вузловій точці $x = 1,2$ буде становити $0,4515$.

Запишемо формулу для визначення другої похідної ($n = 4$):

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

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f''(x) = \frac{1}{0,2^2} \left[-0,0079 - 0,0001 + \frac{11}{12} 0,0023 \right] = 0,1473.$$

Отже, значення другої похідної в вузловій точці $x = 1,2$ становитиме $0,1473$.

8.3.2 Чисельне диференціювання на основі другої формули Ньютона

Нехай функція $y = f(x)$ представлена у вигляді таблиці і при цьому вузли інтерполяції є рівновіддаленими: $x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$. Для знаходження похідних $f'(x), f''(x)$ в точках другої половини таблиці замінимо функцію $y = f(x)$ другим інтерполяційним багаточленом Ньютона:

$$P_n(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3} + \dots + \frac{q(q+1)(q+2)\dots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0.$$

Перепишемо формулу, обравши $n = 5$ і розкриваючи дужки:

$$f(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q^2 + q}{2}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q^3 + 3q^2 + 2q}{6}\Delta^3 y_{n-3} + \frac{q^4 + 6q^3 + 11q^2 - 6q}{24}\Delta^4 y_{n-4} + \frac{q^5 + 10q^4 + 35q^3 + 50q^2 + 24q}{120}\Delta^5 y_{n-5} + \dots$$

Враховуючи правило диференціювання складної функції, матимемо:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{2q+1}{2}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{3q^2+6q+2}{6}\Delta^3 y_{n-3} + \frac{2q^3+9q^2+11q+3}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \frac{5q^4+40q^3+105q^2+100q+24}{120}\Delta^5 y_{n-5} + \dots \right]. \quad (8.20)$$

Диференціюванням формули (8.20) отримуємо формулу для визначення другої похідної:

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_{n-2} + \frac{2q^3+12q^2+21q+10}{12}\Delta^3 y_{n-3} + \dots \right]. \quad (8.21)$$

Аналогічно можна визначити й похідні функції вищих порядків.

При обчисленні похідних у вузлах інтерполяції якості x_n можна взяти найближче табличне значення аргументу - вузол інтерполяції. Тоді $x = x_n$ і $q = 0$. Розрахункові формули матимуть вигляд.

Для першої похідної у вузлових точках:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2} + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3} + \frac{\Delta^4 y_{n-4}}{4} + \frac{\Delta^5 y_{n-5}}{5} + \dots \right]. \quad (8.22)$$

Для другої похідної у вузлових точках:

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_{n-2} + \Delta^3 y_{n-3} + \frac{11}{12} \Delta^4 y_{n-4} + \frac{5}{6} \Delta^5 y_{n-5} + \dots \right]. \quad (8.23)$$

Приклад 8.3. Залежність $y = f(x)$ описується таблицею (див. приклад 8.1).

Знайти значення першої та другої похідних для заданої функції в точках $x = 1,7$ та $x = 1,6$.

Розв'язок: задані точки знаходяться в другій половині таблиці. Тому для розрахунків слід використати формули (8.20) та (8.21), що отримані на основі другої інтерполяційної формули Ньютона. Позначимо в таблиці скінченних різниць необхідні для подальших розрахунків різниці. Скінченні різниці для точки $x = 1,7$ позначимо підкресленням, а - для точки $x = 1,6$ кольором.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
1	0,4852	0,0869	-0,0079	0,0001	<u>0,0023</u>
1,2	0,5721	0,079	-0,0078	<u>0,0024</u>	
1,4	0,6511	0,0712	<u>-0,0054</u>		
1,6	0,7223	<u>0,0658</u>			
1,8	0,7881				

Крок $h=0,2$.

Знайдемо значення похідних в точці $x = 1,7$.

Знайдемо $q (x_n = 1,8)$: $q = \frac{x-x_n}{h} = \frac{1,7-1,8}{0,2} = -0,5$.

Запишемо формулу для визначення першої похідної ($n = 4$):

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{2q+1}{2} \Delta^2 y_{n-2} + \frac{3q^2+6q+2}{6} \Delta^3 y_{n-3} + \frac{2q^3+9q^2+11q+3}{12} \Delta^4 y_{n-4} \right].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f'(1,2) = \frac{1}{0,2} \left[0,0658 + \frac{2 \cdot (-0,5) + 1}{2} (-0,0054) + \frac{3 \cdot (-0,5)^2 + 6 \cdot (-0,5) + 2}{6} 0,0024 + \frac{2 \cdot (-0,5)^3 + 9 \cdot (-0,5)^2 + 11 \cdot (-0,5) + 3}{12} 0,0023 \right] = 0,3280.$$

Отже, значення першої похідної в точці $x = 1,2$ буде становити 0,3280.

Запишемо формулу для визначення другої похідної ($n = 3$).

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_{n-2} + (q+1) \Delta^3 y_{n-3} + \frac{6q^3+18q^2+11}{12} \Delta^4 y_{n-4} \right].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f''(1,2) = \frac{1}{0,2^2} \left[-0,0054 + (-0,5+1) \cdot 0,0024 + \frac{6 \cdot (-0,5)^3 + 18 \cdot (-0,25)^2 + 11}{12} 0,0023 \right] = -0,0343.$$

Отже, значення другої похідної в точці $x = 1,2$ буде становити (-0,0343).

Знайдемо значення похідних в точці $x = 1,6$. Точка збігається з вузловою ($q=0$). Тому похідні будемо шукати за спрощеними формулами (8.22) та (8.23). Потрібні значення скінченних різниць в таблиці скінченних різниць позначені кольором.

Запишемо формулу для визначення першої похідної ($n = 3$).

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2} + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3} \right].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f'(1,2) = \frac{1}{0,2} \left[0,0712 + \frac{-0,0078}{2} + \frac{0,0001}{3} \right] = 0,3367.$$

Отже, значення першої похідної в вузловій точці $x = 1,2$ буде становити 0,3367.

Запишемо формулу для визначення другої похідної ($n = 3$).

$$f''(x) = \frac{1}{h^2} [\Delta^2 y_{n-2} + \Delta^3 y_{n-3}].$$

Підставимо необхідні для розрахунку значення з таблиці в формулу і отримаємо:

$$f''(x) = \frac{1}{0,2^2} [-0,0078 + 0,0001] = 0,1925.$$

Отже, значення другої похідної в вузловій точці $x = 1,2$ буде становити 0,1925.

8.3.3 Чисельне диференціювання на основі інтерполяційного багаточлена Лагранжа

В практичних розрахунках зручніше визначати значення похідних без застосування скінченних різниць, а знаходити похідні від функцій через значення функції у вузлових точках безпосередньо. Одним з підходів для отримання таких формул є побудова інтерполяційного багаточлену Лагранжа з рівновіддаленими вузлами інтерполяції $x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$ й припускають, що справедлива наближена рівність: $f'(x) \approx P'_n(x)$ [1, 11, 13, 17-19]. Рівність справедлива і для похідних вищих порядків.

Нехай таблична функція задана двома вузловими точками.

Використовуючи поліном Лагранжа першого ступеня для визначення функції за двома вузловими точками x_0 і x_1 отримаємо:

$$\begin{aligned} P_1(x) &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 = \frac{x - x_1}{-h} y_0 + \frac{x - x_0}{h} y_1 = \\ &= \frac{1}{h} [y_1(x - x_0) - y_0(x - x_1)]. \end{aligned}$$

Знайдемо першу похідну від отриманої формули:

$$y'(x) = P_1'(x) = \frac{y_1 - y_0}{h}.$$

Для пари точок x_i і x_{i+1} отримаємо:

$$y'(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}. \quad (8.24)$$

Отримана формула (8.22) для визначення похідної функції ідентична формулі (8.3) – права різницева схема обчислення першої похідної. Формула справедлива для будь-якого $x \in [x_0, x_1]$ і може бути використана і для нерівновіддалених вузлів [1, 11, 13, 17-19].

Нехай таблична функція задана трьома рівновіддаленими вузловими точками x_0, x_1 та x_2 . Використовуючи поліном Лагранжа другого ступеня для визначення функції за трьома вузловими точками, отримаємо:

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2 = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{-h \cdot (-2h)} y_0 + \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{h \cdot (-h)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2h \cdot h} y_2. \end{aligned}$$

Тоді:

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \frac{1}{2h^2} [(x - x_1)(x - x_2)y_0 - 2(x - x_0)(x - x_2)y_1 + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1)y_2]. \end{aligned}$$

Знайдемо першу похідну від отриманої формули:

$$y'(x) = \frac{1}{2h^2} [(2x - x_1 - x_2)y_0 - 2(2x - x_0 - x_2)y_1 + (2x - x_0 - x_1)y_2]. \quad (8.25)$$

Формула (8.25) справедлива для будь-якого $x \in [x_0, x_2]$.

Зокрема, якщо необхідно визначити значення перших похідних у вузлах інтерполявання, то отримаємо такі вирази:

$$y'(x_0) = \frac{1}{2h} (-3y_0 + 4y_1 - y_2), \quad (8.26)$$

$$y'(x_1) = \frac{1}{2h} (-y_0 + y_2), \quad (8.27)$$

$$y'(x_2) = \frac{1}{2h} (y_0 - 4y_1 + 3y_2). \quad (8.28)$$

Визначимо похибки формул чисельного диференціювання (8.26)-(8.28) з урахуванням, що $r(x) = R'_n(x)$.

Для цього виконаємо диференціювання залишкового члена інтерполяційної формули Лагранжа:

$$R_2(x) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2).$$

і виконаємо послідовну підстановку у вираз $R'_2(x)$ значень $x = x_0, x = x_1, x = x_2$:

$$R_2(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi_0)}{3} h^2, R_2(x_1) = \frac{f^{(3)}(\xi_1)}{6} h^2, R_2(x_2) = \frac{f^{(3)}(\xi_2)}{3} h^2.$$

Для вузлових точок x_i, x_{i+1} та x_{i+2} формула (8.25) матиме вигляд:

$$y'(x) = \frac{1}{2h^2} [(2x - x_{i+1} - x_{i+2})y_i - 2(2x - x_i - x_{i+2})y_{i+1} + (2x - x_i - x_{i+1})y_{i+2}]. \quad (8.29)$$

$$+(2x - x_i - x_{i+1})y_2].$$

Формула (8.29) справедлива для будь-якого $x \in [x_i, x_{i+2}]$.

Знайдемо другу похідну від отриманої формули (8.25):

$$y''(x) = \frac{1}{2h^2} (2y_0 - 4y_1 + 2y_2) = \frac{(y_0 - 2y_1 + y_2)}{h^2}. \quad (8.30)$$

Для трьох точок x_i, x_{i+1} та x_{i+2} отримаємо:

$$y''(x) = \frac{(y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}))}{h^2}. \quad (8.31)$$

Отримана формула (8.29) для визначення похідної функції ідентична формулі (8.11) – права різницева схема обчислення другої похідної.

Приклад 8.4. Визначити першу похідну для табличної функції виду:

x	1	3	5
y	0,2	0,7	1,1

в точках $x=1,4$ та $x=3$.

Розв'язок: таблична функція має 3 вузли інтерполяції ($n = 2$). Вузли рівновіддалені. Скористаємося для отримання значення першої похідної в точці $x=1,4$ формулою (8.25):

$$\begin{aligned} y'(1,4) &= \frac{1}{2h^2} [(2x - x_1 - x_2)y_0 - 2(2x - x_0 - x_2)y_1 + (2x - x_0 - x_1)y_2] = \\ &= \frac{1}{2 \cdot 2^2} [(2 \cdot 1,4 - 3 - 5) \cdot 0,2 - 2(2 \cdot 1,4 - 1 - 5) \cdot 0,7 \\ &\quad + (2 \cdot 1,4 - 1 - 3) \cdot 1,1] = 0,265. \end{aligned}$$

Отже, значення y' в точці $x=1,4$ дорівнює $y' = 0,265$.

Скористаємося для отримання значення першої похідної в точці $x=3$ формулою (8.27), оскільки похідну шукаємо в другій вузловій точці:

$$y'(3) = \frac{1}{2h}(-y_0 + y_2) = \frac{1}{2 \cdot 2}(-0,2 + 1,1) = 0,225.$$

Отже, значення y' в точці $x=3$ дорівнює $y' = 0,225$.

Задачу можна вирішити по іншому [1, 11, 13, 17-19].

Підставимо тільки значення з таблиці в формулу Лагранжа для квадратичної інтерполяції (5.3):

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2.$$

і отримаємо аналітичний вираз полінома Лагранжа для заданої табличної функції:

$$\begin{aligned} P_2(2) &= \frac{(x-3)(x-5)}{(1-3)(1-5)} \cdot 0,2 + \frac{(x-1)(x-5)}{(3-1)(3-5)} \cdot 0,7 + \frac{(x-1)(x-3)}{(5-1)(5-3)} \cdot 1,1 = (x^2 - 8x + \\ &+ 15) \frac{0,2}{8} + (x^2 - 6x + 5) \frac{0,7}{-4} + (x^2 - 4x + 3) \frac{1,1}{8} = \left(\frac{0,2}{8} - \frac{0,7}{4} + \frac{1,1}{8} \right) x^2 + \\ &+ \left(-\frac{0,2}{8} 8 - \frac{0,7}{-4} 6 - \frac{1,1}{8} 4 \right) x + \left(\frac{0,2}{8} 15 - \frac{0,7}{4} 5 + \frac{1,1}{8} 3 \right) = -0,0125x^2 + 0,3x - \\ &- 0,0875. \end{aligned}$$

Отже, функція має вигляд: $y = P_2(x) = -0,0125x^2 + 0,3x - 0,0875$.

Знайдемо від отриманої функції першу похідну:

$$y'(x) = -2 \cdot 0,0125x + 0,3 = -0,025x + 0,3.$$

Визначимо значення першої похідної в точці $x=1,4$ за отриманою формулою:

$$y'(1,4) = -0,025x + 0,3 = -0,025 \cdot 1,4 + 0,3 = 0,265.$$

Визначимо значення першої похідної в точці $x=3$ за отриманою формулою:

$$y'(3) = -0,025x + 0,3 = -0,025 \cdot 3 + 0,3 = 0,225.$$

Як можна побачити, результати розрахунку перших похідних збігаються.

Нехай таблична функція задана трьома нерівновіддаленими вузловими точками x_i, x_{i+1} та x_{i+2} .

x_i	x_{i+1}	x_{i+2}
y_i	y_{i+1}	y_{i+2}

Позначимо: $h_i = x_{i+1} - x_i$ й $h_{i+1} = x_{i+2} - x_{i+1}$.

Використовуючи поліном Лагранжа другого ступеня для визначення функції за цими трьома вузловими точками, отримаємо:

$$P_2(x) = \frac{(x - x_{i+1})(x - x_{i+2})}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})}y_i + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+2})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})}y_{i+1} + \\ + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})}y_{i+2} = \frac{(x - x_{i+1})(x - x_{i+2})}{(h_i)(h_i + h_{i+1})}y_i - \\ - \frac{(x - x_i)(x - x_{i+2})}{(h_i)(h_{i+1})}y_{i+1} + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(h_i + h_{i+1})(h_{i+1})}y_{i+2}.$$

Знайдемо першу похідну від отриманої формули:

$$y'(x) = \frac{2x - x_{i+1} - x_{i+2}}{h_i(h_i + h_{i+1})}y_i - \frac{2x - x_i - x_{i+2}}{h_i(h_{i+1})}y_{i+1} + \\ + \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(h_i + h_{i+1})h_{i+1}}y_{i+2}. \quad (8.32)$$

Формула (8.32) справедлива при визначенні першої похідної для будь-якого $x \in [x_i, x_{i+2}]$ при нерівновіддалених вузлах [1, 11, 13, 17-19].

Для отримання формул чисельного диференціювання для більшої кількості вузлових точок запишемо інтерполяційну формулу Лагранжа (5.1) в такому вигляді:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}y_i, \quad (8.33)$$

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

$\omega'_{n+1}(x_i) = (x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)$ – похідна від багаточлену $\omega_{n+1}(x)$ при $x = x_i, i = 1, 2, \dots, n$.

Нехай вузлові точки $x_0, x_1, \dots, x_n$ – рівновіддалені. Тоді:

$$h = x_{i+1} - x_i = \text{const} \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Позначимо: $\frac{x-x_0}{h} = q$.

Тоді:

$$\begin{aligned} x - x_0 &= qh, x - x_1 = h(q - 1), x - x_2 = h(q - 2), \dots, x - x_n = h(q - n), \\ x - x_i &= x - x_0 - ih = h(q - i), \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

З урахуванням прийнятих позначень, формула (8.33) при рівновіддалених вузлових точках матиме вигляд:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} h^{n+1} q(q-1) \dots (q-n)}{i! (n-i)! h^{n+1} (q-i)} y_i = \\ &= \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} q(q-1) \dots (q-n)}{i! (n-i)! (q-i)} y_i. \end{aligned} \quad (8.34)$$

Враховуючи, що шукаємо похідну від складної функції:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \cdot \frac{df(x)}{dq} \quad \left(\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \right),$$

можна записати:

$$f'(x) = P'_n(x) = \frac{1}{h} \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i}}{i! (n-i)!} y_i \cdot \frac{d}{dq} \left[\frac{q(q-1) \dots (q-n)}{(q-i)} \right]. \quad (8.35)$$

З використанням формули (8.35) можна обчислити значення першої похідної на відрізку $x \in [x_0, x_n]$ при рівновіддалених вузлових точках. Диференціюванням формули (8.35) можна отримати формулу для визначення

другої похідної з урахуванням, що:

$$f''(x) = \frac{d(f'(x))}{dx} = \frac{d(f'(x))}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} \quad \left(\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \right).$$

Аналогічно можуть бути знайдені похідні вищих порядків.

Наведемо формули похідних першого та другого порядків для різної кількості вузлових точок і відповідно порядку поліному n , що отримані на основі формули Лагранжа.

Формули при $n = 1$ (2 вузлові точки):

$$P_1(x) = (1 - q)y_0 + qy_1, \quad q = \frac{x - x_0}{h},$$

$$y'(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}.$$

Формули при $n = 2$ (3 вузлові точки):

$$P_2(x) = \frac{(q-1)(q-2)}{2}y_0 + q(q-2)y_1 + \frac{q(q-1)}{2}y_2,$$

$$y'(x) = \frac{1}{h} \left[\frac{2q-3}{2}y_0 - 2(q-1)y_1 + \frac{2q-1}{2}y_2 \right],$$

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2).$$

Формули для пошуку значень першої похідної у вузлових точках мають вигляд:

$$y'(x_0) = \frac{1}{2h} (-3y_0 + 4y_1 - y_2),$$

$$y'(x_1) = \frac{1}{2h} (-y_0 + y_2),$$

$$y'(x_2) = \frac{1}{2h} (y_0 - 4y_1 + 3y_2).$$

Формули при $n = 3$ (4 вузлові точки):

$$y'(x) = \frac{1}{h} \left[-\frac{q^2-4q+4}{2}y_0 + \frac{3q^2-10q+6}{2}y_1 - \frac{3q^2-8q+3}{2}y_2 + \frac{3q^2-6q+2}{2}y_3 \right],$$

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} [(2 - q)y_0 + (3q - 5)y_1 - (3q - 4)y_2 + 3(q - 1)y_3].$$

Формули для пошуку значень першої похідної у вузлових точках мають вигляд:

$$\begin{aligned} y'(x_0) &= \frac{1}{6h} (-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3), \\ y'(x_1) &= \frac{1}{6h} (-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3), \\ y'(x_2) &= \frac{1}{6h} (y_0 - 6y_1 + 3y_2 + 2y_3), \\ y'(x_3) &= \frac{1}{6h} (-2y_0 + 9y_1 - 18y_2 + 11y_3). \end{aligned}$$

Формули для пошуку значень другої похідної у вузлових точках мають вигляд:

$$\begin{aligned} y''(x_0) &= \frac{1}{h^2} (2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3), \\ y''(x_1) &= \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2), \\ y''(x_2) &= \frac{1}{h^2} (y_1 - 2y_2 + y_3), \\ y''(x_3) &= \frac{1}{h^2} (-y_0 + 4y_1 - 5y_2 + 2y_3). \end{aligned}$$

Формули при $n = 4$ (5 вузлових точок):

$$\begin{aligned} y'(x) &= \frac{1}{h} \left[\frac{2q^3 - 15q^2 + 35q - 25}{12} y_0 - \frac{4q^3 - 27q^2 + 52q - 24}{6} y_1 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2q^3 - 15q^2 + 35q - 25}{12} y_0 - \frac{4q^3 - 27q^2 + 52q - 24}{6} y_1 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2q^3 - 9q^2 + 11q - 3}{12} y_4 \right], \\ y''(x) &= \frac{1}{h^2} \left[\frac{6q^2 - 30q + 35}{12} y_0 - \frac{6q^2 - 27q + 26}{3} y_1 + \frac{6q^2 - 24q + 19}{2} y_2 - \right. \end{aligned}$$

$$\left. -\frac{6q^2 - 21q + 14}{3}y_3 + \frac{6q^2 - 18q + 11}{12}y_4 \right].$$

Формули для пошуку значень першої похідної у вузлових точках мають вигляд:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{12h}(-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4), \\ f'(x_1) &= \frac{1}{12h}(-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4), \\ f'(x_2) &= \frac{1}{12h}(y_0 - 8y_1 + 8y_3 - y_4), \\ f'(x_3) &= \frac{1}{12h}(-y_0 + 6y_1 - 18y_2 + 10y_3 + 3y_4), \\ f'(x_4) &= \frac{1}{12h}(3y_0 - 16y_1 + 36y_2 - 48y_3 + 25y_4). \end{aligned}$$

При розв'язуванні практичних задач зазвичай користуються локальною інтерполяцією, оскільки інтерполяція функції одним інтерполяційним поліномом приводить до значних похибок [1, 11, 13, 17-19]. При локальній інтерполяції, в околі точки, де якій потрібно обчислити похідну, функцію замінюють інтерполяційним поліномом невисокого ступеня (наприклад, $n = 1, 2, 3$).

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 8

1. Сформулюйте задачу чисельного диференціювання функцій.
2. Коли застосовують чисельне диференціювання функцій?
3. Як вирішується задача чисельного диференціювання функцій при використанні інтерполяційних формул?
4. Наведіть формулу визначення першої похідної при застосуванні схеми центральної різниці.
5. Наведіть формулу визначення першої похідної при застосуванні схеми

правої різниці.

6. Наведіть формулу визначення другої похідної при застосуванні схеми правої різниці.
7. В чому полягають особливості застосування формули чисельного диференціювання на основі першої інтерполяційної формули Ньютона?
8. У чому полягають особливості застосування формули чисельного диференціювання на основі другої інтерполяційної формули Ньютона?
9. У чому полягають особливості чисельного диференціювання функцій у вузлових точках?
10. У чому полягають особливості застосування формули чисельного диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа?
11. Наведіть формулу визначення першої похідної на основі інтерполяційної формули Лагранжа при нерівновіддалених вузлах.
12. Наведіть формулу визначення другої похідної на основі інтерполяційної формули Лагранжа при нерівновіддалених вузлах.
13. Чи потребує чисельне диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа визначення скінченних різниць?
14. Наведіть формули визначення другої похідної на основі інтерполяційної формули Лагранжа у вузлових точках при наявності трьох вузлів.
15. Для заданої таблично функції виду

x	x ₀	x ₁	x ₂	x ₃
y	y ₀	y ₁	y ₂	y ₃

записати загальний вигляд формули чисельного диференціювання на основі першої інтерполяційної формули Ньютона (врахувати всі вузли інтерполяції).

16. Для заданої таблично функції виду

x	x ₀	x ₁	x ₂	x ₃
y	y ₀	y ₁	y ₂	y ₃

записати загальний вигляд формули чисельного диференціювання на основі другої інтерполяційної формули Ньютона (врахувати всі вузли інтерполяції).

17. Для заданої табличної функції виду

x	x_0	x_1	x_2
y	y_0	y_1	y_2

записати загальний вигляд формули чисельного диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа для визначення першої похідної (врахувати всі вузли інтерполяції).

18. Для заданої табличної функції виду

x	x_0	x_1	x_2
y	y_0	y_1	y_2

записати загальний вигляд формули чисельного диференціювання на основі інтерполяційної формули Лагранжа для визначення другої похідної (врахувати всі вузли інтерполяції).

19. Для заданої табличної функції виду

x	10	20	30	40
y	8	19	32	52

знайти з використанням формул чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Ньютона значення першої похідної при $x = 15$.

20. Для заданої табличної функції виду

x	10	20	30	40
y	8	19	32	52

знайти з використанням формул чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Ньютона значення першої похідної при $x = 38$.

21. Для заданої табличної функції виду

x	4	7	12
y	6	12	22

знайти з використанням формул чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Лагранжа значення другої похідної при $x = 9$.

22. Для заданої таблично функції виду

x	4	7	12	18
y	6	12	22	33

знайти з використанням формул чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Лагранжа значення першої похідної при $x = 14$.

23. Під час дослідження апарату псевдокиплячого шару отримано таку експериментальну залежність тиску в апараті (P) від осьового положення (h):

$h, \text{м}$	0,0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8
$P, \text{кПа}$	1,80	1,58	1,44	1,33	1,22	1,09	0,93	0,73	0,52	0,33

Густина газу в апараті складає $\rho_{\text{г}} = 0,0120 \text{ кг/м}^3$, густина псевдозріджуваної твердої речовини складає $\rho_{\text{ТВ}} = 2650 \text{ кг/м}^3$. На основі наведених даних обчисліть відсоток об'єму твердої речовини в досліджуваному апараті при заданих в таблиці значеннях осьового положення.

Вказівка. Відсоток об'єму твердої речовини (ε) може бути обчислений за формулою:

$$\varepsilon = \frac{\left(-dP/dh\right) - \rho_{\text{г}} \cdot g}{(\rho_{\text{ТВ}} - \rho_{\text{г}}) \cdot g},$$

де $g = 9,807 \text{ м/с}^2$ – прискорення вільного падіння.

24. У нижченаведеній таблиці представлено дані щодо молярної ентальпії (H) вуглекислого газу за різних значень температури (T):

T, K	373,15	423,15	473,15	523,15	573,15	623,15	673,15	723,15
$H, \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$	25,186	27,254	29,408	31,640	33,942	36,307	38,732	41,209
T, K	773,15	823,15	873,15	923,15	973,15	1023,2	1073,2	
$H, \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$	43,736	46,307	48,919	51,568	54,252	58,966	59,710	

а) обґрунтувати вибір різницевої схеми чисельного розрахунку похідних для кожної з точок;

б) обчислити теплоємність вуглекислого газу при кожній із заданих температур.

Вказівка. Врахувати, що ізобарна теплоємність (C_p) речовини за певного фіксованого тиску визначається за формулою:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p.$$

9 ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ

9.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 9

При вирішенні завдань з хімічної технології виникає необхідність обчислення визначеного інтеграла від певної функції $f(x)$ [1, 11, 17-19, 34].

Якщо функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[a, b]$ і можна відшукати її первісну $F(x)$, то визначений інтеграл може бути обчислений за *формулою Ньютона-Лейбніца*:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a). \quad (9.1)$$

Проте, у багатьох випадках не вдається знайти аналітичної формули $F(x)$, або ж вона виходить настільки складною, що обчислювати за нею інтеграл дуже складно. Наприклад, складним є аналітичне інтегрування функцій виду: $y = \frac{\sin x}{x} e^{-x}$, $y = e^{x^2}$, $y = \sin x^2$, $y = \cos x^2$ тощо.

У таких ситуаціях доводиться застосовувати методи чисельного інтегрування, які полягають у заміні вихідної підінтегральної функції $f(x)$, деякою інтерполуючою (апроксимуючою) функцією (наприклад, $\varphi(x)$). За функцію $\varphi(x)$ найчастіше беруть інтерполяційний багаточлен. В результаті отримують так звані квадратурні формули для обчислення визначених інтегралів [1, 11, 17-19, 21-23, 34].

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \varphi(x)dx + R, \quad (9.2)$$

де R – залишковий член (похибка обчислень за формулою).

Більшість відомих квадратурних формул передбачають завдання системи рівновіддалених точок [1, 11, 17-19, 34].

Методи чисельного інтегрування також дозволяють отримати значення визначеного інтеграла коли функція $f(x)$ задана у вигляді таблиці. Важливою перевагою методів чисельного інтегрування є можливість отримання значення визначеного інтеграла із заданою точністю.

В основі наближених методів інтегрування лежить геометричний зміст

визначеного інтеграла.

Визначений інтеграл від невід'ємної функції $y = f(x)$ з геометричної точки зору дорівнює площі криволінійної трапеції, обмеженої зверху графіком функції $y = f(x)$, зліва та праворуч – відрізками прямих $x = a$ та $x = b$, знизу – відрізком осі Ox (рис. 9.1).

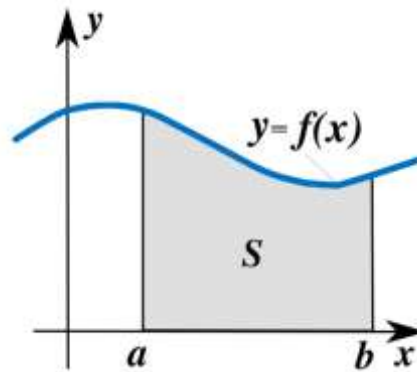


Рис. 9.1. Геометричний зміст визначеного інтеграла

Існують різні наближені методи визначення площі криволінійної трапеції (обчислення інтегралів) [1, 3-5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45].

Наприклад, криволінійну трапецію можна замінити прямокутником (рис. 9.2, а-б) і знайти його площу, або прямолінійною трапецією (рис. 9.2, в) і знайти її площу. Площа цих фігур легко знаходиться за відомими формулами. Площа прямокутника на рис. 9.2, а дорівнює: $S_1 = f(a) \cdot (b - a)$, площа прямокутника на рис. 9.2, б дорівнює: $S_2 = f\left(\frac{a+b}{2}\right) \cdot (b - a)$, а площа прямолінійної трапеції рис. 9.2, в дорівнює: $S_3 = \frac{f(a)+f(b)}{2} \cdot (b - a)$. Похибку обчислення при такій заміні можна визначити за площею зафарбованих елементів.

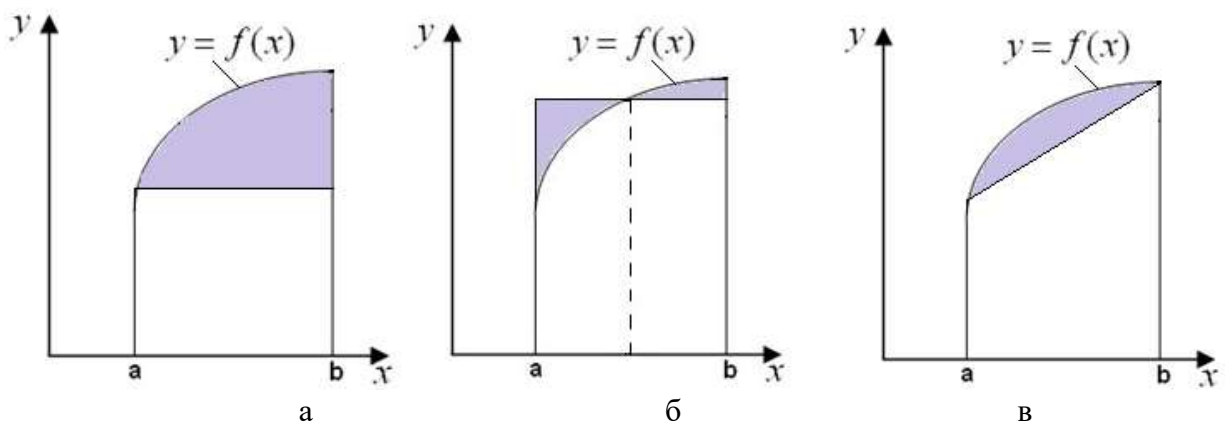


Рис. 9.2. Варіанти заміни криволінійної трапеції прямокутниками (а,б) та прямолінійною трапецією (в)

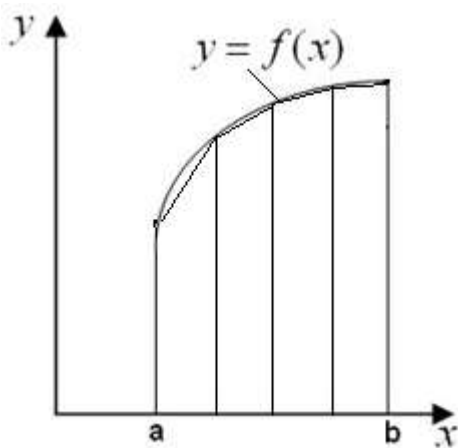


Рис. 9.3. Зменшення похибки визначення інтеграла при розбитті інтервалу інтегрування

Для підвищення точності обчислень відрізок $[a, b]$ слід розділити на n рівних частин, знайти площі кожної з частин за спрощеними формулами, замінюючи їх площами прямокутників, трапецій або апроксимуючи функцію поліномами певних порядків, і перейти до визначення інтеграла на всьому відрізку.

На рис. 9.3 показано суттєве зменшення похибки визначення інтеграла при розбитті інтервалу інтегрування і заміни отриманих криволінійних трапецій прямолінійними трапеціями.

9.2 МЕТОД ПРЯМОКУТНИКІВ

Метод прямокутників є найпростішим методом наближеного обчислення інтеграла.

Метод прямокутників – метод чисельного інтегрування функції однієї змінної, який полягає у заміні підінтегральної функції поліномом нульового ступеня (тобто константою) для кожного елементарного відрізка. Подібна заміна є неоднозначною, оскільки константу можна вибрати рівною значенню підінтегральної функції у будь-якій точці інтервалу інтегрування [1, 17-19, 34].

Ідея методу полягає в розбитті відрізка інтегрування $[a, b]$ на n рівних частин довжиною h (крок),

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad (9.3)$$

і в побудові прямокутників, однією зі сторін яких будуть відрізки $[x_i, x_{i+1}]$ довжиною h , а другою – $f(\xi_i)$, де ξ_i – точка, що належить відрізку $[x_i, x_{i+1}]$.

Геометрична інтерпретація методу зводиться до знаходження визначеного інтеграла як суми площ n прямокутників (зі сторонами $f(\xi_i)$ та h).

Очевидно, що прямокутники можна побудувати багатьма способами, але зазвичай розглядають три модифікації [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39]:

- 1) метод лівих прямокутників;
- 2) метод правих прямокутників;
- 3) метод середніх прямокутників.

9.2.1 Метод лівих прямокутників

Інтервал інтегрування $[a, b]$ розбивається на n рівних частин довжиною h . В отриманих вузлах $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_1 + h$, ..., $x_n = b$ знаходять значення функції $f(x)$. Площа під підінтегральною кривою замінюється на суму площ прямокутників, як це показано на рис. 9.4. При визначенні площі кожного прямокутника одна зі сторін дорівнює h , а друга – лівій стороні прямокутника (тому і метод називають *методом лівих прямокутників*).

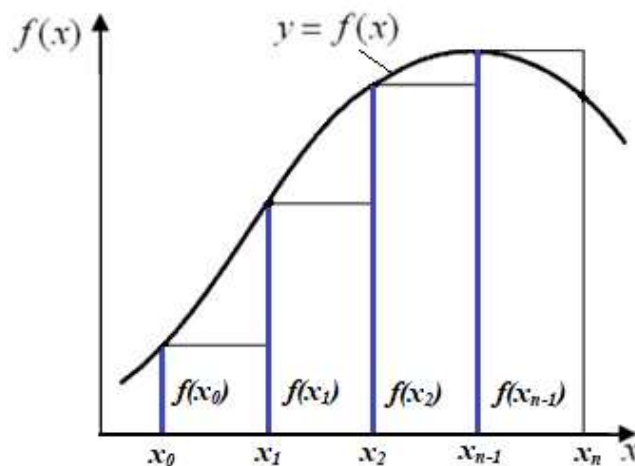


Рис. 9.4. Геометрична інтерпретація методу лівих прямокутників

Інтеграл буде обчислюватись за формулою:

$$I_{\text{л}} = S \approx hf(x_0) + hf(x_1) + \dots + hf(x_{n-1}) = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i). \quad (9.4)$$

Похибка обчислень за формулою лівих прямокутників може бути оцінена величиною залишкового члену R , що визначається за формулою:

$$R = \frac{h \cdot (b - a)}{2} M_1, \quad (9.5)$$

де M_1 – найбільше значення першої похідної на відрізку $[a, b]$.

$$M_1 = \max_{x \in [a; b]} |f'(x)|. \quad (9.6)$$

З урахуванням формули (9.3) похибку можна обчислити за формулою:

$$R = \frac{(b - a)^2}{2n} M_1. \quad (9.7)$$

Якщо підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично,

x_0	x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_0	y_1	y_2	$\dots$	y_n

то формула лівих прямокутників прийме вигляд:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h(y_0 + y_1 + \dots + y_{n-1}), \quad (9.8)$$

де y_i – значення функції у вузлових точках.

Для визначення похибки інтегрування функцій, що задані таблично, замість M_1 у формули (9.5) або (9.7) слід підставити модуль найбільшого значення відношення скінченних різниць першого порядку $\Delta y / \Delta x$.

9.2.2 Метод правих прямокутників

Інтервал інтегрування $[a, b]$ розбивається на n рівних частин довжиною h . В отриманих вузлах $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_1 + h$, ..., $x_n = b$ знаходять значення функції $f(x)$. Площа під підінтегральною кривою замінюється на суму площ прямокутників [1, 11, 17-19, 34], як це показано на рис. 9.5. При визначенні площі кожного прямокутника одна зі сторін дорівнює h , а друга – правій стороні прямокутника (тому і метод називають *методом правих прямокутників*).

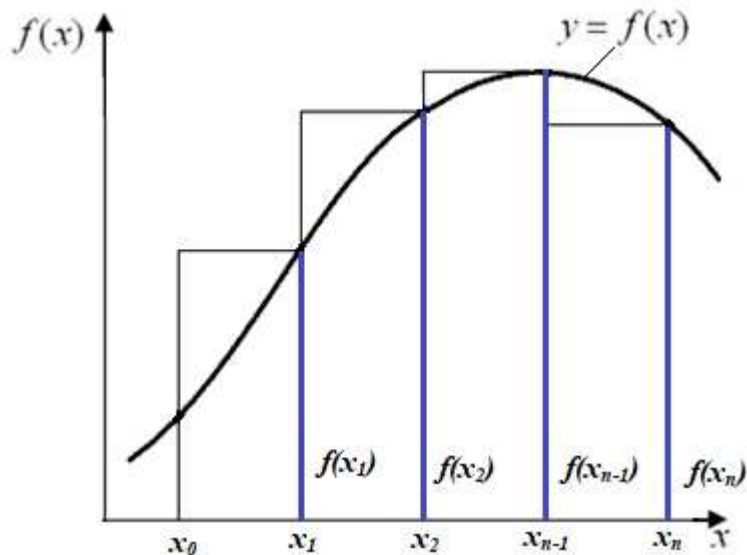


Рис. 9.5. Геометрична інтерпретація методу правих прямокутників

Інтеграл буде обчислюватись за формулою:

$$I_{\Pi} = S \approx hf(x_1) + hf(x_2) + \dots + hf(x_n) = h \sum_{i=1}^n f(x_i). \quad (9.9)$$

Похибка обчислень за формулою правих прямокутників може обчислена за формулами (9.5) або (9.7), що застосовуються для обчислень похибки в методі лівих прямокутників.

Якщо підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично, то формула правих прямокутників прийме вигляд:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h(y_1 + y_2 + \dots + y_n), \quad (9.10)$$

де y_i – значення функції у вузлових точках.

Для визначення похибки інтегрування функцій, що задані таблично аналогічно до методу лівих прямокутників замість M_1 у формули (9.5) або (9.7) слід підставити модуль найбільшого значення відношення скінченних різниць першого порядку $\Delta y / \Delta x$.

В результаті розрахунків за формулами лівих і правих прямокутників отримуємо наближене значення інтеграла (з недоліком або з надлишком).

9.2.3 Метод середніх прямокутників

Інтервал інтегрування $[a, b]$ розбивається на n рівних частин довжиною h . Значення функції $f(x)$ знаходять у точках, які є серединами часткових інтервалів [34]:

$$\xi_i = \frac{x_{i-1} + x_i}{2} = x_{i-1} + \frac{h}{2}.$$

Позначимо ці точки: $x_{i-1/2}$ ($i = 1, 2, \dots, n$). В отриманих вузлах знаходимо значення функції $f(x)$: $f(x_{1/2})$, $f(x_{3/2})$, ..., $f(x_{n/2})$. Площа під підінтегральною кривою замінюється на суму площ прямокутників [34], як це показано на рис. 9.6. При визначенні площі кожного прямокутника одна зі сторін дорівнює h , а друга – значенню функції в середині часткового інтервалу (тому і метод називають *методом середніх прямокутників*).

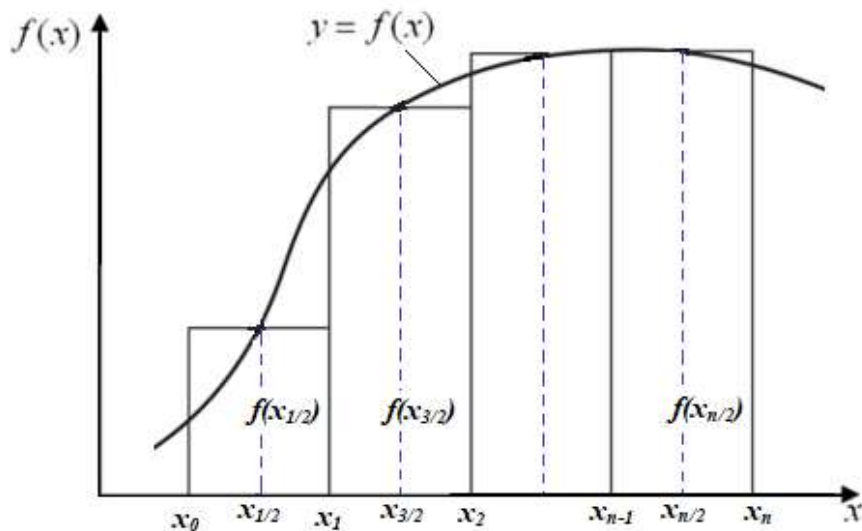


Рис. 9.6. Геометрична інтерпретація методу середніх прямокутників

Інтеграл буде обчислюватись за формулою:

$$\begin{aligned} I_{\text{ср}} = S &\approx hf(x_{1/2}) + hf(x_{3/2}) + \dots + hf(x_{n-1/2}) = \\ &= h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1/2}). \end{aligned} \quad (9.11)$$

Похибка обчислень для методу середніх прямокутників може бути

оцінена величиною залишкового члену R , що визначається за формулою [1, 11]:

$$R = \frac{h^2 \cdot (b - a)}{24} M_2, \quad (9.12)$$

де M_2 – найбільше значення другої похідної на відрізку $[a, b]$.

$$M_2 = \max_{x \in [a; b]} |f''(x)|. \quad (9.13)$$

З урахуванням формули (9.3) похибку можна обчислити за формулою:

$$R = \frac{(b - a)^3}{24n^2} M_2. \quad (9.14)$$

Якщо підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично, то формула середніх прямокутників не може бути застосована, бо в таблиці відсутні значення функції в середині інтервалів.

Примітка. За необхідності застосування формули середніх прямокутників для визначення інтеграла від табличної функції можна знайти значення функції в середині інтервалів за допомогою інтерполяційних формул [1, 11, 17-19, 34].

Приклад 9.1. Обчислити інтеграл виду

$$\int_{0,2}^{1,2} \sqrt{3x + 1} dx.$$

з використанням формул прямокутників.

Розв'язок: розіб'ємо відрізок інтегрування $[0,2; 1,2]$ на 10 частин і визначимо крок інтегрування h .

$$h = \frac{b - a}{n} = \frac{1,2 - 0,2}{10} = 0,1.$$

Визначимо значення функції у вузлових точках: 0,2; 0,3; 0,4...1,2. Також визначимо значення функції в серединах інтервалів: 0,25; 0,35; 0,45...1,15. Виконані розрахунки наведені в таблиці 9.1.

Таблиця 9.1. Результати розрахунків

i	x_i	$f(x_i)$	$x_{i-1/2}$	$f(x_{i-1/2})$
0	0,2	1,2649	0,25	1,3229
1	0,3	1,3784	0,35	1,4318
2	0,4	1,4832	0,45	1,5330
3	0,5	1,5811	0,55	1,6279
4	0,6	1,6733	0,65	1,7176
5	0,7	1,7607	0,75	1,8029
6	0,8	1,8439	0,85	1,8841
7	0,9	1,9235	0,95	1,9621
8	1	2,0000	1,05	2,0372
9	1,1	2,0736	1,15	2,1095
10	1,2	2,1448		

Знайдемо наближені значення інтеграла за методом прямокутників:

1) метод лівих прямокутників;

$$\begin{aligned}
 I_{\text{л}} &\approx hf(x_0) + hf(x_1) + \dots + hf(x_{n-1}) = h[f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1})] = \\
 &= 0,1[1,2649 + 1,3784 + 1,4832 + 1,5811 + 1,6733 + 1,7607 + \\
 &\quad + 1,8439 + 1,9235 + 2,0000 + 2,0736] = 1,6983.
 \end{aligned}$$

2) метод правих прямокутників;

$$\begin{aligned}
 I_{\text{п}} &\approx hf(x_1) + hf(x_2) + \dots + hf(x_n) = h[f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_n)] = \\
 &= 0,1[1,3784 + 1,4832 + 1,5811 + 1,6733 + 1,7607 + 1,8439 + \\
 &\quad + 1,9235 + 2,0000 + 2,0736 + 2,1448] = 1,7863.
 \end{aligned}$$

3) метод середніх прямокутників.

$$\begin{aligned}
 I_{\text{ср}} &\approx hf\left(x_{1/2}\right) + hf\left(x_{3/2}\right) + \dots + hf\left(x_{n-1/2}\right) = \\
 &= h\left[f\left(x_{1/2}\right) + f\left(x_{3/2}\right) + \dots + f\left(x_{n-1/2}\right)\right] = \\
 &= [1,3229 + 1,4318 + 1,5330 + 1,6279 + 1,7176 + \\
 &\quad + 1,8029 + 1,8841 + 1,9621 + 2,0372 + 2,1095] = 1,7429.
 \end{aligned}$$

Обчислимо для порівняння цей інтеграл за формулою Ньютона-Лейбніца:

$$\int_{0,2}^{1,2} \sqrt{3x+1} dx = \frac{2}{9} \cdot (3x+1)^{3/2} \Big|_{0,2}^{1,2} = 1,7427.$$

В результаті аналізу розрахунків видно, що метод середніх прямокутників має найбільшу точність, а формули лівих і правих прямокутників мають значно більші похибки, причому метод лівих прямокутників дає наближене значення інтеграла з недоліком, а метод правих прямокутників – з надлишком [1, 11, 17-19, 34].

Знайдемо залишкові члени (похибки) методів.

1) метод лівих (правих) прямокутників;

Похибки обчислень за формулами лівих (правих) прямокутників обчислюються за формулами (9.5) або (9.7). Для розрахунку похибки спочатку слід визначити найбільше значення першої похідної на відрізку інтегрування – M_1 .

Перша похідна від функції $f(x) = \sqrt{3x+1}$ матиме вигляд:

$$f'(x) = \frac{3}{2}(3x+1)^{-1/2}.$$

Найбільше значення першої похідної на відрізку інтегрування $[0,2; 1,2]$ становитиме:

$$M_1 = \max_{x \in [0,2; 1,2]} \left| \frac{3}{2}(3x+1)^{-1/2} \right| = 0,3108.$$

Похибки обчислень за формулами лівих (правих) прямокутників:

$$R = \frac{h \cdot (b-a)}{2} M_1 = \frac{0,1 \cdot (1,2 - 0,2)}{2} \cdot 0,3108 = 0,0155.$$

2) метод середніх прямокутників.

Похибка обчислень за формулою середніх прямокутників обчислюються за формулами (9.12) або (9.14). Для розрахунку похибки спочатку слід визначити найбільше значення другої похідної на відрізку інтегрування – M_2 . Знайдемо другу похідну:

$$f''(x) = \frac{9}{4}(3x + 1)^{-3/2}.$$

Найбільше значення другої похідної на відрізку інтегрування $[0,2; 1,2]$ становитиме:

$$M_2 = \max_{x \in [0,2; 1,2]} \left| \frac{9}{4}(3x + 1)^{-3/2} \right| = 0,0450.$$

Похибка обчислень за формулою середніх прямокутників:

$$R = \frac{h^2 \cdot (b - a)}{24} M_2 = \frac{0,1^2 \cdot (1,2 - 0,2)}{24} 0,0450 = 1,877 \cdot 10^{-5}.$$

Приклад 9.2. Обчислити значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ за методом лівих прямокутників, де $f(x)$ – таблична функція виду:

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
y	1,2	2,3	3,5	4,9	6,1	7,7	9,2	11

Розв’язок: оскільки підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично, то для визначення значення інтеграла скористаємося формулою (9.8):

$$\int_a^b f(x)dx \approx h(y_0 + y_1 + \dots + y_{n-1}) \approx 0,1 \cdot (1,2 + 2,3 + 3,5 + 4,9 + 6,1 + 7,7 + 9,2) = 3,49.$$

Отже, значення визначеного інтеграла від заданої табличної функції буде становити 3,49.

Примітка. Формули прямокутників дуже зручні для програмування. Рекомендації з програмної реалізації методів лівих, правих та середніх прямокутників наведені в розділі 15.

9.3 МЕТОД ТРАПЕЦІЙ

Метод трапецій – метод чисельного інтегрування функції однієї змінної, який полягає у заміні підінтегральної функції поліномом першого ступеня для кожного елементарного відрізка [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 34, 39].

Метод передбачає розбиття відрізка інтегрування $[a, b]$ на n рівних частин довжиною h , і на кожному з часткових відрізків заміну підінтегральної функція прямою. Геометрична інтерпретація методу (рис. 9.7) зводиться до знаходження визначеного інтеграла, як суми площ n прямокутних трапецій, висоти яких дорівнюють довжині інтервалу (h), а основи збігаються зі значеннями функції $f(x)$ у вузлових точках.

При цьому площа трапеції на кожному відрізку визначається за формулою (площа елементарної трапеції дорівнює напівсумі основ, помноженої на висоту) [1, 11, 17-19, 34]:

$$S_i = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} (x_{i+1} - x_i) = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h.$$

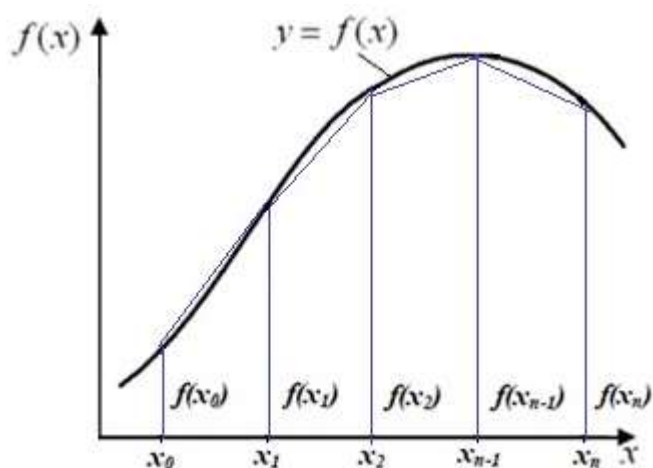


Рис. 9.7. Геометрична інтерпретація методу трапецій

Тоді приблизне значення інтеграла на i відрізку буде дорівнювати:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} h.$$

На всьому відрізку інтегрування $[a, b]$ наближене значення інтеграла буде дорівнювати сумі площ всіх n прямолінійних трапецій:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2}h + \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2}h + \dots + \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}h.$$

Формула трапецій в загальному вигляді матиме вигляд:

$$\begin{aligned} I_{TR} &= \int_a^b f(x)dx \\ &\approx h \left[\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) \right] \approx \quad (9.15) \\ &\approx h \left[\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right]. \end{aligned}$$

Похибка обчислень для методу трапецій може бути оцінена величиною залишкового члену R , що визначається за формулою:

$$R = \frac{h^2 \cdot (b - a)}{12} M_2, \quad (9.16)$$

де M_2 – найбільше значення другої похідної на відрізку $[a, b]$.

$$M_2 = \max_{x \in [a; b]} |f''(x)|. \quad (9.17)$$

З урахуванням формули (9.3) похибку можна обчислити за формулою:

$$R = \frac{(b - a)^3}{12n^2} M_2, \quad (9.18)$$

Якщо порівняти формули для визначення похибки методу трапецій (9.16) з формулою для визначення похибки методу середніх прямокутників (9.12), то видно що розрахунок за методом середніх прямокутників буде мати меншу похибку. Методи лівих /правих прямокутників мають похибку більшу за методи трапецій та середніх прямокутників [1, 11, 17-19, 34].

Якщо підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично, то формула трапецій прийме вигляд:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \left(\frac{y_0+y_n}{2} + y_1+y_2 \dots + y_{n-1} \right) \approx h \left[\frac{y_0+y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right]. \quad (9.19)$$

де y_i – значення функції у вузлових точках.

Для визначення похибки інтегрування функцій, що задані таблично замість M_2 у формули (9.16) або (9.18) слід підставити модуль найбільшого значення відношення скінченних різниць другого порядку $\Delta^2 y / \Delta x^2$.

З урахуванням того, що $\Delta x = h$, M_2 матиме вигляд:

$$M_2 = \frac{\max |\Delta^2 y|}{h^2}.$$

В результаті формула (9.16) для таблично заданої функції матиме вигляд:

$$R = \frac{(b-a)}{12} \max |\Delta^2 y|, \quad (9.20)$$

де $\max |\Delta^2 y|$ – найбільше значення модуля скінченних різниць 2-го порядку.

Формулу (9.20) можна також використовувати і тоді, коли функція $f(x)$ має аналітичний вигляд. Це дозволить уникнути громіздких обчислень другої похідної $f''(x)$.

При практичних розрахунках для визначення R також використовують формулу [1, 11, 17-19]:

$$R = -\frac{(b-a)}{12} \overline{\Delta^2 y}, \quad (9.21)$$

де $\overline{\Delta^2 y}$ – середнє значення скінченних різниць 2 – го порядку.

Приклад 9.3. Обчислити інтеграл виду

$$\int_{0,2}^{1,2} \sqrt{3x+1} dx$$

з використанням формули трапецій.

Розв'язок: аналогічно прикладу 9.1, розіб'ємо відрізок інтегрування $[0,2; 1,2]$ на 10 частин і визначимо крок інтегрування h .

$$h = \frac{b - a}{n} = \frac{1,2 - 0,2}{10} = 0,1.$$

Визначимо значення функції у вузлових точках: 0,2; 0,3; 0,4...1,2. Виконані розрахунки наведені в таблиці 9.2.

Таблиця 9.2. Результати розрахунків

i	x_i	$f(x_i)$
0	0,2	1,2649
1	0,3	1,3784
2	0,4	1,4832
3	0,5	1,5811
4	0,6	1,6733
5	0,7	1,7607
6	0,8	1,8439
7	0,9	1,9235
8	1,0	2,0000
9	1,1	2,0736
10	1,2	2,1448

Знайдемо наближені значення інтеграла за методом трапецій:

$$I_{TR} = \int_a^b f(x)dx \approx h \left[\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) \right],$$

$$I_{TR} \approx 0,1 \cdot \left[\frac{1,2649 + 2,1448}{2} + 1,3784 + 1,4832 + 1,5811 + 1,6733 + \right. \\ \left. + 1,7607 + 1,8439 + 1,9235 + 2,000 + 2,0736 \right] = 1,7422.$$

Точне значення інтеграла, що обчислене в прикладі 9.1 за формулою Ньютона-Лейбніца дорівнює 1,7427, а значення, що визначене за методом середніх прямокутників дорівнює 1,7429.

Проаналізувавши результати, бачимо, що метод трапецій є достатньо точним, але має нижчу точність за метод середніх прямокутників.

Приклад 9.4. Обчислити значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ та похибку

інтегрування за методом трапецій, де $f(x)$ – таблична функція виду:

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
y	1,2	2,3	3,5	4,9	6,1	7,7	9,2	11

Розв'язок: оскільки підінтегральна функція $f(x)$ задана таблично, то для визначення значення інтеграла скористаємося формулою (9.19):

$$I_{tr} \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right),$$

$$I_{tr} \approx 0,1 \cdot \left(\frac{1,2 + 11}{2} + 2,3 + 3,5 + 4,9 + 6,1 + 7,7 + 9,2 \right) = 3,98.$$

Значення похибки визначення значення інтеграла знайдемо за формулою (9.20): $R = \frac{(b-a)}{12} \max |\Delta^2 y|$.

Складемо таблицю скінченних різниць (до різниць другого порядку):

Таблиця.9.3. Скінченні різниці

x	y	Δy	$\Delta^2 y$
0,1	1,2	1,1	0,1
0,2	2,3	1,2	0,2
0,3	3,5	1,4	-0,2
0,4	4,9	1,2	0,4
0,5	6,1	1,6	-0,1
0,6	7,7	1,5	0,3
0,7	9,2	1,8	
0,8	11		

Як видно з таблиці 9.3 – найбільше значення модуля скінченних різниць 2-го порядку $\max |\Delta^2 y|$ порядку становить 0,4.

Тоді похибка:

$$R = \frac{(b-a)}{12} \max |\Delta^2 y| = \frac{(0,8 - 0,1)}{12} \cdot 0,4 = 0,0233.$$

Примітка. Формула трапецій дуже зручна для програмування. Рекомендації з програмної реалізації методу трапецій наведені в розділі

9.4 МЕТОД СІМПСОНА (МЕТОД ПАРАБОЛ)

Метод Сімпсона – метод чисельного інтегрування функції однієї змінної, який полягає у заміні підінтегральної функції $f(x)$ поліномом другого ступеня для кожної пари елементарних відрізків (тому для інтерполяції функції $f(x)$ на здвоєному відрізку необхідно три точки) [1, 11, 17-19, 34]. Тоді, якщо для кожної пари відрізків побудувати многочлен другого ступеня, а потім проінтегрувати і скористатися властивістю адитивності інтеграла, то отримаємо *формулу Сімпсона*.

Метод Сімпсона передбачає розбиття відрізка інтегрування $[a, b]$ на *парну* кількість n рівних частин довжиною h , і на кожній парі часткових відрізків заміну підінтегральної функції поліномом другого ступеня (параболою) [1, 11, 17-19]. Геометрично це означає заміну графіка функції $f(x)$ параболою $y = P_2(x)$, яка проходить через два відрізки (рис. 9.8-а). Через це, метод часто називають методом парабол. Геометрична інтерпретація методу зводиться до знаходження визначеного інтеграла, як суми площ криволінійних трапецій, що обмежені квадратичною параболою (площа однієї з яких трапецій на здвоєному відрізку $[x_0, x_2]$ зафарбована на рис. 9.8-б). Отже, площу криволінійної трапеції наближено замінюємо на суму $n/2$ площ під параболою.

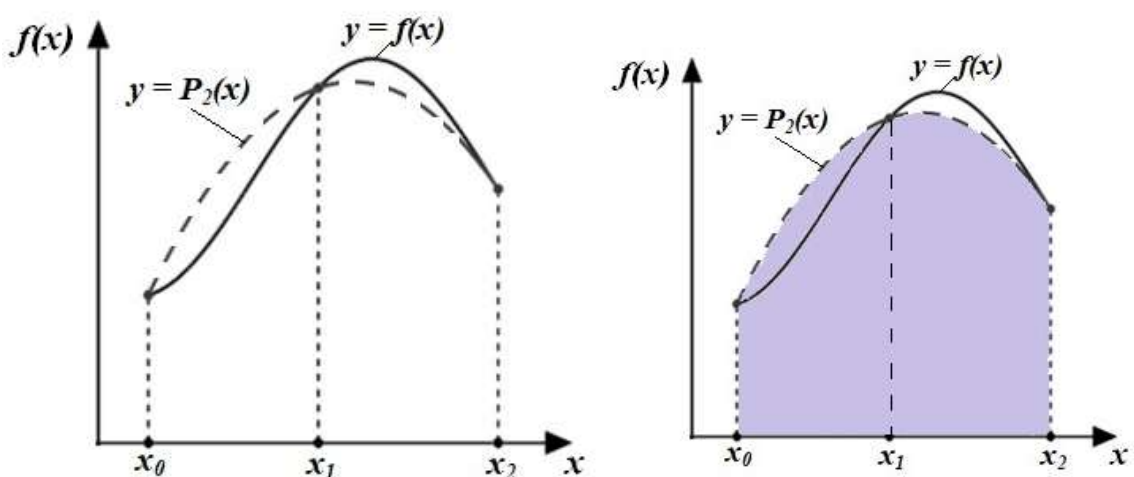


Рис. 9.8. Геометрична інтерпретація методу Сімпсона: а – заміна графіка функції $f(x)$ параболою $y = P_2(x)$; б – шукана площа криволінійної трапеції за методом Сімпсона

Знайдемо площу криволінійної трапеції, що обмежена квадратичною

параболою на здвоєному відрізку $[x_0, x_2]$.

$$S_1 = \int_{x_0}^{x_2} P_2(x) dx,$$

$$\text{де } P_2(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1).$$

Тоді

$$\int_{x_0}^{x_2} [y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1)] dx = \frac{h}{3} [y_2 + 4y_1 + y_0].$$

Аналогічно можна знайти

$$S_2 = \int_{x_2}^{x_4} P_2(x) dx = \frac{h}{3} [y_4 + 4y_3 + y_2],$$

а також площі на всіх здвоєних інтервалах.

Остаточню шукану площу криволінійної трапеції становитиме:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b P_2(x) dx + \int_{x_0}^{x_2} P_2(x) dx + \int_{x_2}^{x_4} P_2(x) dx + \\ &\dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} P_2(x) dx = \frac{h}{3} [y_2 + 4y_1 + y_0] + \frac{h}{3} [y_4 + 4y_3 + y_2] + \dots + \frac{h}{3} [y_n + \\ &4y_{n-1} + y_{n-2}] = \frac{h}{3} [y_0 + y_n + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + \\ &y_{n-2})]. \end{aligned}$$

Отже, формула Сімпсона матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \frac{h}{3} [y_0 + y_n + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + \\ &+ 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2})]. \end{aligned} \tag{9.22}$$

Похибка обчислень для методу Сімпсона може бути оцінена величиною залишкового члену R , що визначається за формулою:

$$R = \frac{h^4 \cdot (b - a)}{180} M_4, \quad (9.23)$$

де M_4 – найбільше значення четвертої похідної на відрізку $[a, b]$.

$$M_4 = \max_{x \in [a; b]} |f^{(4)}(x)|. \quad (9.24)$$

З урахуванням формули (9.3) похибку можна обчислити за формулою:

$$R = \frac{(b - a)^5}{180n^4} M_4. \quad (9.25)$$

Якщо порівняти формули для визначення похибки методу трапецій (9.16) з формулою для визначення похибки методу Сімпсона (9.25), то видно, що розрахунок за методом Сімпсона буде мати меншу похибку.

Для визначення похибки інтегрування функцій, що задані таблично замість M_4 у формули (9.22) або (9.24) слід підставити модуль найбільшого значення відношення скінченних різниць четвертого порядку $\Delta^4 y / \Delta x^4$.

З урахуванням того, що $\Delta x = h$, M_4 матиме вигляд:

$$M_4 = \frac{\max |\Delta^4 y|}{h^4}.$$

В результаті формула (9.16) для таблично заданої функції матиме вигляд:

$$R = \frac{(b - a)}{180} \max |\Delta^4 y|, \quad (9.26)$$

де $\max |\Delta^4 y|$ – найбільше значення модуля скінченних різниць 4-го порядку.

Формулу (9.26) можна також використовувати і тоді, коли функція $f(x)$ має аналітичний вигляд. Це дозволить уникнути громіздких обчислень четвертої похідної $f^{(4)}(x)$.

При практичних розрахунках для визначення R також використовують формулу:

$$R = -\frac{(b-a)}{180} \overline{\Delta^4 y}, \quad (9.27)$$

де $\overline{\Delta^4 y}$ – середнє значення скінченних різниць 4 – го порядку.

Приклад 9.5. Обчислити інтеграл виду

$$\int_{0,2}^{1,2} \sqrt{3x+1} dx$$

з використанням формули Сімпсона (парабол).

Розв'язок: аналогічно прикладу 9.1, розіб'ємо відрізок інтегрування $[0,2; 1,2]$ на 10 частин і визначимо крок інтегрування h .

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{1,2-0,2}{10} = 0,1.$$

Визначимо значення функції y у вузлових точках: 0,2; 0,3; 0,4...1,2. Розрахунки виконаємо в MS Excel і результати зведемо в таблицю.

Таблиця 9.4. Результати розрахунків

i	x_i	$f(x_i)$
0	0,2	1,2649
1	0,3	1,3784
2	0,4	1,4832
3	0,5	1,5811
4	0,6	1,6733
5	0,7	1,7607
6	0,8	1,8439
7	0,9	1,9235
8	1	2,0000
9	1,1	2,0736
10	1,2	2,1448

Знайдемо наближені значення інтеграла за методом Сімпсона:

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

$$I_{RAR} \approx 0,1 \cdot [1,2649 + 2,1448 + 4 \cdot (1,3784 + 1,5811 + 1,7607 + 1,9235 + 2,0736) + 2 \cdot (1,4832 + 1,6733 + 1,8439 + 2,000)] = 1,74267.$$

Точне значення інтеграла, що обчислене в прикладі 9.1 за формулою Ньютона-Лейбніца дорівнює 1,7427, а значення, що визначене за методом Сімпсона, дорівнює 1,74267.

Проаналізувавши результати (див. приклади 9.1, 9.3 та 9.5), бачимо, що метод Сімпсона дає найбільшу точність при обчисленні значення інтеграла.

Приклад 9.6. Обчислити значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ та похибку інтегрування за методом Сімпсона, де $f(x)$ – таблична функція виду:

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
y	1,5	2,9	4,9	6,3	7,7	7,9	7,5	7,1	6,9

Розв’язок: оскільки метод Сімпсона передбачає розбиття відрізка інтегрування $[a, b]$ на парну кількість n рівних частин довжиною h , то перед виконанням розрахунку для таблично заданої функції потрібно перевірити чи парним числом є значення n . У відповідності з формулою (9.3) розрахуємо n :

$$n = \frac{b - a}{h} = \frac{0,9 - 0,1}{0,1} = 8.$$

Значення n є парним числом. Для обчислення значення інтеграла використаємо формулу (9.21):

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

Тоді:

$$I_{RAR} \approx 0,1 \cdot [1,5 + 6,9 + 4 \cdot (2,9 + 6,3 + 7,9 + 7,1) + 2 \cdot (4,9 + 7,7 + 7,5)] = 4,847.$$

Значення похибки визначення значення інтеграла знайдемо за формулою

$$(9.26): R = \frac{(b-a)}{180} \max|\Delta^4 y|.$$

Складемо таблицю скінченних різниць (до різниць четвертого порядку):

Таблиця 9.5. Скінченні різниці

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
0,1	1,5	1,4	0,6	-1,2	1,8
0,2	2,9	2	-0,6	0,6	-1,8
0,3	4,9	1,4	0	-1,2	1,8
0,4	6,3	1,4	-1,2	0,6	0
0,5	7,7	0,2	-0,6	0,6	-0,4
0,6	7,9	-0,4	0	0,2	
0,7	7,5	-0,4	0,2		
0,8	7,1	-0,2			
0,9	6,9				

Як видно з таблиці 9.5 – найбільше значення модуля скінченних різниць четвертого порядку $\max|\Delta^4 y|$ порядку становить 1,8.

Тоді:

$$R = \frac{(b-a)}{180} \max|\Delta^4 y| = \frac{(0,9-0,1)}{180} \cdot 1,8 = 0,008.$$

Примітка. Формула Сімпсона (парабол) дуже зручна для програмування [6-8, 11, 14, 15, 31]. Рекомендації з програмної реалізації методу Сімпсона наведені в розділі 15.

9.5 ОБЧИСЛЕННЯ ІНТЕГРАЛА З ЗАДАНОЮ ТОЧНІСТЮ (ПОДВІЙНИЙ ПЕРЕРАХУНОК, ПРАВИЛО РУНГЕ)

При необхідності обчислення інтеграла з заданою точністю потрібно визначити таке значення n , при якому похибки інтегрування (залишкові члени), що обчислюються за формулами (9.5) або (9.7) для методів лівих/правих прямокутників, (9.12) або (9.14) для методу середніх прямокутників, (9.16) або (9.18) для методу трапецій, (9.22) або (9.24) для методу Сімпсона були б менше заданої точності обчислень [34]. Але тоді потрібно перед визначенням n оцінити максимальні значення модуля похідних на відрізку $[a, b]$: першого порядку для методів лівих/правих прямокутників,

другого порядку для методів середніх прямокутників та трапецій та четвертого порядку для методу Сімпсона. Це нерідко приводить до громіздких обчислень або взагалі неможливе. Тому для обчислення інтеграла з заданою точністю ε використовують правило Рунге (подвоєння кроку), яке передбачає такий алгоритм обчислення інтеграла:

1. Задається початкове значення n і обчислюється значення інтеграла I_n за обраним методом розрахунку (відрізок $[a, b]$ розбивають на n частин і проводять обчислення з кроком h).

2. Подвоюють число n і обчислюється значення інтеграла I_{2n} за обраним методом розрахунку (відрізок $[a, b]$ розбивають на $2n$ частин і проводять обчислення з кроком $h/2$).

3. Якщо $|I_{2n} - I_n| \leq \varepsilon$, то необхідна точність досягнута і похибка інтеграла I_{2n} не перевищує число:

$$\Delta \approx \frac{|I_{2n} - I_n|}{2^p - 1}, \quad (9.28)$$

де p – порядок точності використаної формули ($p=1$ для методів лівих/правих прямокутників, $p=2$ для методів середніх прямокутників та трапецій й $p=4$ для методу Сімпсона).

4. Якщо умова $|I_{2n} - I_n| \leq \varepsilon$ не виконується, то необхідна точність не досягнута. Знову подвоюють кількість розбиттів (відрізок $[a, b]$ розбивають на $4n$ частин і проводять обчислення з кроком $h/4$). Виконують перевірку $|I_{4n} - I_{2n}| \leq \varepsilon$. При виконанні умови процес обчислення закінчують, а в іншому випадку знову подвоюють кількість розбиттів. Процедuru повторюють до виконання умови досягнення точності.

Примітка. Приблизне значення початкового значення n можна обрати таким чином [1, 11, 17-19]. З урахуванням формули (9.3) значення n обчислюється:

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

а крок h можна обчислити з виразу $h \approx \sqrt[p]{\varepsilon}$.

Приклад 9.7. Обчислити значення інтеграла $\int_{1,6}^{2,4} \frac{2x^2+12x+1}{\sqrt{x}+2} dx$ за методом трапецій із заданою точністю $\varepsilon = 0,005$.

Розв'язок: в якості початкового кроку можна прийняти $h \approx \sqrt[2]{\varepsilon}$ ($h \approx 0,0707$).

Оскільки крок інтегрування визначається за формулою: $h=(b-a)/n$, то з урахуванням цього знайдемо приблизне значення n :

$$n=(b-a)/h=(2,4-1,6)/0,0707=11,3.$$

Оберемо $n=10$ і визначимо крок: $h=(b-a)/n=(2,4-1,6)/10=0,08$.

Підготуємо табличну функцію для розрахунку:

x	y
1,60	7,7552
1,68	8,1322
1,76	8,5116
1,84	8,8936
1,92	9,2782
2,00	9,6655
2,08	10,0554
2,16	10,4480
2,24	10,8433
2,32	11,2413
2,40	11,6421

Скористаємось формулою трапецій:

$$I_{tr} \approx h \left(\frac{y_0+y_n}{2} + y_1+y_2 \dots + y_{n-1} \right) \quad (h=0,08).$$

Знайдемо значення інтеграла при $n=10$:

$$\begin{aligned} I_{tr} &= 0,08/2 [7,7552 + 11,6421 + 2(8,1322 + \\ &+ 8,5116 + 8,8936 + 9,2782 + 9,6655 + \\ &+ 10,0554 + 10,4480 + 10,8433 + \\ &+ 11,2413)] = 7,741412. \end{aligned}$$

Збільшимо вдвічі кількість інтервалів: $n=20$. Знайдемо новий крок: $h=(b-a)/n=(2,4-1,6)/20=0,04$. Підготуємо табличну функцію для розрахунку:

x	y	x	y	x	y
1,60	7,7552	1,88	9,0856	2,16	10,448
1,64	7,9434	1,92	9,2782	2,20	10,6453
1,68	8,1322	1,96	9,4715	2,24	10,8433
1,72	8,3216	2,00	9,6655	2,28	11,0419
1,76	8,5116	2,04	9,8601	2,32	11,2413
1,80	8,7023	2,08	10,0554	2,36	11,4413
1,84	8,8936	2,12	10,2513	2,40	11,6421

Знайдемо значення інтеграла при $n=20$:

$$I_{\text{тр}2n} = 0,04/2 [7,7552 + 11,6421 + 2(7,9434 + \dots + 11,4413)] = 7,741279.$$

Перевіримо умову $|I_{2n} - I_n| \leq \varepsilon$:

$$|7,741279 - 7,741412| = 0,000132 \leq 0,005.$$

Як видно, різниця між отриманими значеннями інтегралів менша за задану точність. Таким чином, отримане значення $I_{\text{тр}2n} = 7,741279$ визначено із заданою точністю.

9.6 ПОРІВНЯННЯ МЕТОДІВ ВИЗНАЧЕННЯ ІНТЕГРАЛА

Точність методу Сімпсона (парабол) вища за точність методу середніх прямокутників і трапецій для заданого значення n і значно вища за точність методів лівих/правих прямокутників [1, 11, 17-19, 34]. При цьому складність обчислень за методом Сімпсона практично не відрізняється від інших. Для лінійних підінтегральних функцій метод трапецій має найвищу точність. Методи легко програмуються, що значно прискорює процес обчислення визначеного інтеграла. Точність розрахунків можна підвищити зменшенням кроку інтегрування [17-19].

Для розрахунків значення визначеного інтеграла для функцій, що задані таблично, метод середніх прямокутників не застосовується. При використанні методу Сімпсона для розрахунку визначеного інтеграла з табличними підінтегральними функціями слід впевнитись, що n – парне число.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 9

1. Сформулюйте постановку задачі знаходження визначеного інтеграла.
2. Сформулюйте геометричний сенс знаходження визначеного інтеграла.
3. Сформулюйте ідею методу трапецій та поясніть його геометричну інтерпретацію.

4. Сформулюйте ідею методу парабол та поясніть його геометричну інтерпретацію.
5. Сформулюйте ідею методів прямокутників та поясніть його геометричну інтерпретацію.
6. Як визначити похибки формул лівих/правих прямокутників при таблично заданій функції?
7. Як визначити похибку формули трапецій?
8. Як визначити похибку формули парабол?
9. Як досягнути задану точність обчислень інтеграла при використанні методу подвійного перерахунку.
10. Який з розглянутих методів чисельного інтегрування має більшу точність?
11. Чи впливає значення кроку інтегрування на точність обчислень за формулами чисельного інтегрування?
12. Чи можна застосувати формули трапецій чи парабол при нерівновіддалених значеннях аргументу?
13. Чи можна застосувати формулу парабол для інтегрування таблично заданої функції, розбитої на 17 інтервалів? Аргументувати відповідь.
14. Яка з відомих вам формул прямокутників має найбільшу точність обчислень?
15. Обчисліть визначений інтеграл $\int_{0,1}^{1,1} \frac{2x}{x^2+1} dx$ за формулою Сімпсона і оцініть похибку обчислень, поклавши $n = 10$.
16. Обчисліть визначений інтеграл $\int_{1,2}^{2,0} \frac{2x^2+1}{\sqrt{x}+2} dx$ за формулою Сімпсона і оцініть похибку обчислень, поклавши $n = 8$.
17. Обчисліть визначений інтеграл $\int_0^1 \ln(x^2 + 1) dx$ за формулами трапецій і Сімпсона, поклавши $n = 10$. Порівняйте результати.
18. Обчисліть визначений інтеграл $\int_{1,2}^{2,2} \frac{x^2+8x+1}{\sqrt{x}+1} dx$ за формулами трапецій і середніх прямокутників, поклавши $n = 10$. Порівняйте результати.

19. Обчисліть визначений інтеграл $\int_0^1 x\sqrt{(x^2 + 3)} dx$ за формулами лівих і правих прямокутників, поклавши $n = 10$. Порівняйте результати.
20. В результаті досліджень отримано дані щодо теплоємності (C_p) вуглекислого газу за різних значень температури (T):

T, K	375	420	465	510	555	600	645	690
$C_p, \frac{Дж}{моль \cdot K}$	41,098	42,81	44,411	45,907	47,302	48,603	49,815	50,943
T, K	735	780	825	870	915	960	1005	
$C_p, \frac{Дж}{моль \cdot K}$	51,993	52,971	53,881	54,729	55,521	56,262	56,958	

Відомо, що значення ентальпії (ΔH), яке відповідає нагріванню n молей газу від температури T_1 до температури T_2 , можна знайти шляхом інтегрування даних щодо теплоємності при постійному тиску в заданому діапазоні температур:

$$\Delta H = n \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_p(T) dT.$$

Обчисліть за методами трапецій та парабол ентальпію одного моля CO_2 для діапазону температур, наведеного в таблиці вище. Обчисліть похибки формул трапецій і парабол для даного випадку. Порівняйте результати інтегрування.

21. За результатами опрацювання (апроксимації) експериментальних даних щодо зміни теплоємності (C_p) азоту, який піддавався нагріванню при сталому тиску в інтервалі температур (T) від $T_1 = 298 K$ до $T_2 = 373 K$ отримано таку емпіричну залежність:

$$C_p(T) = -4,20 \cdot 10^{-9} T^2 + 5,23 \cdot 10^{-3} T + 27,296.$$

На основі вищенаведеної емпіричної залежності розрахувати зміну ентропії (ΔS) азоту, що піддавався нагріванню при сталому тиску в інтервалі температур від $T_1 = 298 K$ до $T_2 = 373 K$ за такою формулою:

$$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p(T)}{T} dT.$$

Для знаходження визначеного інтеграла використати:

- а) формулу Ньютона-Лейбніца (див. формулу 9.1);
- б) чисельний метод трапецій;
- в) чисельний метод парабол.

22. Досліджується процес розділення за атмосферного тиску суміші у кількості $N_0 = 200$ моль, що містить 60 % мольн. пентану та 40 % мольн. гептану. Процес розділення було призупинено після того, як було перегнано 120 моль. Потрібно визначити склад суміші, що залишилася нерозділеною, за умови, що рівноважні дані процесу – мольна частка пентану в рідкій фазі (x) та в газовій фазі (y) є такими:

x	0	0,125	0,250	0,375	0,500	0,625	0,750	0,875	1
y	0	0,474	0,700	0,816	0,887	0,939	0,971	0,984	1

Вказівка. Для розрахунку використати таке рівняння, що отримане з матеріального балансу процесу простої диференціальної дистиляції:

$$\ln \left(\frac{N_1}{N_0} \right) = \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{y - x} dx,$$

де N_0 – початкова кількість моль розділюваної суміші, N_1 – кількість моль суміші, що залишилася в резервуарі, x_0, x_1 – відповідно початкова та остаточна мольна частка пентану в рідкій фазі.

10 РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

10.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 10

Диференціальні рівняння описують *динаміку* систем [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39]. Диференціальне рівняння – це рівняння, до складу якого входить похідна від невідомої функції.

Якщо невідома функція залежить від однієї змінної, то диференціальне рівняння називають *звичайним диференціальним рівнянням* (скорочено *ЗДР*). Якщо ж невідома функція є функцією багатьох змінних, то диференціальне рівняння називають *рівнянням у частинних похідних*.

Досліджувана система може змінюватися або *в просторі* (тоді незалежну змінну найчастіше прийнято позначати символом x), або *у часі* (тоді незалежну змінну позначають символом t).

Наприклад, процес дифузії в найпростішому одновимірному випадку описується *звичайним диференціальним рівнянням* першого закону Фіка: $J = -D \frac{dC}{dx}$, де J – характеристика процесу дифузії («дифузійний потік»), D – коефіцієнт дифузії, $C = C(x)$ – концентрація речовини, x – незалежна просторова координата, $\frac{dC}{dx}$ – похідна – градієнт концентрації. Більш складний «динамічний» випадок процесу дифузії описує *диференціальне рівняння в частинних похідних* другого закону Фіка: $\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, де D – коефіцієнт дифузії, $C = C(x, t)$ – концентрація речовини, x, t – незалежні координати (відповідно, час та просторовий вимір), $\frac{\partial C}{\partial t}$ – частинна похідна першого порядку (швидкість зміни концентрації), $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ – частинна похідна другого порядку за змінною x .

Звичайні диференціальні рівняння класифікуються відповідно до їх порядку, лінійності та спеціальних додаткових умов, що супроводжують рівняння [13].

Максимальний порядок похідної невідомої функції, що входить у

диференціальне рівняння, називається *порядком диференціального рівняння* [13]. У технічній та технологічній практиці найбільш поширені диференціальні рівняння першого та другого порядку.

Звичайні диференціальні рівняння поділяють на лінійні та нелінійні [13]. Диференціальне рівняння є *лінійним*, якщо невідома функція та її похідні входять у рівняння лише у першому ступені.

Наприклад, наведене вище диференціальне рівняння першого закону Фіка є звичайним лінійним диференціальним рівнянням першого порядку.

Диференціальне рівняння є *нелінійним*, якщо воно містить нелінійні члени, наприклад, добуток шуканої функції і (або) її похідних, піднесення шуканої функції і (або) її похідних до ступеня тощо [13].

Розглянемо звичайне диференціальне рівняння першого порядку, яке розв'язано відносно похідної $y'(x)$:

$$\frac{d[y(x)]}{dx} = y'(x) = f[x, y(x)], \quad (10.1)$$

де $y(x)$ – шукана функція, яка описує зміну деякої досліджуваної системи, x – незалежна змінна, $f[x, y(x)]$ – права частина рівняння (деяка функція, яка містить $y(x)$ та x).

Найчастіше на практиці необхідно розв'язати рівняння (10.1), тобто знайти вираз $y(x)$, який задовольняє *початковій умові* (іноді вживають цей термін у множині – «початкові умови»). Початкова умова – це значення y_0 шуканої функції, відповідне певному «початковому» значенню x_0 незалежної змінної x :

$$y(x_0) = y_0. \quad (10.2)$$

Диференціальне рівняння або система рівнянь спільно з початковою умовою (для системи рівнянь – спільно з множиною початкових умов) складають *задачу Коші* (або ж *задачу з початковими умовами*).

Зауваження. Якщо спільні умови для диференціального рівняння задано не в одній початковій точці, а на певних границях розрахункового інтервалу (наприклад, на початку і в кінці інтервалу), то диференціальне рівняння разом

із такими умовами складає не задачу Коші, а *крайову задачу з граничними умовами* [1, 13], математичне формулювання та способи розв'язання якої буде розглянуто пізніше, у розділі 11.

Геометричне тлумачення задачі Коші – таке: розв'язання вказаної задачі полягає у знаходженні з множини можливих розв'язків $y = y(x, C)$ такого розв'язку $y = y(x)$, якому належить точка $A_0(x_0, y_0)$, що відповідає початковій умові (рис. 10.1).

Процес знаходження розв'язку диференціального рівняння часто називається також *інтегруванням диференціального рівняння* [1, 11, 13, 17-19].

Графічне представлення результату розв'язання ЗДР називається *сімейством інтегральних кривих*. Відповідно, графічне представлення результату розв'язання задачі Коші представляє собою *інтегральну криву*, що *проходить через дану точку* $A_0(x_0, y_0)$, яка відповідає початковим умовам (рис. 10.1).

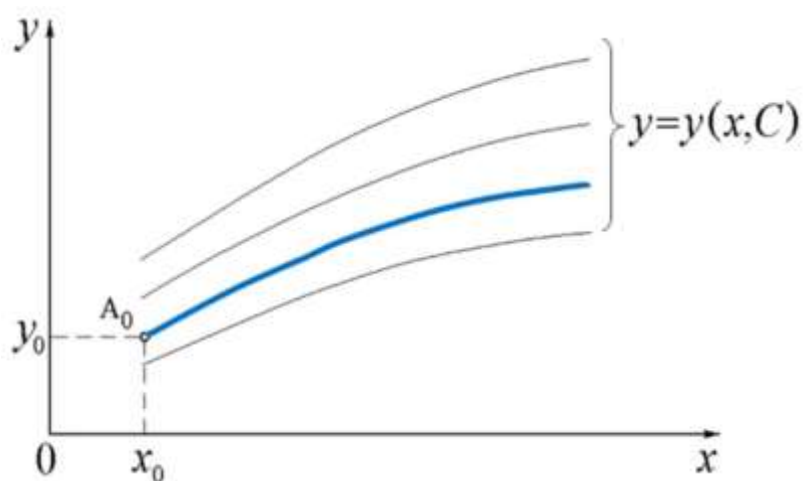
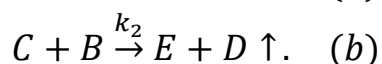
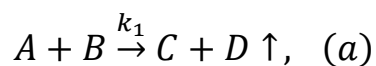


Рис. 10.1. Геометричне тлумачення задачі Коші

Приклад 10.1. В проточному хімічному реакторі протікає реакція типу



Розв'язок: якщо досліджувана послідовність хімічних реакцій відбувається з незначною зміною об'єму, то система кінетичних рівнянь (рівнянь швидкості хімічної реакції), записаних для кожного з компонентів

реакції (а), матиме вигляд:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_B^{1/2} \cdot C_A, \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_1 \cdot C_B^{1/2} \cdot C_A - k_2 \cdot C_C^{1/2} \cdot C_B^{1/2}, \\ \frac{dC_C}{dt} = k_1 \cdot C_B^{1/2} \cdot C_A - k_2 \cdot C_C^{1/2} \cdot C_B^{1/2}. \end{cases} \quad (10.3)$$

де C_A, C_B, C_C, C_d, C_E – концентрації відповідних компонентів досліджуваної системи реакцій, k_1, k_2 – константи швидкостей реакцій (а) та (b) відповідно.

Подальше вивчення процесу передбачає, що відомі значення констант швидкості k_1, k_2 , а також значення концентрацій вихідних речовин в початковий момент часу (C_{A_0}, C_{B_0}).

Система (10.3) представляє собою *систему нелінійних звичайних диференціальних рівнянь першого порядку*, які описують динамічну поведінку хімічної реакції.

Результатом розв'язання буде інформація про зміну усіх концентрацій у залежності від змінної t (часу).

У окремих випадках (якщо дослідника цікавить зміна концентрації лише одного компоненту) для опису кінетики реакції достатньо одного диференціального рівняння. Наприклад, припустимо, що цільовим продуктом реакції є компонент C . Зміна в часі концентрації цільового продукту може бути описана рівнянням:

$$\frac{dC_C}{dt} = k_1 \cdot C_B^{1/2} \cdot C_A - k_2 \cdot C_C^{1/2} \cdot C_B^{1/2}, \quad (10.4)$$

Рівняння (10.4) – це *нелінійне звичайне диференціальне рівняння першого порядку*, що описує зміну з часом концентрації цільового продукту C .

Диференціальне рівняння (10.4), так само як і систему диференціальних рівнянь (10.3) спільно з набором відповідних *початкових умов* можна розв'язати одним з аналітичних або наближених методів (чисельних, графічних) [6-8, 11, 13-15, 31]. Початковими умовами можуть бути, наприклад, концентрації речовин A, B, C, D та E в початковий момент часу $t=0$.

В задачах комп'ютерного розрахунку найчастіше застосовуються чисельні методи розв'язання ЗДР, оскільки прийняті в математичному аналізі традиційні методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь в квадратурах досить важко реалізувати у вигляді комп'ютерної програми, а в деяких випадках – використання традиційних методів взагалі неможливе.

10.2 ЗАГАЛЬНИЙ ПРИНЦИП РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧІ КОШІ ЧИСЕЛЬНИМИ МЕТОДАМИ. МЕТОД ЕЙЛЕРА

Нехай задано диференціальне рівняння (10.1) та початкові умови (10.2). Розв'язок задачі Коші (10.1)-(10.2) чисельними методами на заданому інтервалі інтегрування $x \in [x_0 = a; x_n = b]$ полягає у знаходженні послідовності точок $A_0(x_0, y_0), A_1(x_1, y_1), A_2(x_2, y_2), \dots, A_n(x_n, y_n)$, що наближує інтегральну криву (рис. 10.2).

Особливістю чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь (на відміну від аналітичних методів розв'язання) є застосування початкових умов задачі для «старту» процесу розв'язку.

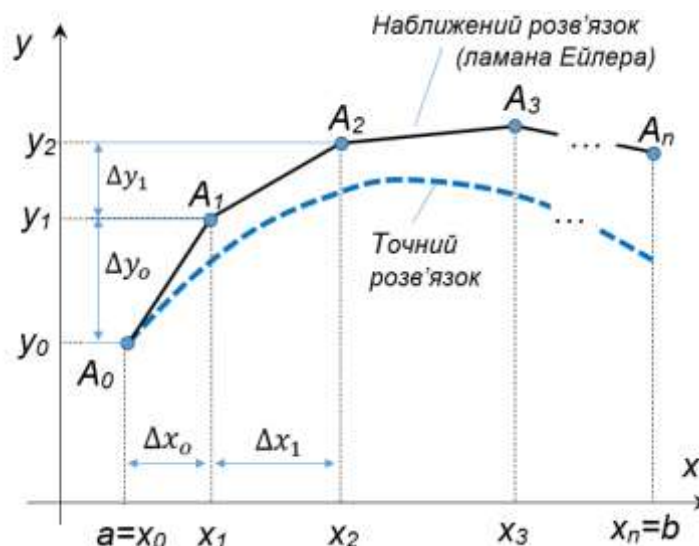


Рис. 10.2. Графічна наближеного розв'язку задачі Коші чисельними методами

Загальний алгоритм розв'язку задачі Коші (10.1)-(10.2) чисельними методами найчастіше такий [1, 11, 13, 17-19]:

1. Отримують з початкових умов задачі початкову точку розв'язку $A_0(x_0, y_0)$, тобто значення шуканої функції при $x = a = x_0$.
2. Інтервал інтегрування $[a, b]$ розбивають на n рівних частин, і

отримують точки $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2 \cdot h$, ..., $x_n = x_0 + n \cdot h$, де $h = (x_n - x_0)/n$ – деякий достатньо малий крок розрахунку, n – кількість відрізків розбиття.

3. Обчислюють приріст шуканої функції Δy_0 за формулою одного з чисельних методів і знаходять нове значення шуканої функції $y_1 = y_0 + \Delta y_0$. Таким чином стає відоме значення шуканої функції в точці $A_1(x_1, y_1)$.

4. Обчислюють приріст шуканої функції Δy_1 і знаходять нове значення шуканої функції в точці x_2 : $y_2 = y_1 + \Delta y_1$. Таким чином стає відоме значення шуканої функції в точці $A_2(x_2, y_2)$ і т. д.

Обчислення продовжують, поки не буде досягнуте останнє на заданому інтервалі інтегрування $x \in [a; b]$, тобто в точці $x_n = b$. В результаті розрахунку $y_n = y_{n-1} + \Delta y_{n-1}$ стає відома остання точка $A_n(x_n, y_n)$ шуканого розв'язку.

Зауваження 1. Іноді приріст $h_i = \Delta x_i$ значення незалежної змінної беруть *різним* для різних відрізків: $\Delta x_0 \neq \Delta x_1 \neq \dots \neq \Delta x_n$ [1, 13].

Зауваження 2. Як можна побачити, значення шуканої функції $y_1, y_2, \dots, y_n$ для відповідних значень незалежної змінної $x_1, x_2, \dots, x_n$ знаходять за рекурентним співвідношенням:

$$y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1}, i = \overline{1, \dots, n}. \quad (10.5)$$

Ламана лінія, яка сполучає точки $A_0(x_0, y_0)$, $A_1(x_1, y_1)$, $A_2(x_2, y_2)$, ..., $A_n(x_n, y_n)$, є графічним представленням результату розв'язання ЗДР чисельним методом (див. рис. 10.2). Цю ламану лінію наближеного розв'язку називають *ламаною Ейлера* (незалежно від того, яким з чисельних методів вона отримана) [1, 11, 13, 17-19].

Наближений задачі Коші може бути отриманий, зокрема, чисельним методом Ейлера. Метод Ейлера (або ж *явний* метод Ейлера) є історично найпершим із розроблених методів розв'язання задачі Коші: його було запропоновано Леонардом Ейлером. Даний метод безпосередньо базується на

математичному визначенні похідної як дотичної до графіку функції в заданій точці (рис. 10.3).

Л. Ейлер запропонував апроксимувати шукану інтегральну криву на кожному з відрізків інтегрування $[a, x_1]$, $[x_1, x_2]$, $[x_2, x_3]$, ..., $[x_{n-1}, b]$ дотичними до кривої $y(x)$, розрахованих у точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$ відповідно (рис. 10.2). Початкова точка розв'язку $A_0(x_0, y_0)$ береться з початкових умов (10.2). Нехай A_0A_1 — дотична до інтегральної кривої (тобто до кривої точного розв'язку), проведена з точки A_0 (рис. 10.3).

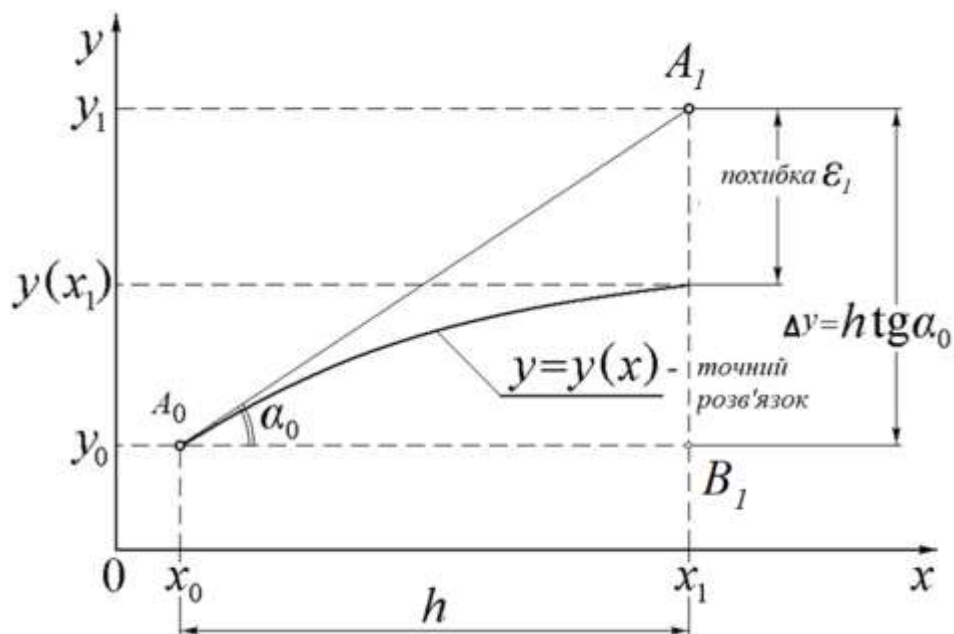


Рис. 10.3. Загальний принцип інтегрування ЗДР за методом Ейлера

Як відомо з математичного аналізу, тангенс кута нахилу дотичної дорівнює похідній функції в даній точці:

$$\frac{d[y(x_0)]}{dx} = y'(x_0) = f(x_0, y_0) = \operatorname{tg} \alpha_0.$$

Ординату y_1 точки A_1 (тобто значення приросту функції Δy_0 згідно методу Ейлера за умови $y_1 = y_0 + \Delta y_0$) можна знайти з трикутника $\Delta A_0A_1B_1$. З визначення тангенса гострого кута прямокутного трикутника витікає:

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0 = A_1B_1 = A_0B_1 \cdot \operatorname{tg} \alpha_0 = h \cdot \operatorname{tg} \alpha_0,$$

де α_0 — кут нахилу дотичної.

Тоді $\Delta y_0 = h \cdot tg \alpha_0 = h \cdot f(x_0, y_0)$. Знайдемо $y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$.

Якщо припустити, що знайдена точка $A_1(x_1, y_1)$ належить інтегральній кривій $y(x)$ (або близька до неї), то виходячи з описаних вище міркувань можна провести дотичну до кривої $y(x)$ у точці $A_1(x_1, y_1)$, розрахувати приріст $\Delta y_1 = h \cdot f(x_1, y_1)$ і т. д.

Знайдемо $y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1)$.

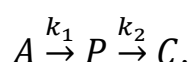
Таким чином, приріст функції у виразі (10.5) відповідно до явного методу Ейлера розраховується як $\Delta y_{i-1} = h \cdot f(x_{i-1}, y_{i-1})$, і, отже, *формула методу Ейлера* з урахуванням (10.5) набуває вигляду:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i), \quad i = \overline{0, \dots, n-1}. \quad (10.6)$$

Зауваження. Тут наведено *геометричне* обґрунтування формули методу Ейлера (10.7) [6-8, 11, 13-15, 31]. Вказану формулу можна також отримати методами математичного аналізу, шляхом розкладу розв'язку ЗДР $y(x)$ в ряд Тейлора в околі точок $x_0, x_1, \dots, x_n$ ¹.

Похибка Ейлера визначається сумою похибок $\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$ (рис. 10.3), і пропорційна величині кроку h : $\varepsilon_{\text{Ейл}} = \varepsilon(h)$.

Приклад 10.2. Досліджується процес, що протікає за схемою²:



Швидкість зміни концентрації проміжного продукту P описується кінетичним рівнянням з початковими умовами (значенням концентрації реагента A в початковий момент часу):

$$\begin{aligned} \frac{dC_P}{dt} &= k_1 C_{A_0} e^{-k_1 t} - k_2 C_P, \\ C_P(t=0) &= C_P(0) = 0. \end{aligned} \quad (10.7)$$

¹ Ascher U.M., Petzold L.R. Computer Method for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia.1998. DOI: 10.1137/1.9781611971392. p. 39

² Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. – К.: ТОВ «Фірма Періодика», 2004. – 220 с.

де C_P – поточна концентрація проміжного продукту P у момент часу t ; $k_1 = 5 \cdot 10^{-2} \text{ дм}^3 \text{моль}^{-1} \text{хв}^{-1}$ та $k_2 = 6,5 \cdot 10^{-3} \text{ дм}^3 \text{моль}^{-1} \text{хв}^{-1}$ – константи швидкості відповідно першої та другої стадії реакції; $C_{A_0} = 1$ – початкова концентрація реагента A , частки.

Необхідно визначити зміну у часі величини C_P – концентрації проміжного продукту P на протязі десяти перших хвилин від початку реакції.

Розв'язок: нехай $y = C_P$. Тоді задача (10.7) набуде вигляду:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) = 0,05e^{-0,05t} - 0,0065y,$$

$$y(0) = 0.$$

Згідно умов задачі, інтервал інтегрування $t \in [0, 10]$.

Хід розв'язання задачі Коші (10.7) чисельним методом Ейлера наведено у таблиці (див. рис. 10.4). Зокрема, значення $t_0 = 0$, $y_0 = 0$ взято з початкових умов. Задаємося кількістю точок розбиття інтервалу інтегрування $n = 10$. Тоді крок рівномірного розбиття інтервалу інтегрування складає $h = (t_n - t_0)/n = (10 - 0)/10 = 1 \text{ (хв)}$.

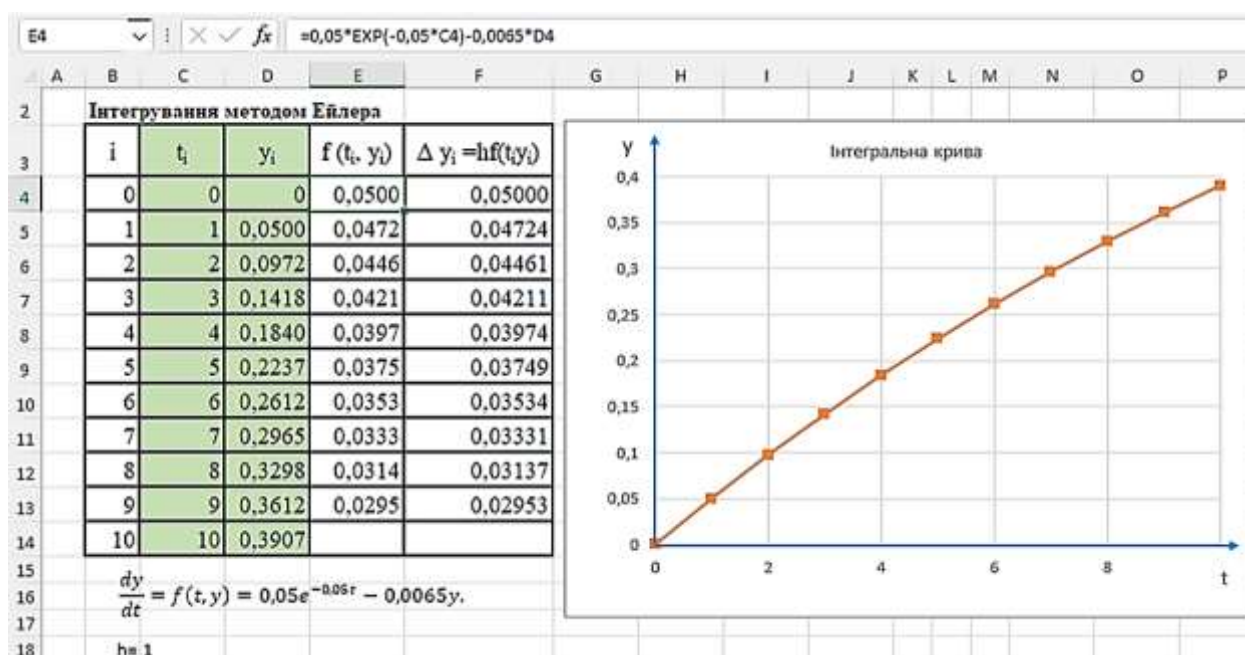


Рис. 10.4. Інтегрування задачі Коші (10.7) методом Ейлера

Знаходимо нове значення незалежної змінної $t_1 = t_0 + h = 0 + 1 = 1$.

За формулою методу Ейлера обчислюємо приріст шуканої функції $\Delta y_0 = h \cdot f(t_0, y_0) = 1 \cdot f(0, 0) = 1 \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 0} - 0,0065 \cdot 0] = 0,0500$.

При обчисленні приросту $\Delta y_0 = h \cdot f(t_0, y_0)$ використовується допоміжне значення $f(t_0, y_0)$ зі стовпчика Е.

Знаходимо нове значення шуканої функції $y_1 = y_0 + \Delta y_0 = 0 + 0,0500 = 0,0500$. Таким чином стає відома точка $A_1(t_1, y_1)$ шуканого розв'язку.

При обчисленні приросту $\Delta y_1 = h \cdot f(t_1, y_1)$ використовується допоміжне значення $f(t_1, y_1)$ зі стовпчика Е.

Після цього знаходимо нове значення незалежної змінної $t_2 = t_1 + h = 1 + 1 = 2$. За формулою методу Ейлера обчислюємо приріст шуканої функції $\Delta y_1 = 0,0472$, знаходимо нове значення шуканої функції $y_2 = 0,0972$ і т. д.

Зауваження. Розв'язком задачі є множина пар значень (t_i, y_i) , $i = 0, 1, 2, \dots, 10$, яка наближається до функціональної залежності $y = y(t)$.

Формули методу Ейлера (10.6), як і інших чисельних методів інтегрування ЗДР, можуть бути узагальнені й для розв'язання *систем диференціальних рівнянь* [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39].

10.3 ШЛЯХИ ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ. УДОСКОНАЛЕННЯ МЕТОДУ ЕЙЛЕРА

Розглянемо проблему ефективності чисельного розв'язку диференціальних рівнянь на такому прикладі. Нехай задано задачу Коші, яка складається з диференціального рівняння $\frac{dy}{dt} = f(t, y) = x + y + 1$, та початкової умови $y(0) = 0$.

Розв'яжемо дану задачу на інтервалі $[0, 2]$ методом Ейлера зі значеннями кроку інтегрування $h = 1$ та $h = 0,1$.

Для порівняння будемо використовувати аналітичний розв'язок наведеного диференціального рівняння, що має вигляд $y(x) = 2e^x - x - 2$.

Розв'язок вказаної задачі Коші чисельним методом Ейлера із різними

значеннями кроку інтегрування наведено на рис. 10.5.

Як видно з наведених на рис. 10.5 результатів розв'язку, істотним недоліком чисельного методу Ейлера є досить низька його точність, особливо в разі великих значень кроку інтегрування. При цьому похибка обчислень за методом Ейлера має тенденцію *накопичуватися* в процесі інтегрування диференційного рівняння, тобто в міру віддалення від початкової точки (x_0, y_0) може зростати розбіжність між наближеним і «істинним» розв'язком.

Як видно з рис. 10.5, очевидним способом підвищення точності розв'язання є *збільшення кількості відрізків* на інтервалі інтегрування $[a, b]$, тобто зменшення кроку інтегрування: чим менше крок розрахунку h , тим точніше ламана Ейлера описує шукану інтегральну криву. При цьому, однак, різко збільшується обсяг розрахунків.

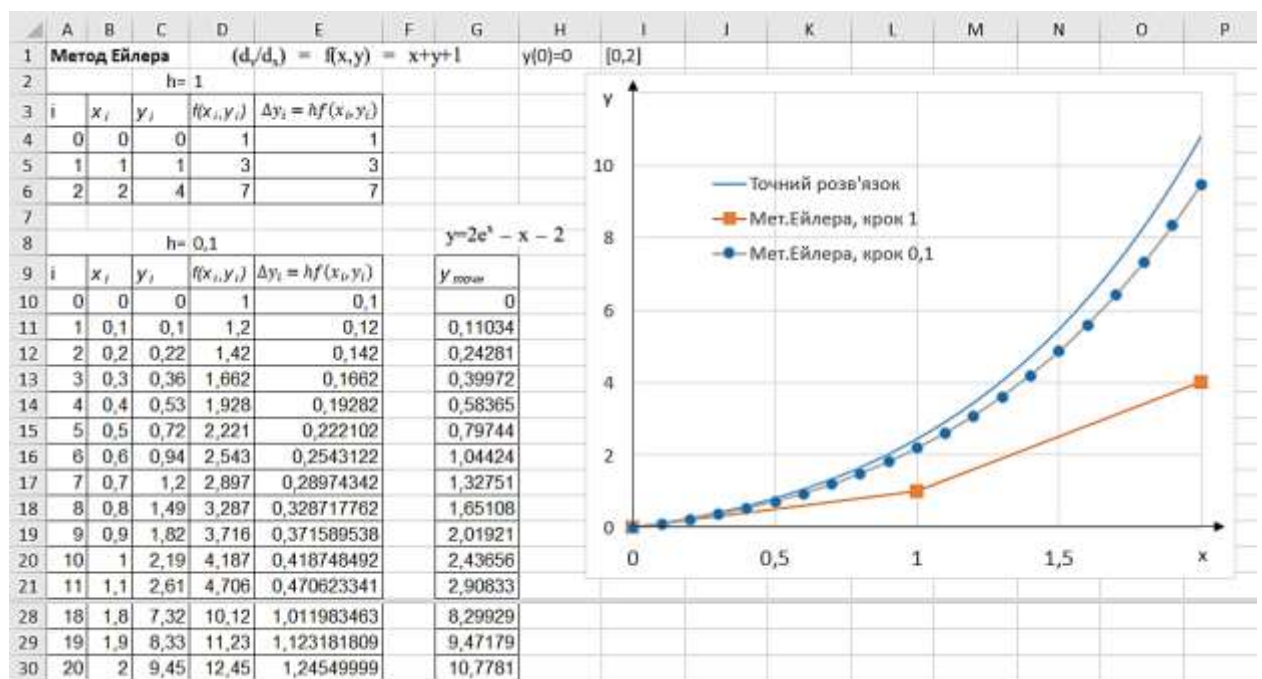


Рис. 10.5. Вплив кроку інтегрування на точність розв'язку та накопичення похибки в ході розв'язання ЗДР методом Ейлера

Як слідує з рис. 10.3, використання параметрів функції тільки у лівій (початковій) точці відрізка $[x_i, x_{i+1}]$ дає досить велику похибку. Для зменшення похибки інтегрування бажано отримати додаткову інформацію про поведінку шуканої функції на відрізку інтегрування. Для цього в удосконаленнях методу Ейлера використовуються додаткові проміжні напрямки (дотичні), які визначаються розрахунком похідної в певних

характерних точках поточного відрізка $[x_i, x_{i+1}]$ – крайні точки, середина відрізка інтегрування тощо.

Прикладами методів, що використовують описаний підхід, є удосконалений метод Ейлера (в літературі також має назву «метод середньої точки»), метод Ейлера-Коші (також відомий як «модифікований метод Ейлера»), метод «прогнозу та корекції», метод Гойна), метод Ейлера-Коші з подальшою ітераційною обробкою (або ж метод Гойна з ітераційною обробкою), метод Адамса-Башфорта тощо [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39].

Зокрема, характерною рисою *вдосконаленого методу Ейлера* (методу середньої точки) є використання для знаходження наступної точки розв'язку додаткового проміжного значення похідної *в центрі відрізка* $[x_i, x_{i+1}]$.

Під час розв'язування диференціального рівняння (10.1) з початковими умовами (10.2) за вдосконаленим методом Ейлера слід здійснити такі дії:

1. Виконати розбиття інтервалу інтегрування $[a, b]$ на n рівних частин аналогічно тому, як це виконувалося у методі Ейлера.

2. Знайти середину поточного відрізка $x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2}$.

3. Розрахувати допоміжне значення шуканої функції $y_{i+1/2}$ в середній точці поточного відрізка $x_{i+1/2}$:

$$y_{i+1/2} = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i).$$

4. Знайти значення похідної в середині поточного відрізка $y'_{i+1/2} = f(x_{i+1/2}, y_{i+1/2})$.

5. Визначити величину y для нової точки розв'язку $y_{i+1} = y_i + h y'_{i+1/2}$.

Обчислення (пп. 2-5) повторити до кінця інтервалу інтегрування $[a, b]$.

Як видно з рис. 10.6 (де наведено фрагмент розв'язку для $i = 0$), один крок вдосконаленого методу Ейлера включає два етапи. Перший етап поточного кроку за вдосконаленим методом Ейлера передбачає обчислення похідної в початковій точці A_0 розв'язку на даному відрізку, тобто визначення кута α_0 нахилу дотичної у вказаній точці A_0 . Після цього визначається ордината проміжної «опорної» точки розв'язку $A_{\text{сер}_0}$ для

$$x_{\text{сер}0} = x_{0+\frac{h}{2}} \in [x_0, x_1].$$

На другому етапі коригують розв'язок шляхом обчислення похідної в проміжній точці $A_{\text{сер}0}$ розв'язку на даному відрізку, тобто визначають кут $\alpha_{\text{сер}0}$ нахилу дотичної у вказаній точці $A_{\text{сер}0}$. Після цього визначається ордината нової точки розв'язку A_1 для $x_1 = x_{0+h} \in [x_0, x_1]$ на основі прямої A_0A_1 , проведеної з точки A_0 під кутом $\alpha_{\text{сер}0}$.

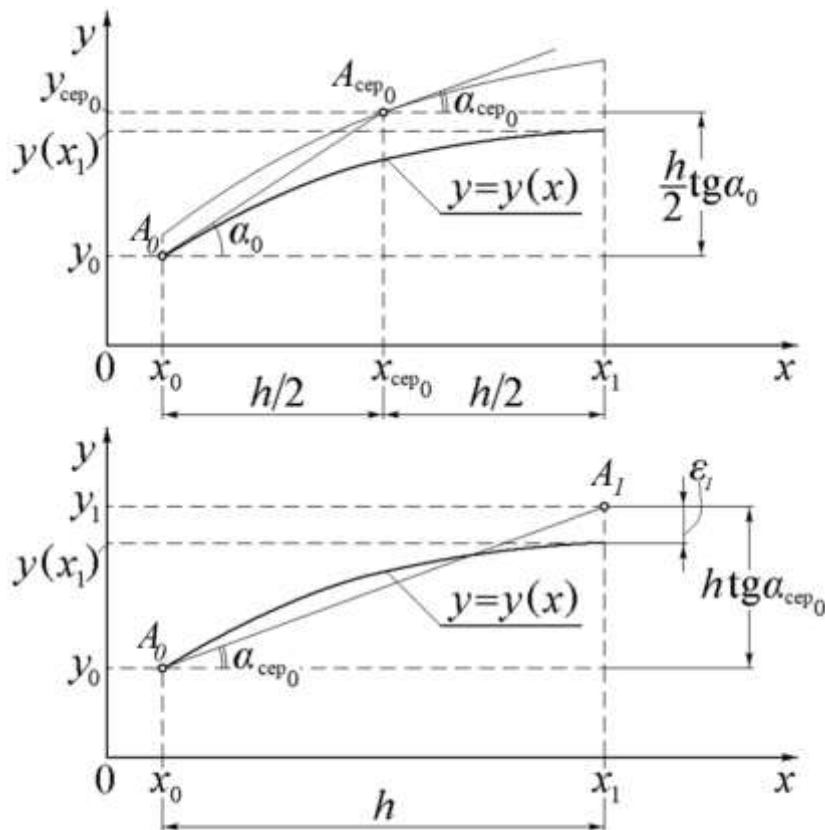


Рис. 10.6. Загальний принцип інтегрування ЗДР за вдосконаленим методом Ейлера

Похибка розв'язку за вдосконаленим методом Ейлера визначається сумою похибок ε_i , $i = 1, 2, \dots, n$ (рис. 10.6), і пропорційна величині h^2 : $\varepsilon_{\text{Вд.Ейл.}} = \varepsilon(h^2)$.

Приклад 10.3. Розв'язати задачу Коші з прикладу 10.2 вдосконаленим методом Ейлера.

Розв'язок: згідно початкових умов, $t_0 = 0, y_0 = 0$. Після цього задаємося кількістю точок розбиття інтервалу інтегрування $n = 10$. Тоді крок рівномірного розбиття інтервалу інтегрування складає

$$h = (t_n - t_0)/n = (10 - 0)/10 = 1 \text{ (хв)}.$$

Визначаємо середину поточного відрізка $[0, 1]$:

$$t_{0+1/2} = t_0 + \frac{h}{2} = 0 + \frac{1}{2} = 0,5.$$

Розраховуємо допоміжне значення шуканої функції $y = y(x)$ в середній точці поточного відрізка $x_{0+1/2}$:

$$y_{0+1/2} = y_0 + \frac{h}{2} f(t_0, y_0) = 0 + \frac{1}{2} \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 0} - 0,0065 \cdot 0] = 0 + 0,025 = 0,025.$$

Знаходимо значення похідної в середині поточного відрізка $[0,1]$:

$$y'_{0+1/2} = f\left(t_{0+\frac{1}{2}}, y_{0+\frac{1}{2}}\right) = [0,05e^{-0,05 \cdot 0,5} - 0,0065 \cdot 0,025] = 0,0486.$$

Розраховуємо величину y для нової точки розв'язку:

$$y_1 = y_0 + h y'_{0+1/2} = 0 + 1 \cdot 0,0486 = 0,0486.$$

Аналогічні обчислення повторюємо до кінця інтервалу інтегрування $[0, 10]$.

Результати обчислень наведені в таблиці на рис. 10.7.

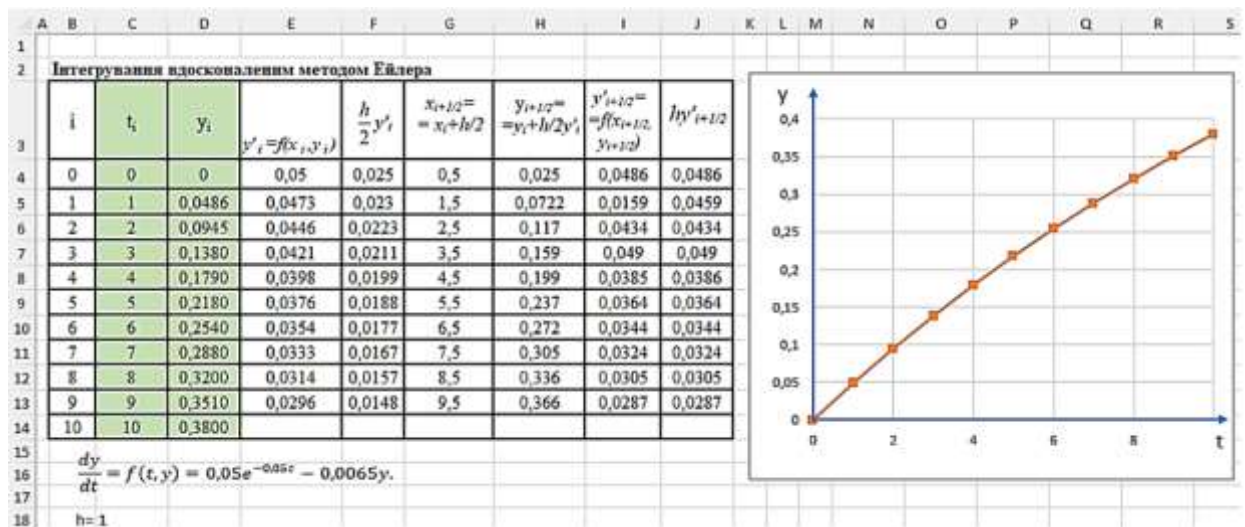


Рис. 10.7. Інтегрування задачі Коші (10.7) удосконаленим методом Ейлера

Зауваження. Розв'язком задачі є множина пар значень $(t_i, y_i), i = 0, 1, 2, \dots, 10$, яка наближається до функціональної залежності $y = y(t)$.

Формули удосконаленого методу Ейлера, як і інших чисельних методів інтегрування ЗДР, можуть бути узагальнені й для розв'язання *систем диференціальних рівнянь* [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39].

10.4 МЕТОДИ РУНГЕ-КУТТИ

Методи Рунге-Кутти (в літературі трапляються також назви «Рунге та Кутти», «Рунге-Кутта») [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39] включають великий клас чисельних методів розв'язання задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь та їх систем.

На практиці найбільшого поширення набув *метод Рунге-Кутти четвертого порядку*, у якому усереднення проводиться за трьома точками, похідна на кожному відрізку розраховується чотири рази: на початку відрізка, двічі в його середині і в кінці відрізка (рис. 10.8).

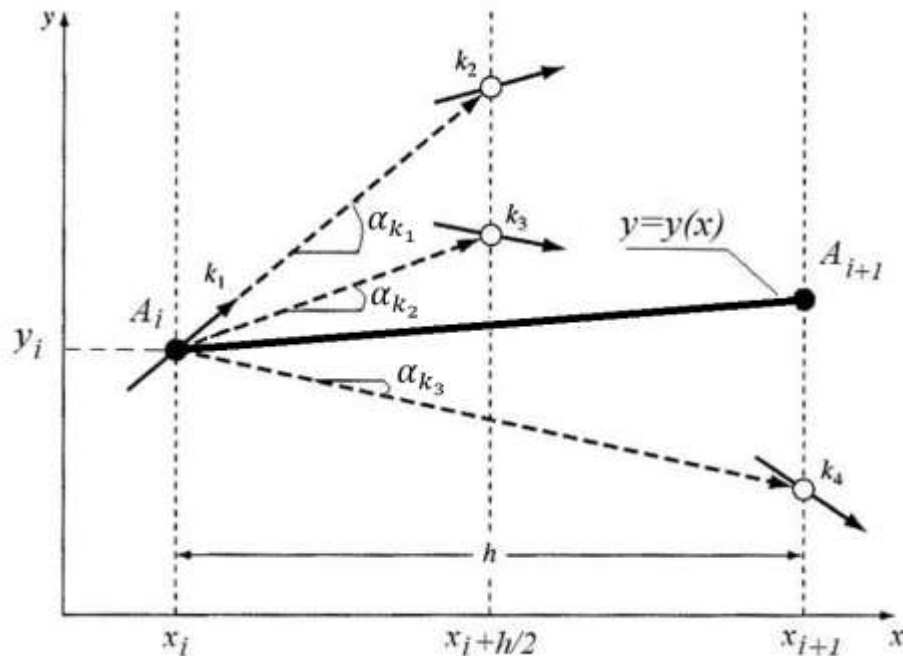


Рис. 10.8. Загальний принцип розв'язання ЗДР за методом Рунге-Кутти четвертого порядку

Алгоритм інтегрування за методом Рунге-Кутти четвертого порядку (в подальшому зазначатимемо просто «метод Рунге-Кутти») такий:

1. Виконати розбиття інтервалу інтегрування $[a, b]$ на n рівних частин точками $x_i = x_0 + ih, i = 1, 2, 3, \dots, n$, де $h = \frac{b-a}{n}$, $x_0 = a, x_n = b$,
2. Визначити на кожному кроці (тобто для кожного з $i = 1, 2, 3, \dots, n$) значення:

$$\begin{aligned} k_1^{(i)} &= hf(x_i, y_i); \\ k_2^{(i)} &= hf(x_i + h/2, y_i + k_1^{(i)}/2); \\ k_3^{(i)} &= hf(x_i + h/2, y_i + k_2^{(i)}/2); \\ k_4^{(i)} &= hf(x_i + h, y_i + k_3^{(i)}). \end{aligned} \quad (10.8)$$

3. Визначити на кожному кроці:

$$\Delta y_i = 1/6 (k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}). \quad (10.9)$$

4. Визначити величину y для нової точки розв'язку за формулою (10.6). Обчислення (пп. 2-4) повторити до кінця інтервалу інтегрування $[a, b]$.

Похибка методу Рунге-Кутти четвертого порядку пропорційна величині h^4 : $\varepsilon_{p.-K.} = \varepsilon(h^4)$.

Приклад 10.4. Розв'язати задачу Коші з прикладу 10.2 методом Рунге-Кутти.

Розв'язок: з початкових умов, $t_0 = 0, y_0 = 0$. Задаємося кількістю точок розбиття інтервалу інтегрування $n = 10$. Тоді крок рівномірного розбиття інтервалу інтегрування складає $h = (t_n - t_0)/n = (10 - 0)/10 = 1$ (хв).

Розраховуємо допоміжні значення методу Рунге-Кутти четвертого порядку:

$$k_1^{(0)} = hf(t_0, y_0) = 1 \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 0} - 0,0065 \cdot 0] = 0,0500;$$

$$k_2^{(0)} = hf\left(t_0 + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1^{(0)}}{2}\right) = 1 \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 0,5} - \\ - 0,0065 \cdot \left(0 + \frac{0,0500}{2}\right)] = 0,04844;$$

$$k_3^{(0)} = hf\left(t_0 + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2^{(0)}}{2}\right) = 1 \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 0,5} - \\ - 0,0065 \cdot \left(0 + \frac{0,04844}{2}\right)] = 0,04845;$$

$$k_4^{(0)} = hf\left(t_i + h, y_i + k_3^{(0)}\right) = 1 \cdot [0,05e^{-0,05 \cdot 1} - \\ - 0,0065 \cdot (0 + 0,04845)] = 0,04725.$$

За формулою методу Рунге-Кутти обчислюємо приріст шуканої функції:

$$\Delta y_0 = 1/6 \left(k_1^{(0)} + 2k_2^{(0)} + 2k_3^{(0)} + k_4^{(0)}\right) = \\ = 1/6 (0,0500 + 2 \cdot 0,04844 + 2 \cdot 0,04845 + 0,04725) = \\ = 0,048504.$$

Знаходимо нове значення шуканої функції за формулою (10.6):

$$y_1 = y_0 + \Delta y_0 = 0 + 0,048504 = 0,048504.$$

Аналогічним чином виконуємо обчислення до кінця інтервалу інтегрування $[0, 10]$.

Результати обчислень наведені в таблиці на рис. 10.9.

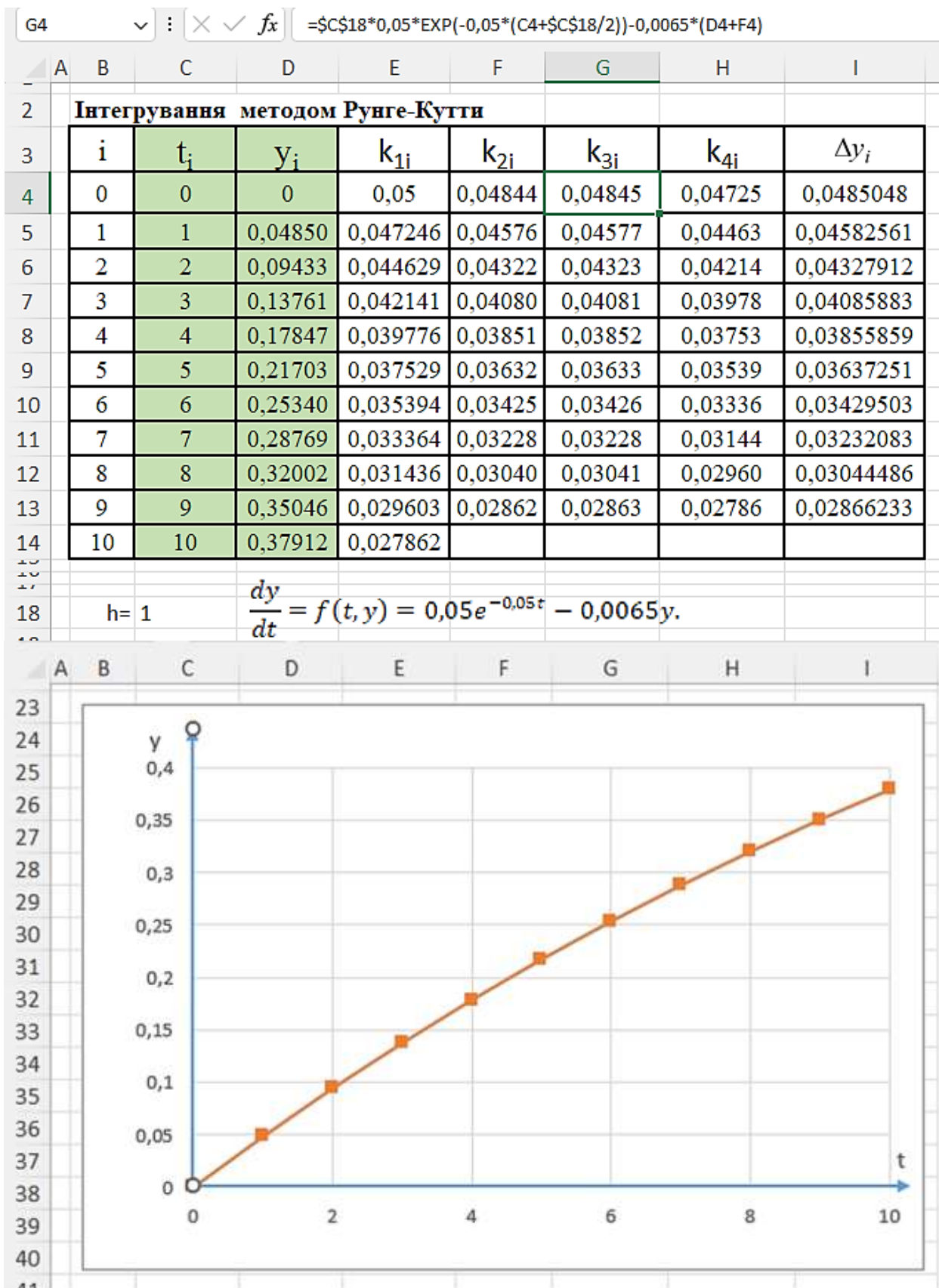


Рис. 10.9. Інтегрування задачі Коші (10.7) за методом Рунге-Кутти

Зауваження. Розв'язком задачі є множина пар значень $(t_i, y_i), i = 0, 1, 2, \dots, 10$, яка наближається до функціональної залежності $y = y(t)$.

Формули методу Рунге-Кутти, як і інших чисельних методів інтегрування ЗДР, можуть бути узагальнені й для розв'язання *систем диференціальних рівнянь*. Розглянемо узагальнення формул методу Рунге-Кутти (10.8)-(10.9) на систему з двох диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} y'_1 = f(x, y, z), \\ y'_2 = \phi(x, y, z) \end{cases}$$

з початковими умовами $x = x_0, y_1(x_0) = y_{10}, y_2(x_0) = y_{20}$.

Для заданого кроку h із (10.8)-(10.9) отримаємо:

$$\begin{aligned} k_{11}^{(i)} &= h \cdot f(x_i, y_{1i}, y_{2i}); \\ k_{21}^{(i)} &= h \cdot \phi(x_i, y_{1i}, y_{2i}); \\ k_{12}^{(i)} &= h \cdot f(x_i + h/2, y_{1i} + k_{11}^{(i)}/2, y_{2i} + k_{21}^{(i)}/2); \\ k_{22}^{(i)} &= h \cdot \phi(x_i + h/2, y_{1i} + k_{11}^{(i)}/2, y_{2i} + k_{21}^{(i)}/2); \\ k_{13}^{(i)} &= h \cdot f(x_i + h/2, y_{1i} + k_{12}^{(i)}/2, y_{2i} + k_{22}^{(i)}/2); \\ k_{23}^{(i)} &= h \cdot \phi(x_i + h/2, y_{1i} + k_{12}^{(i)}/2, y_{2i} + k_{22}^{(i)}/2); \\ k_{14}^{(i)} &= h \cdot f(x_i + h, y_{1i} + k_{13}^{(i)}, y_{2i} + k_{23}^{(i)}); \\ k_{24}^{(i)} &= h \cdot \phi(x_i + h, y_{1i} + k_{13}^{(i)}, y_{2i} + k_{23}^{(i)}); \end{aligned} \tag{10.10}$$

Розрахунок приросту функцій та нова точка розв'язку:

$$\begin{aligned} \Delta y_{1i} &= 1/6 \cdot (k_{11}^{(i)} + 2k_{12}^{(i)} + 2k_{13}^{(i)} + k_{14}^{(i)}); \\ \Delta y_{2i} &= 1/6 \cdot (k_{21}^{(i)} + 2k_{22}^{(i)} + 2k_{23}^{(i)} + k_{24}^{(i)}); \\ y_{1i+1} &= y_{1i} + \Delta y_{1i}; \quad y_{2i+1} = y_{2i} + \Delta y_{2i}, \\ i &= 0, 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \tag{10.11}$$

Приклад 10.5. Необхідно розрахувати розподіл температур за довжиною проточного кожухотрубчастого теплообмінного апарату.

Розв'язок: такий апарат може бути описаний гідродинамічною математичною моделлю «витіснення – витіснення» (рис. 10.10). У випадку проточного режиму взаємного плинину потоків математичний опис вказаного апарату (в стаціонарному режимі) являє собою систему з двох звичайних диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 C_{T_1} \frac{dT_1}{dx} - \left(\frac{F}{L}\right) K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ -\vartheta_2 C_{T_2} \frac{dT_2}{dx} + \left(\frac{F}{L}\right) K_T (T_1 - T_2) = 0, \end{cases} \quad (10.12)$$

де індекси 1 та 2 належать відповідно гарячому та холодному теплоносіям; V – об'єм апарату; ϑ – об'ємна витрата потоку; c_T – теплоємність теплоносія; F – площа поверхні теплообміну; K_T – коефіцієнт теплопередачі; T – температура теплоносія; L – довжина апарату; x – поточне значення довжини апарату.

Початкові умови для випадку проточного руху теплоносіїв: при $l=0$, $T_1(0)=T_{1П}$; $T_2(0)=T_{2П}$.

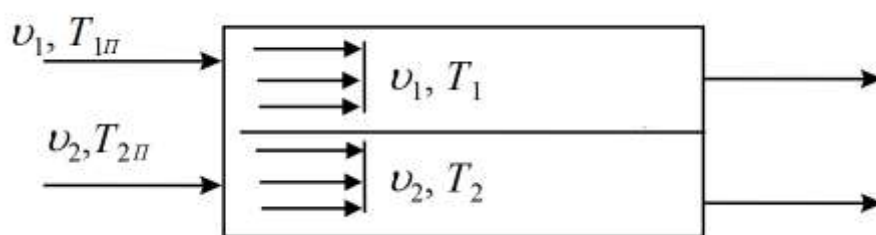


Рис. 10.10. Схематичне представлення теплообмінного апарату типу «витіснення-витіснення» для випадку проточечії

Нехай в даному випадку $\vartheta_1 = 0,267$ (м³/с), $\vartheta_2 = 0,26 \cdot 10^{-3}$ (м³/с), $F=13$ (м²); $L=1,5$ (м), $K_T=60$ (Вт/м²·град), $c_{T1}=1670$ (Дж/м³·град), $c_{T2}= 4185 \cdot 10^3$ (Дж/м³·град); початкові умови $T_1(0)=T_{1П}=90,00$ (°С), $T_2(0)=T_{2П}=55,45$ (°С). У результаті підстановки вказаних значень задача Коші, яку слід розв'язати, набуває вигляду:

$$\begin{cases} -445,89 \frac{dT_1}{dx} - 520(T_1 - T_2) = 0 \\ -1088,10 \frac{dT_2}{dx} + 520(T_1 - T_2) = 0, \\ T_1(0) = 90,00, T_2(0) = 55,45, \end{cases}$$

або, після належних перетворень:

$$\begin{cases} \frac{dT_1}{dx} = 1,1662(T_1 - T_2) \\ \frac{dT_2}{dx} = -0,4749(T_1 - T_2), \\ T_1(0) = 90,00, T_2(0) = 55,45. \end{cases} \quad (10.13)$$

Розв'язок: в якості інтервалу інтегрування візьмемо довжину теплообмінного апарату $x \in [0, 1,5]$, за крок інтегрування візьмемо значення $h = 0,15$ (м).

Результати обчислень наведені в таблиці на рис. 10.11. Зокрема, $x_0 = 0, T_{10} = 90,00, T_{20} = 55,45$ (з початкових умов).

Нове значення незалежної змінної $x_1 = x_0 + h = 0 + 0,15 = 0,15$.

Знаходимо за (10.10) допоміжні значення методу Рунге-Кутти для кожного з двох диференціальних рівнянь системи:

для першого рівняння:

$$k_{11}^{(0)} = h \cdot f(x_i, T_{10}, T_{20}) = -6,04;$$

$$k_{12}^{(0)} = h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, T_0 + \frac{k_{11}^{(0)}}{2}, T_{20} + \frac{k_{21}^{(0)}}{2}\right) = -5,30;$$

$$k_{13}^{(0)} = h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, T_{1i} + \frac{k_{12}^{(0)}}{2}, T_{20} + \frac{k_{22}^{(0)}}{2}\right) = -5,39;$$

$$k_{14}^{(i)} = h \cdot f(x_i + h, T_{10} + k_{13}^{(0)}, T_{20} + k_{23}^{(0)}) = -5,38;$$

для другого рівняння:

$$k_{21}^{(0)} = h \cdot \phi(x_i, T_{10}, T_{20}) = 2,46;$$

$$k_{22}^{(0)} = h \cdot \phi \left(x_i + \frac{h}{2}, T_{10} + \frac{k_{11}^{(0)}}{2}, T_{20} + \frac{k_{21}^{(0)}}{2} \right) = 2,16;$$

$$k_{23}^{(0)} = h \cdot \phi \left(x_i + \frac{h}{2}, T_{1i} + \frac{k_{12}^{(0)}}{2}, T_{20} + \frac{k_{22}^{(0)}}{2} \right) = 2,20;$$

$$k_{24}^{(0)} = h \cdot \phi(x_i + h, T_{10} + k_{13}^{(0)}, y_{20} + k_{23}^{(0)}) = 2,19.$$

Знаходимо за (10.11) прирости двох функцій та нові значення шуканих функцій T_{11}, T_{21} :

$$\Delta T_{10} = 1/6 \cdot (k_{11}^{(0)} + 2k_{12}^{(0)} + 2k_{13}^{(0)} + k_{14}^{(0)}) = -5,47;$$

$$\Delta T_{20} = 1/6 \cdot (k_{21}^{(0)} + 2k_{22}^{(0)} + 2k_{23}^{(0)} + k_{24}^{(0)}) = 2,23;$$

$$T_{11} = T_{10} + \Delta T_{10} = 90,00 - 5,47 = 84,53;$$

$$T_{21} = T_{20} + \Delta T_{20} = 55,45 + 2,23 = 57,68.$$

Таким чином стають відомими значення шуканої функції в точках $A_{11}(x_1, T_{11})$ та $A_{21}(x_1, T_{21})$.

Після цього знаходимо нове значення незалежної змінної $x_2 = 0,30$, розраховуємо допоміжні значення методу Рунге-Кутта для кожного з двох диференціальних рівнянь, прирости двох функцій та нові значення шуканих функцій T_{12}, T_{22} .

Рис. 10.11. Інтегрування методом Рунге-Кутти задачі Коші (10.13) для системи диференціальних рівнянь

Таким чином стають відомими значення шуканої функції в точках $A_{12}(x_2, T_{12})$ та $A_{22}(x_2, T_{22})$. Аналогічні обчислення виконуємо до досягнення кінця інтервалу інтегрування $x_{10} = 1,50$.

10.5 ПРИНЦИПИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ДИФЕРЕНЦІЙНОГО РІВНЯННЯ ДРУГОГО ТА БІЛЬШ ВИСОКИХ ПОРЯДКІВ

Диференціальні рівняння вищих порядків можуть включати не тільки першу похідну шуканої функції, а й відповідні похідні вищих порядків.

Оскільки більшість методів чисельного розв'язання ЗДР розроблені для розв'язування диференціальних рівнянь першого порядку та їх систем [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 32, 33, 35-37, 39], то рівняння та системи вищих порядків зводяться до систем рівнянь першого порядку шляхом заміни змінних. Нехай задано диференціальне рівняння порядку n :

$$y^{(n)} = f(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n-1)}(x)). \quad (10.14)$$

Задача Коші полягає у знаходженні часткового розв'язку рівняння (10.14), що задовольняє початковим умовам:

$$\begin{aligned} y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = y'_0, \quad y''(x_0) = y''_0, \dots \\ y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)}, \end{aligned} \quad (10.15)$$

де $y_0, y'_0, y''_0, \dots, y_0^{(n-1)}$ – відомі числа.

Ідея розв'язання таких задач Коші полягає в тому, що спочатку рівняння n -го порядку перетворюється на систему рівнянь першого порядку, яка потім розв'язується одним з відомих методів [1, 13]. Слід увести заміни:

$$y_1(x) = y(x), y_2(x) = y'_1(x), y_3(x) = y'_2(x), \dots, y_n(x) = y'_{n-1}(x). \quad (10.16)$$

З урахуванням (10.16), задача Коші (10.14)-(10.15) може бути зведена до задачі Коші для системи диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} y'_1 = y_2 \\ y'_2 = y_3 \\ \dots \\ y'_n = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n). \end{cases} \quad (10.17)$$

При цьому початкові умови (10.15) набувають вигляду:

$$y_1(x_0) = y_0, y_2(x_0) = y'_0, y_3(x_0) = y''_0, \dots, y_n(x_0) = y_0^{(n-1)}. \quad (10.18)$$

Приклад 10.6. Задано диференціальне рівняння порядку з початковими умовами:

$$y'' = -\frac{19}{4} \cdot y - 10 \cdot y', \quad y(0) = -9, \quad y'(0) = 0. \quad (10.19)$$

Перетворити наведене рівняння у систему ЗДР першого порядку.

Розв'язок: уведемо заміни у відповідності до (10.16):

$$y_1(x) = y(x), \quad y_2(x) = y'_1(x).$$

У відповідності до (10.16)-(10.17), отримуємо:

$$\begin{cases} y'_1 = y_2 \\ y'_2 = -\frac{19}{4}y_1 - 10y_2, \end{cases} \quad y_1(0) = -9; \quad y_2(0) = 0.$$

10.6 ПОНЯТТЯ ПРО ЖОРСТКІ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ

При дослідженні диференціальних рівнянь виділяють клас *жорстких* рівнянь та систем, при розв'язанні яких із використанням розглянутих вище «класичних», «стандартних» чисельних методів виникають критичні обчислювальні перепони [13]. Початок дослідження жорстких систем було покладено в середині ХХ століття в ході вивчення рівнянь хімічної кінетики для процесів з одночасною присутністю хімічних реакцій, які протікають дуже швидко, та реакцій, що протікають повільно (зокрема, реакції Білоусова-Жаботинського)¹. При цьому було виявлено, що інтегрування жорстких ЗДР «стандартними» методами виявляється неможливим, або вимагає

¹ Ichino, T., Asahi, T., Kitahata, H., Magome, N., Agladze, K., & Yoshikawa, K. (2008). Microfreight Delivered by Chemical Waves. The Journal of Physical Chemistry C, 112(8), 3032–3035. DOI:10.1021/jp7097922

встановлення виключно малого значення кроку чисельного методу.

У процесі чисельного розв'язання жорстких рівнянь може виникати *нестійкість* розв'язання, що виявляється як надзвичайно різке зростання (або спадання) обчисленого значення шуканої функції $y(x)$ на певному кроці; іноді крива розв'язку при виникненні нестійкості має вигляд коливань із різко зростаючою амплітудою [13].

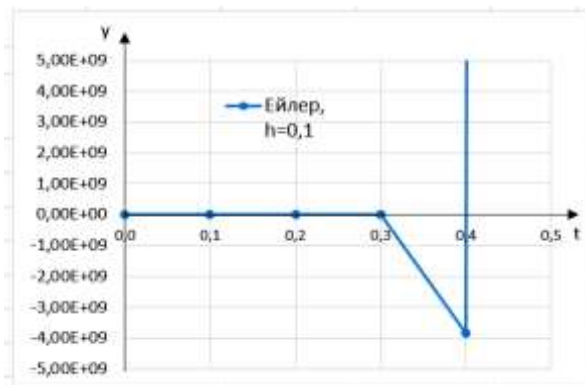
У математичному описі (тобто у диференціальному рівнянні або системі рівнянь) жорсткої системи присутні доданки, що швидко змінюються (зростають або спадають), разом із доданками, що змінюються повільно. З точки зору фізичного сенсу, швидкозмінні компоненти найчастіше відповідають початковій ділянці інтервалу інтегрування і описують певний перехідний процес. На кінцевих ділянках інтервалу інтегрування жорсткої системи домінують компоненти, що зростають (спадають) повільно. Хоча згадані перехідні явища домінують лише протягом короткої частини інтервалу інтегрування, вони спричиняють «збій» – нестійкість у процесі чисельного інтегрування «традиційними» методами [3-5, 13].

Рис. 10.12 ілюструє явище нестійкості розв'язку під час інтегрування жорсткого диференціального рівняння $\frac{dy}{dt} = -1000y + 3000 - 2000e^{-t}$ з початковими умовами $y(0) = 0$ чисельним методом Ейлера у порівнянні із «точним» аналітичним розв'язком $y(t) = 3 - 0,998e^{-1000t} - 2,002e^{-t}$.

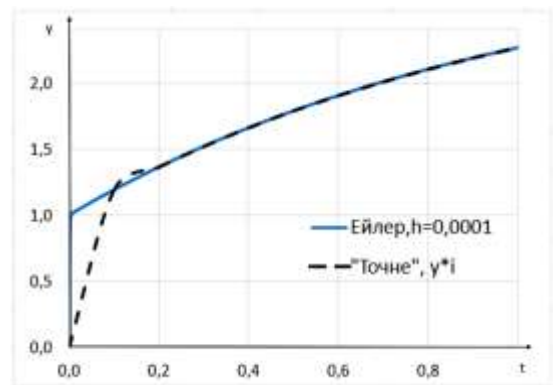
Як видно з рис. 10.12, а, б чисельне інтегрування даного жорсткого ЗДР з кроком $h=0,1$ призводить до цілком неприпустимого результату – виникнення коливань із різко зростаючою амплітудою; зменшення кроку інтегрування в тисячу разів (із відповідним різким збільшенням обсягу розрахунків) дозволяє отримати прийнятні результати на більшій частині інтервалу інтегрування – $x \in [0,2, 1]$, проте не на всьому інтервалі інтегрування (рис. 10.12, а, в).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
1	$\frac{dy}{dt} = -1000y + 3000 - 2000e^{-t}$					$y(0)=0$		$y^* = 3 - 0.998e^{-1000t} - 2.002e^{-t}$									
2	Інтегрув. мет. Ейлера $h=0,1$					Інтегрув. мет. Ейлера $h=0,0001$					Точний розв'язок						
3	i	t _i	y _i	f(t _i , y _i)	Δy _i = hf(t _i , y _i)	i	t _i	y _i	f(t _i , y _i)	Δy _i = hf(t _i , y _i)	i	t _i	y _i [*]				
4	0	0,00	0,000	1000,0	250,0000	0	0,0000	0,000	1000,0	0,1000	0	0,00	0,00				
5	1	0,10	2,5E+02	-2,5E+05	-6,2E+04	1	0,0001	0,100	900,2	0,0900	1	0,10	1,189				
6	2	0,20	-6,2E+04	6,2E+07	1,5E+07	2	0,0002	0,190	810,4	0,0810	2	0,20	1,361				
7	3	0,30	1,5E+07	-1,5E+10	-3,9E+09	3	0,0003	0,271	729,5	0,0730	3	0,30	1,517				
8	4	0,40	-3,8E+09	3,8E+12	9,6E+11	4	0,0004	0,344	656,8	0,0657	4	0,40	1,658				
9	5	0,50	9,6E+11	-9,6E+14	-2,4E+14	5	0,0005	0,410	591,3	0,0591	5	0,50	1,786				
10	6	0,60	-2,4E+14	2,4E+17	6,0E+16	6	0,0006	0,469	532,4	0,0532	6	0,60	1,901				
11	7	0,70	5,9E+16	-5,9E+19	-1,5E+19	7	0,0007	0,522	479,3	0,0479	7	0,70	2,006				
12	8	0,80	-1,5E+19	1,5E+22	3,7E+21	8	0,0008	0,570	431,6	0,0432	8	0,80	2,100				
13	9	0,90	3,7E+21	-3,7E+24	-9,2E+23	9	0,0009	0,613	388,6	0,0389	9	0,90	2,186				
14	10	1,00	-9,2E+23			10	0,0010	0,652	350,0	0,0350	10	1,00	2,264				
15						11	0,0011	0,687	315,2	0,0315							
10003						9999	0,9999	2,263	0,7	0,0001							
10004						10000	1,0000	2,264	0,7	0,0001							
10005																	

а)



б)



в)

Рис. 10.12. Виникнення нестійкості розв'язку під час чисельного розв'язання жорсткого диференціального рівняння: а – таблиці розрахунків чисельним методом Ейлера з кроком $h=0,1$ та з кроком $h=0,0001$ у порівнянні з точним розв'язанням; б – фрагмент ламаної Ейлера для кроку інтегрування $h=0,1$; в – ламана Ейлера для кроку інтегрування $h=0,0001$

Для коректного розв'язання жорстких ЗДР та систем ЗДР найчастіше застосовують *неявні* чисельні методи (або ж *методи «інтегрування назад»*). На відміну від явних методів інтегрування ЗДР, які використовують формулу (10.6), у неявних методах на кожному з кроків інтегрування приріст функції розраховується не на лівій границі ($i - 1$), а на правій границі (i) відрізка інтегрування (у випадку додатнього кроку інтегрування):

$$y_i = y_{i-1} + \Delta y_i, i = \overline{1, \dots, n} \quad (10.20)$$

Оскільки, як цілком очевидно (див. наприклад, рис. 10.3), значення Δy_i

прирісту функції неможливо безпосередньо розрахувати у точці $A_{i-1}(x_{i-1}, y_{i-1})$, процедура обчислень для неявних методів інтегрування суттєво ускладнюється порівняно з явними методами.

Зокрема, у випадку *неявного методу Ейлера*, загальну формулу (10.6) на i -тому кроці можна представити з урахуванням формули методу Ейлера (10.7) у вигляді:

$$y_i = y_{i-1} + h \frac{dy_i}{dx} = y_{i-1} + hf(x_i, y_i), \quad (10.21)$$

де y_i, h – відомі величини, dy_i/dx – права частина ЗДР (10.1), що розв’язується, в точці $A_i(x_i, y_i)$.

Під час розв’язання ЗДР на кожному кроці інтегрування перед застосуванням формули слід розв’язувати алгебраїчне рівняння (10.21) для визначення приросту функції Δy_i . Вказане алгебраїчне рівняння розв’язують одним з чисельних методів (наприклад, методом ітерацій), хоча в поодиноких випадках вдається розв’язати це рівняння аналітично.

Приклад 10.7. Під час проектування системи біологічного очищення стічних вод досліджувалася деградація популяції мікроорганізмів у біологічному ставку-відстійнику внаслідок отруєння солями важких металів. Це явище описано найпростішою моделлю, яка передбачає, що швидкість зміни популяції p пропорційна наявній чисельності популяції в будь-який момент часу t :

$$\frac{dp}{dt} = -k_d \cdot p, \quad (10.22)$$

де k_d – коефіцієнт деградації популяції, t – час, доба.

Нехай $k_d = 1,275$, крок інтегрування $h=0,25$ доби, початкове значення величини популяції $p_0=15000$, визначити зміну обсягу популяції в часі для інтервалу інтегрування $t \in [0, 4]$ неявним методом Ейлера.

Розв’язок: запишемо рівняння (10.21), підставивши в нього праву

частину (10.22).

$$y_i = y_{i-1} - k_d \cdot y_i \cdot h. \quad (10.23)$$

В даному випадку, оскільки диференціальне рівняння є лінійним відносно y , для розв'язання алгебраїчного рівняння (10.23) не потрібно використовувати чисельні методи розв'язання алгебраїчних рівнянь, а достатньо провести алгебраїчні перетворення. Розв'язання рівняння (10.23) можна представити у вигляді:

$$y_i = \frac{y_{i-1}}{1 + k_d \cdot h} = \frac{y_{i-1}}{1 + 1,275 \cdot h}. \quad (10.24)$$

В подальшому проводимо розрахунки за формулою неявного методу Ейлера (10.20) із урахуванням виразу (10.24) на кожному кроці інтегрування (рис. 10.13). Зокрема, $y_1 = \frac{y_0}{1 + 1,275 \cdot h} = \frac{1500000}{1 + 1,275 \cdot 0,25} = 1137440,76$;

$$y_2 = \frac{y_1}{1 + 1,275 \cdot h} = \frac{1137440,76}{1 + 1,275 \cdot 0,25} = 862514,32 \text{ і т. д.}$$

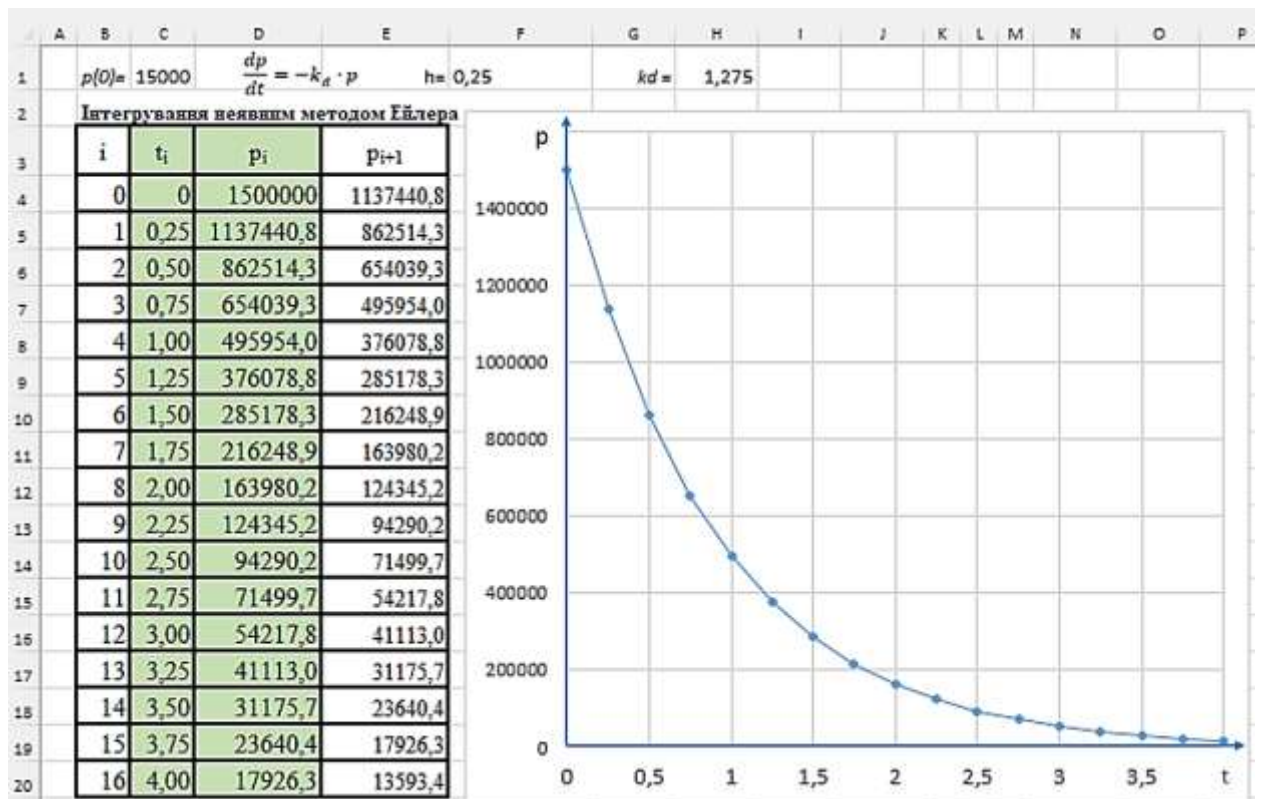


Рис. 10.13. Інтегрування неявним методом задачі Коші для жорсткого диференціального рівняння (10.22).

Ще раз наголосимо, що для нелінійних ЗДР розв'язок ускладнюється, оскільки він передбачає розв'язування нелінійних алгебраїчних рівнянь на кожному кроці інтегрування.

На практиці для розв'язання жорстких ЗДР частіше використовують не найпростіший неявний метод Ейлера, а неявні версії модифікованого методу Ейлера (методу Гойна) та методу Рунге-Кутти, а також спеціальні методи Адамса-Мултона, Гіра, Грега-Булірша-Штоера та інші [3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 32, 33, 39, 45].

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 10

1. Пояснити задачу Коші та її геометричну інтерпретацію.
2. Пояснити загальний принцип чисельного розв'язання задачі Коші для звичайного диференціального рівняння.
3. В якій формі отримується результат чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь?
4. Навести математичний апарат, алгоритм та геометричну інтерпретацію методу Ейлера.
5. Недоліки методу Ейлера та шляхи їх подолання. Як впливає величина кроку на точність обчислень за формулою Ейлера?
6. Модифікації методу Ейлера. Навести математичний апарат, алгоритм та геометричну інтерпретацію вдосконаленого методу Ейлера (методу середньої точки).
7. Які методи входять до сімейства методів Рунге-Кутти? Навести математичний апарат, алгоритм та геометричну інтерпретацію методу Рунге-Кутти четвертого порядку. Вплив величини кроку на точність обчислень за методом Рунге-Кутти.
8. Послідовність розв'язання задачі Коші для систем диференціальних рівнянь за методами Ейлера й Рунге-Кутти.
9. Послідовність розв'язання задачі Коші для диференціальних рівнянь вищих порядків за методами Ейлера й Рунге-Кутти.
10. Поняття жорстких диференціальних рівнянь та принципи їх

розв'язання.

11. Рівняння швидкості хімічної реакції $A \xrightarrow{k} B$ має вигляд:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A,$$

де C_A – концентрація речовини А, моль/л, k – константа швидкості реакції, 1/с, t – час, с.

Поклавши $k=1,5 \cdot 10^{-2}$ (1/с), крок інтегрування $h=10$ секунд, початкове значення величини популяції $C_{A0}=12$ (моль/л), визначити зміну концентрації в часі для інтервалу інтегрування $[0, 360]$: а) методом Ейлера; б) методом Рунге-Кутти. За результатами розв'язку побудувати відповідні криві розв'язку (ламані Ейлера).

12. Неізотермічний реактор періодичної дії можна описати такими рівняннями:

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = -e^{\left(\frac{10}{T+273}\right)} C \\ \frac{dT}{dt} = 1000 \cdot e^{\left(\frac{10}{T+273}\right)} C - 10 \cdot (T - 20), \end{cases}$$

де C – концентрація реагенту, T – температура у реакторі (в градусах Цельсія). В початковий момент часу реактор знаходиться при температурі 15 °С; концентрація реагенту складає $C_0=1,0$ моль/л.

Знайти концентрацію та температуру в реакторі як функцію часу (інтервал інтегрування $[0, 360]$, крок інтегрування $h=20$ секунд): а) удосконаленим методом Ейлера; б) методом Рунге-Кутти. За результатами розв'язку побудувати відповідні криві розв'язку.

13. Розв'язати задачу з прикладу 10.2 для випадку $k_1 = 55,2$ (дм³моль⁻¹с⁻¹) та $k_2 = 30,2$ (дм³моль⁻¹ с⁻¹), $C_{A0}=0,0105$ (г/моль), $C_{B0}=0,0105$ (г/моль): а) методом Ейлера; б) методом Рунге-Кутти. За результатами розв'язку побудувати відповідні криві розв'язку.

11 РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

11.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 11

Вище було розглянуто методи розв'язання *задачі Коші* для звичайних диференціальних рівнянь (або ж задачі з початковими умовами), що включає диференціальне рівняння (або систему диференціальних рівнянь) спільно з *початковими умовами*.

Тепер розглянемо *крайову задачу (задачу з граничними умовами)*, в якій спеціальні умови для звичайних диференціальних рівнянь задано не в одній початковій точці, а у *кількох точках* (або областях) інтервалу інтегрування (наприклад, на початку і в кінці розрахункового інтервалу) [13].

До розв'язання крайових задач зводяться прикладні проблеми дослідження руху рідини та газу в каналах, тепловіддачі та теплообміну, вивчення механізмів каталізу, проєктування систем оптимального керування тощо.

Граничні умови у складі крайових задач *відзначаються великою різноманітністю*. Докладно граничні умови та способи розв'язання диференціальних рівнянь з такими умовами розглядаються в спеціальних розділах курсу математичного аналізу. Тут наведемо лише деякі класи крайових задач, найбільш значимі у практиці хіміка-технолога [13, 17-19, 21-23, 27-29, 35-37, 39, 45].

Розглянемо постановку крайової задачі для звичайного диференціального рівняння другого порядку:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right), \quad (11.1)$$

де y – шукана функція; x – незалежна змінна; $f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right)$ – функція, визначена і безперервна в деякій замкнутій області D зміни своїх аргументів.

З курсу математичного аналізу відомо, що загальний (аналітичний) розв'язок такого звичайного диференціального рівняння містить дві довільні

сталі. Якщо задля їх знаходження задати при $x = x_0$ значення $y(x_0)$ шуканої функції $y(x)$ та її похідної $y'(x_0)$, то отримаємо постановку задачі Коші для звичайного диференціального рівняння другого порядку.

Натомість, якщо вимагається, щоб шуканий розв'язок $y(x)$ задовольняв умовам у різних точках інтервалу інтегрування, наприклад, у двох різних точках $x = a$ і $x = b$:

$$\begin{aligned} y(a) &= y_a, \\ y(b) &= y_b, \end{aligned} \tag{11.2}$$

то отримаємо одну з можливих постановок крайової задачі, яка називається найпростішою двоточною крайовою задачею. Співвідношення виду (11.2) називають *граничними умовами двоточної крайової задачі*.

Геометричний зміст задачі з граничними умовами (11.2): потрібно знайти таку криву $y(x)$ наближеного розв'язку звичайного диференціального рівняння (11.1), яка проходить через точки $A(a, y_a)$ та $B(b, y_b)$ – рис. 11.1.

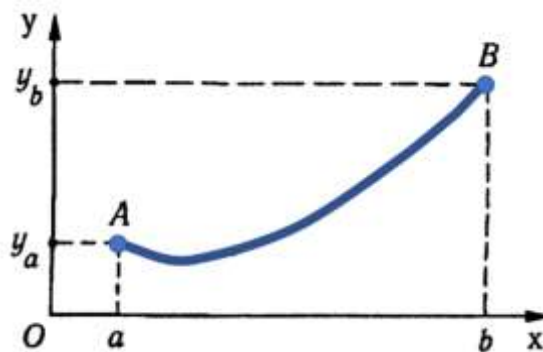


Рис. 11.1. Геометричний зміст двоточної крайової задачі з граничними умовами Діріхле (11.1), (11.2)

Відома також така видозміна постановки крайової задачі (11.1)-(11.2): належить знайти такий розв'язок $y=y(x)$ звичайного диференціального рівняння другого порядку (11.1), щоб у точках $x = a$ і $x = b$ для похідної функції $y(x)$ були виконані граничні умови вигляду:

$$\begin{aligned} y'(a) &= y_a^{der}, \\ y'(b) &= y_b^{der}, \end{aligned} \tag{11.3}$$

де $y_a^{der} = \frac{dy}{dx} \Big|_{x=a}$, $y_b^{der} = \frac{dy}{dx} \Big|_{x=b}$.

Така постановка крайової задачі з геометричної точки зору відповідає пошуку розв'язку $y(x)$ звичайного диференціального рівняння другого порядку (11.1), яка перетинає прямі $x = a$ і $x = b$ під заданими кутами $(\pi/2 - \alpha)$ і $(\pi/2 - \beta)$, де, згідно з геометричним змістом похідної функції, $\alpha = \arctg y_a^{der}$, $\beta = \arctg y_b^{der}$ (рис. 11.2).

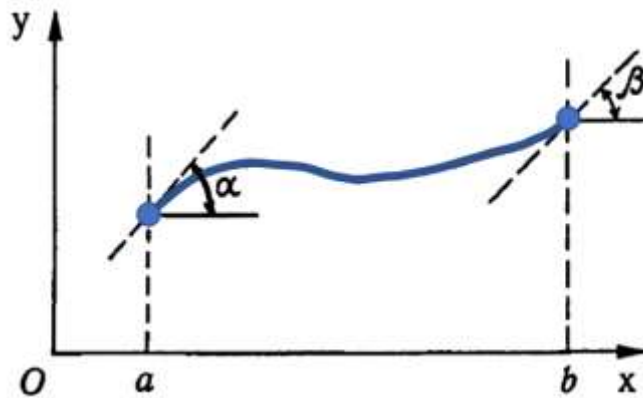


Рис. 11.2. Геометричний зміст двоточкової крайової задачі з граничними умовами Неймана (11.1), (11.3)

Умови (11.2) прийнято називати *граничними умовами першого роду* (або ж *граничними умовами Діріхле*) [13].

Умови (11.3) прийнято називати *граничними умовами другого роду* (або ж *граничними умовами Неймана*) [13].

Очевидно, що можлива також ситуація *поєднання граничних умов* – *змішана крайова задача*.

Наприклад, коли в точках $x = a$ і $x = b$ задані граничні умови першого та другого роду у певній комбінації, такі крайові умови мають назву *граничних умов третього роду* (або *граничних умов Робена* чи *граничних умов Ньютона*) [13] і будуть докладно розглянуті нижче.

Зауваження. Граничні умови можуть бути задані не тільки для звичайних диференціальних рівнянь, а й для диференціальних рівнянь в частинних похідних – див. розділ 12.

Приклад 11.1. Проектується хімічний реактор спеціальної конструкції, у сорочці якого для інтенсифікації теплообміну передбачено встановлення

тонких сталевих стрижнів. Проектування апарату вимагає побудови рівнянь матеріального та теплового балансу для усіх його конструктивних складових. Для розрахунку теплового балансу довгого тонкого стрижня довжиною від 0 до L (рис. 11.3) скористуємось законом збереження енергії. Так, у разі якщо досліджуваний об'єкт (металевий стрижень) не ізолюваний уздовж своєї довжини, а система перебуває в стаціонарному стані, його можна описати звичайним диференціальним рівнянням другого порядку:

$$\frac{d^2T}{dx^2} + \xi \cdot (T_a - T) = 0, \quad (11.4)$$

де T – температура (шукана функція), $^{\circ}\text{C}$, ξ – коефіцієнт теплопередачі, м^{-2} , який визначає швидкість розсіювання тепла у зовнішнє відносно стрижня середовище, T_a – температура навколишнього середовища, $^{\circ}\text{C}$.

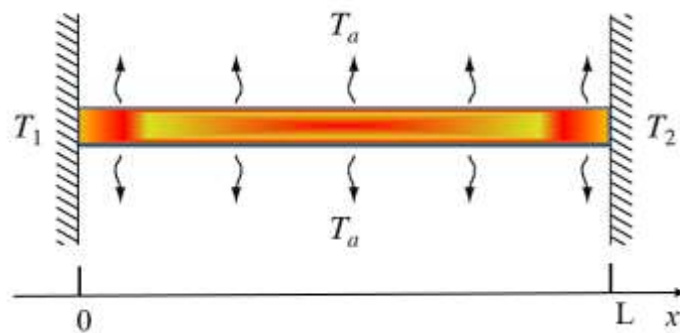


Рис. 11.3. Теплообмін тонкого стрижня з оточуючим середовищем

Додатково до рівняння (11.4) мають бути розглянуті відповідні *граничні умови* на кінцях стрижня. Іноді в якості граничних умов задано температури на кінцях стрижня, тобто граничні умови першого роду:

$$\begin{aligned} T|_{x=0} &= T_1; \\ T|_{x=L} &= T_2. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Проте більш поширений випадок граничних мов для диференціального рівняння другого порядку – змішана крайова задача, коли задані значення функції та її похідної на границі інтервалу інтегрування. Наприклад:

$$\begin{aligned} T|_{x=0} &= \tau_0, \\ \frac{dT}{dx}|_{x=0} &= \tau_1. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Як зазначалося вище (розділ 10), диференціальне рівняння другого порядку (11.4) може бути розв'язане чисельними методами після перетворення до *системи* диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = y \\ \frac{dy}{dx} = \xi \cdot (T - T_a). \end{cases} \quad (11.7)$$

При цьому початкові умови задачі з урахуванням (11.6) набувають вигляду початкових умов першого роду:

$$\begin{aligned} T(0) &= \tau_0, \\ y(0) &= \tau_1. \end{aligned}$$

Отриману систему диференціальних рівнянь першого порядку (11.7) спільно зі вказаними початковими умовами розв'язують на інтервалі $x \in [0, L]$ одним з чисельних методів [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39], наприклад, методом Рунге-Кутти (див. «Принципи розв'язання задачі Коші для диференційного рівняння другого та більш високих порядків» у розділі 10).

11.2 ЛІНІЙНА КРАЙОВА ЗАДАЧА

Повернемося до випадку змішаних граничних умов, коли в точках $x = a$ і $x = b$ задані у певній комбінації граничні умови різного роду. Розглянемо один з найпоширеніших і найбільш практично значимих варіантів таких умов.

Нехай задане лінійне неоднорідне звичайне диференціальне рівняння другого порядку:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + p(x) \cdot \frac{dy}{dx} + q(x) \cdot y = f(x), \quad x \in [a, b]. \quad (11.8)$$

Нехай також функції $p(x)$, $q(x)$, $f(x)$ у рівнянні (11.8) є неперервними на відрізку $[a, b]$.

Потрібно знайти на цьому відрізку розв'язання $y(x)$ неоднорідного звичайного диференціального рівняння другого порядку (11.8), що задовольняє граничним умовам:

$$\begin{cases} \alpha_0 \cdot y(a) + \alpha_1 \cdot y'(a) = A \\ \beta_0 \cdot y(b) + \beta_1 \cdot y'(b) = B, \end{cases} \quad (11.9)$$

де $y(a)$ – шукана функція, розрахована у точці a , $y'(a) = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a}$ – похідна шуканої функції, розрахована у точці a , $\alpha_0, \alpha_1, A, \beta_0, \beta_1, B$ – певні константи, причому $|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0, |\beta_0| + |\beta_1| \neq 0$ (тобто ліва частина граничних умов (11.9) не дорівнює нулю за ненульових значень $y(x)$ та $y'(x)$).

Неважко помітити, що граничні умови (11.9) являють собою поєднання граничних умов першого і другого роду (тобто їх лінійну комбінацію). «Змішані» граничні умови такого типу мають назву *граничних умов третього роду* (або *граничних умов Робéна* чи *граничних умов Ньютона*) [13].

У окремому випадку $\alpha_0 = \beta_0 = 1$ та $\alpha_1 = \beta_1 = 0$ співвідношення (11.9) переходять у граничні умови першого роду (11.2). Відповідно, у разі $\alpha_0 = \beta_0 = 0$ та $\alpha_1 = \beta_1 = 1$ співвідношення (11.9) переходять у граничні умови другого роду (11.3).

Постановка двоточної крайової задачі у вигляді (11.8)-(11.9) включає лінійне звичайне диференціальне рівняння другого порядку та лінійні щодо значень шуканої функції та її похідних граничні умови. У такому разі говорять про *лінійну двоточкову крайову задачу* [13].

Лінійну двоточкову крайову задачу називають *однорідною*, якщо $f(x) = 0$ і $A = B = 0$, і *неоднорідною* – в інших випадках.

Приклад 11.2. Теплоносій у межах виробничого цеху циркулює по металевому трубопроводу, що вкритий шаром теплоізоляції, який має внутрішній радіус R_0 та зовнішній радіус R (рис. 11.4).

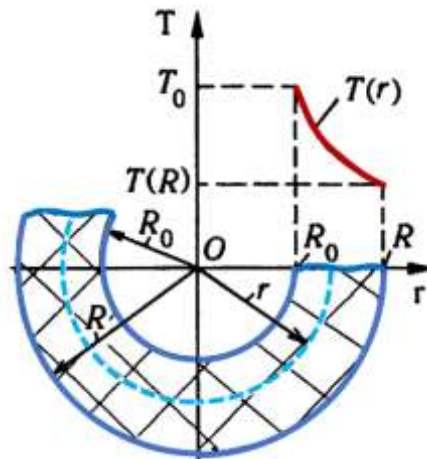


Рис. 11.4. Переріз теплоізолюваного трубопроводу

Внутрішня поверхня шару ізоляції нагріта поверхнею трубопроводу до сталого значення температури $T_0 = const$, а на зовнішній поверхні теплоізоляції відбувається теплообмін з навколишнім середовищем. Нехай температура оточуючого середовища є сталою і дорівнює $T_c = const$, інтенсивність теплообміну характеризується коефіцієнтом теплообміну $\alpha = const$. В такому випадку в шарі теплоізоляції матиме місце розподіл температури $T(r)$ (рис. 11.4). За незмінних значень температур $T_0, T_c = const$ температура буде змінною в шарі теплоізоляції від її внутрішньої до зовнішньої поверхні, залишаючись при цьому сталою в часі. Знаходження розподілу $T(r)$ є практично важливим завданням для вибору оптимальної щодо тепловтрат товщини шару теплоізоляції (оцінюється зовнішнім радіусом R ізолюваного трубопроводу), уникнення небажаних явищ (як-то: конденсація вологи всередині шару теплоізоляції тощо).

Згідно закону Фур'є, щільність теплового потоку, що передається шляхом теплопровідності в речовині при нерівномірному розподілі температури T , пропорційна градієнту температури $grad T$:

$$q = -\lambda \cdot grad T,$$

де q – вектор щільності теплового потоку, λ – коефіцієнт теплопровідності речовини (шару теплоізоляції).

Припустимо, що у даному випадку (для трубопроводу достатньо великої довжини $l \gg R$) внаслідок осьової симетрії градієнт температури (і відповідно

– тепловий потік) має лише одну, радіальну складову dT/dr , тому для опису процесу теплопровідності можемо обмежитися однією незалежною змінною, і, отже, звичайним диференціальним рівнянням:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dT}{dr} = 0, \quad R_0 \leq r \leq R, \quad (11.10)$$

де r – просторовий напрям руху теплового потоку (незалежна змінна інтегрування), T – температура.

Граничні умови для «одновимірного» випадку передачі теплоти теплопровідністю такі.

На зовнішній поверхні радіуса R тепловий потік, що надходить із шару теплоізоляції, дорівнює тепловому потоку, який сприймається довкіллям, тобто $-\lambda \cdot \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} \cdot 2 \cdot \pi \cdot R \cdot l = \alpha \cdot (T(r) - T_c) \cdot 2 \cdot \pi \cdot R \cdot l$. Після скорочення на константи $2 \cdot \pi \cdot R \cdot l = \text{const} \neq 0$, для зовнішньої поверхні радіуса R маємо: $\alpha \cdot T(r) + \lambda \cdot \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} = \alpha \cdot T_c$.

$$T(r) + \lambda \cdot \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} = \alpha \cdot T_c.$$

На внутрішній поверхні шару теплоізоляції радіусу R_0 , прилеглої до стінки трубопроводу, приймемо $T(R_0) = T_0$. Отже, граничні мови мають вигляд:

$$\begin{aligned} \text{при } r = R_0: T(R_0) &= T_0, \\ \text{при } r = R: \alpha \cdot T(r) + \lambda \cdot \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} &= \alpha \cdot T_c. \end{aligned} \quad (11.11)$$

Отже, досліджуваний процес описується лінійним однорідним звичайним диференціальним рівнянням другого порядку (11.10) та лінійними граничними умовами третього роду (11.11).

Лінійна крайова задача (11.10)-(11.11) співвідноситься із загальним випадком (11.8)-(11.9) таким чином: $p(x) = \frac{1}{r}$; $q(x) = 0$; $f(x) = 0$; $\alpha_0 = 1$; $\alpha_1 = 0$; $A = T_0$; $\beta_0 = 1$; $\beta_1 = \lambda$; $B = \alpha \cdot T_c$.

Однорідна крайова задача завжди має «тривіальний» розв'язок $y(x) = 0$. Однак у прикладних дослідженнях найчастіше для однорідної задачі важливо знайти "нетривіальний" розв'язок $y(x) \neq 0$. У цьому випадку до звичайного диференціального рівняння або до граничних умов (11.9) додають спеціальну змінну (параметр), змінюючи яку можна домогтися, щоб при деяких його значеннях однорідна крайова задача, крім тривіального, мала розв'язок, відмінний від нульового. У деяких випадках такий параметр вже присутній у вихідному формулюванні крайової задачі і має певний фізичний зміст. Такі значення вказаного параметру, за яких однорідна крайова задача (11.8)- (11.9) має "нетривіальний" розв'язок $y(x) \neq 0$, називають *власними значеннями крайової задачі*, а відповідні таким значенням параметру розв'язку – *власними функціями крайової задачі*. Знаходження власних значень та власних функцій складає зміст задачі на власні значення (задачі Штурма – Ліувілля).

11.3 МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ

Методи розв'язання крайових задач прийнято поділяти на аналітичні (точні) та чисельні (наближені) [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 35-37, 39].

Аналітичні методи вивчаються в розділі теорії диференціальних рівнянь курсу математичного аналізу. Аналітичні методи розв'язання крайових задач дають функціональний (а не табличний) розв'язок, який в загальному випадку є незалежним від граничних умов крайової задачі. Однак, аналітичні методи застосовні до розв'язання досить вузького класу рівнянь.

Чисельні методи розв'язання крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь можна поділити на три групи [1, 13, 21-23, 27-29, 39]:

- методи зведення крайової задачі до послідовності розв'язків задач Коші (наприклад, метод стрільби (інші назви – метод стрільб, метод прицілювання) та його модифікації – метод паралельної стрільби тощо);

- «сіткові» різницеві методи (метод скінченних різниць, метод прогонки та ін.);

- «просторові» різницеві методи (такі методи, зокрема, *метод скінченних елементів*), найчастіше використовуються для розв'язання

крайових задач для диференціальних рівнянь *в частинних похідних*, але також придатні й для випадку звичайних диференціальних рівнянь).

В окрему групу методів розв'язання крайових задач іноді виділяють *наближені методи* (серед яких – проєкційний метод Бубнова-Гальоркіна, методи колокацій, метод Рітца тощо) [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39, 45]. Наближені методи являють собою чисельні або аналітичні методи розв'язання крайових задач, адаптовані до розрахунків «вручну». У таких методах шляхом застосування спеціальних прийомів суттєво зменшено обсяг потрібних обчислень (за рахунок втрати точності).

В хіміко-технологічній практиці для розв'язання крайових задач звичайних диференціальних рівнянь найчастіше використовують метод стрільби (переважно для задач з граничними умовами першого та другого роду), та методи скінченних різниць і прогонки.

11.3.1 Зведення крайової задачі до задачі Коші. Метод стрільби

Розв'язання крайової задачі шляхом зниження ступеня диференціального рівняння найчастіше здійснюється *методом проб і помилок*, що у даному випадку має назву *методу стрільби*.

Зокрема, якщо потрібно розв'язати методом стрільби крайову задачу з граничними умовами першого роду (11.4)-(11.5), то рівняння (11.4) замінюють системою диференціальних рівнянь першого порядку (11.7).

Відомо (див. розділ 10), що для розв'язання задачі Коші для системи диференціальних рівнянь (10.7) потрібні значення шуканих функцій $y|_{x=0}$ та $T|_{x=0}$, задані *на початку* відрізка інтегрування. Цій вимозі крайова задача (11.5), (11.7) відповідає *не повністю*: якщо необхідне для розрахунку значення $T|_{x=0}$ – задано, то замість потрібного значення $y|_{x=0}$ в (10.7) присутнє значення $T|_{x=L}$ *на кінці* відрізка інтегрування.

Тому послідовність розв'язання крайової задачі (11.5), (11.7) за методом стрільби – така:

- 1) задаються величиною нев'язки (точністю обчислень) ε , приймають

довільне значення $y|_{x=0} = a_{\text{поч } 1}$;

2) на k -й ітерації ($k = 1, 2, \dots$) на інтервалі $x \in [0, L]$ одним з чисельних методів, наприклад, методом Рунге-Кутти розв'язують задачу Коші:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = y \\ \frac{dy}{dx} = \xi \cdot (T - T_a) \end{cases}$$
$$T|_{x=0} = T_1$$
$$y|_{x=0} = a_{\text{поч } k};$$

3) значення $T|_{x=L} = a_{\text{кінц } k}$, отримане внаслідок розв'язання задачі, порівнюють із T_2 з (11.5);

4) якщо виконується умова закінчення обчислень

$$|a_{\text{кінц } k} - T_2| \leq \varepsilon,$$

то обрахунок закінчено. За розв'язок приймають таблицю значень $T(x)$, $x \in [0, L]$, знайдену у п. 2. Якщо вказана умова не виконується, то приймають $k = k + 1$, потім збільшують (або зменшують) значення $a_{\text{поч } k}$ і повертаються до п. 2.

Зауваження 1. Метод стрільби найчастіше застосовують до найпростіших крайових задач з граничними умовами першого або другого роду.

Зауваження 2. Назва «метод стрільби» походить з царини найстарішого використання диференціальних рівнянь – дослідження балістики польоту артилерійських снарядів під час стрільби з гармат; коли у ході такого дослідження після низки пострілів з різними кутами підняття гармати (тобто з різними початковими умовами), які вцілюють із «недольотом» та «перельотом» (тобто відповідно з більшим та меншим за T_2 значенням $a_{\text{кінц } k}$), нарешті, певним пострілом ціль уражається ($a_{\text{кінц } k} = T_2$).

Приклад 11.3. Знайти розв'язок крайової задачі (11.4)- (11.5) з граничними умовами першого роду (приклад 11.1) методом стрільби для випадку $L = 0,1$ (м), $\xi = 0,01$ (м⁻²), $T_a = 20$ (°C) та граничних умов $T|_{x=0} = T(0) = 25$ (°C), $T|_{x=L} = T(L) = 26,85$ (°C).

Розв'язок: увівши належну заміну для зниження ступеня диференціального рівняння $\left(\frac{dT}{dx} = y\right)$ та підставивши чисельні значення, перетворимо диференціальне рівняння (11.4) до системи диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = y \\ \frac{dy}{dx} = 0,01 \cdot (T - 20). \end{cases}$$

Для розв'язання завдання методом стрільб здійснимо кілька спроб.

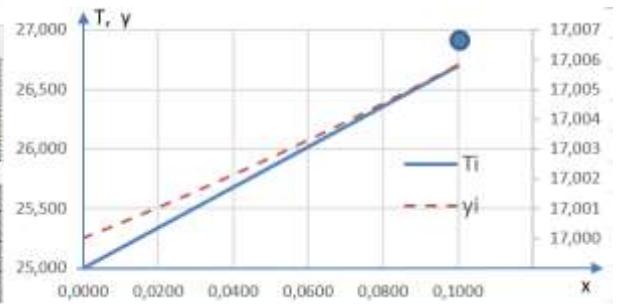
Спроба 1.

Припустимо, що початкові умови – такі: $T(0) = 25$ °C – з умови задачі, $y(0) = a_{\text{поч } 1} = 17$ °C – довільне значення. Проінтегруємо отриману задачу Коші для системи диференціальних рівнянь методом Ейлера з кроком $5 \cdot 10^{-4}$. Як видно з розрахункової таблиці та графіку (рис. 11.5, а), отримане значення $a_{\text{кінц } 1} = 26,845$; $a_{\text{кінц } 1} < T(L)$, $|a_{\text{кінц } 1} - T_2| > \varepsilon$. Знайдене значення $a_{\text{кінц } 1}$ менше за задане $T(L) = 26,85$ (°C), тому у наступній спробі збільшимо значення $y(0)$.

Спроба 2.

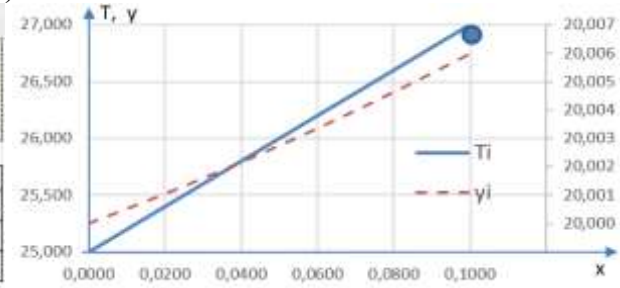
Припустимо, що початкові умови – такі: $T(0) = 25$ °C – з умови задачі, $y(0) = 20$ °C – довільне значення. Як видно з розрахункової таблиці та графіку (Рис. 11.5, б), отримане значення $a_{\text{кінц } 2} = 27,000$; $a_{\text{кінц } 2} > T(L)$, $|a_{\text{кінц } 2} - T_2| > \varepsilon$. Знайдене значення $a_{\text{кінц } k}$ є більшим за задане $T(L) = 26,85$ (°C), тому у наступній спробі зменшимо значення $y(0)$.

C8		fx		=B8*(C57-\$B\$7)*B9				
	A	B	C	D	E	GR	GS	GT
1	Вирішення крайової задачі методом стрільби					$a_{\text{кінц } k} - T_2 =$		
2	$\frac{dT}{dx} = y$		$T(0) =$	25		26,700	-	26,85
3	$\frac{dy}{dx} = 0,01 \cdot (y - 20)$		$y(0) =$	17				
4			$T(L) =$	26,85				= -0,150
5	Спроба 1		$\varepsilon =$	0,01		продовж		
6	i	0	1	2	3	198	199	200
7	x_i	0,0000	0,0005	0,0010	0,0015	0,0990	0,0995	0,1000
8	T_i	25,000	25,009	25,017	25,026	26,663	26,692	26,700
9	y_i	17,000	17,000	17,000	17,000	17,006	17,006	17,006



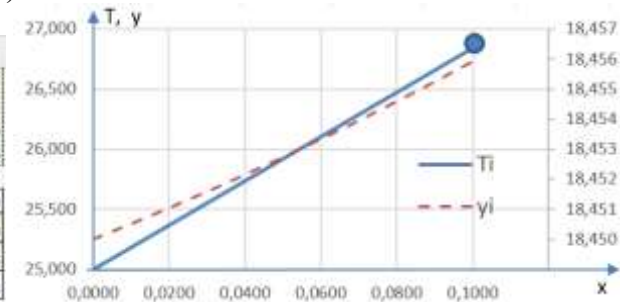
а)

	A	B	C	D	E	GR	GS	GT
1	Вирішення крайової задачі методом стрільби					$a_{\text{кінц } k} - T_2 =$		
2	$\frac{dT}{dx} = y$		$T(0) =$	25		27,000	-	26,85
3	$\frac{dy}{dx} = 0,01 \cdot (y - 20)$		$y(0) =$	20				
4			$T(L) =$	26,85				= 0,150
5	Спроба 2		$\varepsilon =$	0,01		продовж		
6	i	0	1	2	3	198	199	200
7	x_i	0,0000	0,0005	0,0010	0,0015	0,0990	0,0995	0,1000
8	T_i	24,000	25,010	25,020	25,030	26,980	26,990	27,000
9	y_i	20,000	20,000	20,000	20,000	20,006	20,006	20,006



б)

	A	B	C	D	E	GR	GS	GT
1	Вирішення крайової задачі методом стрільби					$a_{\text{кінц } k} - T_2 =$		
2	$\frac{dT}{dx} = y$		$T(0) =$	25		26,845	-	26,85
3	$\frac{dy}{dx} = 0,01 \cdot (y - 20)$		$y(0) =$	18,45				
4			$T(L) =$	26,85				= -0,005
5	Спроба 3		$\varepsilon =$	0,01		закінч		
6	i	0	1	2	3	198	199	200
7	x_i	0,0000	0,0005	0,0010	0,0015	0,0990	0,0995	0,1000
8	T_i	25,000	25,009	25,018	25,028	26,827	26,836	26,845
9	y_i	18,450	18,450	18,450	18,450	18,456	18,456	18,456



в)

Рис. 11.5. Розв'язання крайової задачі з граничними умовами першого роду методом стрільби: а) – «недоліт» методу стрільби, б) – «переліт» методу стрільби, в) – вдала спроба методу стрільби

Спроба 3.

Припустимо, що початкові умови – такі: $T(0) = 25$ °C – з умови задачі, $y(0) = 18,45$ °C – довільне значення. Як видно з розрахункової таблиці та графіку (рис. 11.5, в), отримане значення $a_{\text{кінц } 3} = 27,000$; $a_{\text{кінц } 3} \approx T(L)$, $|a_{\text{кінц } k} - T_2| < \varepsilon$. Знайдене значення $a_{\text{кінц } k}$ приблизно дорівнює заданому $T(L) = 26,85$ (°C), тому обчислення вважаємо закінченими. За відповідь приймаємо таблицю значень $T(x)$, уміщену у рядках 7 та 8 розрахункової таблиці на рис. 11.5, в.

11.3.2 Методи скінченних різниць

Найпоширенішою альтернативою методу стрільби є скінченно-різницевий підхід [1, 5, 9, 10, 27-29, 30, 32, 33, 39, 45], згідно якого похідні у вихідному рівнянні замінюють на скінченні різниці (докладніше процес такої заміни було представлено вище у розділі 9.) Таким чином, лінійне диференціальне рівняння перетворюється на систему лінійних алгебраїчних рівнянь, які можна розв'язати за допомогою відповідних методів (див. розділ 3).

Розглянемо два чисельні методи, які реалізують скінченно-різницевий підхід розв'язання крайових задач: метод скінченних різниць та його модифікацію – метод прогонки [1, 13].

11.3.2.1 Метод скінченних різниць

Розв'язання крайової задачі найпростішим методом скінченних різниць включає такі етапи:

1. Розраховують множину з n точок (вузлів) на інтервалі інтегрування $[a, b]$: $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ (рис. 11.6). Такий спосіб розбиття $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 1, 2, \dots, n$ являє собою найпростіший варіант обчислювальної сітки, при цьому стала відстань між сусідніми вузлами $\Delta x = h = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$ називається кроком сітки (тут розглядатимемо найпростіший випадок *рівномірної* сітки, коли $h = \frac{b-a}{n} = \text{const}$).

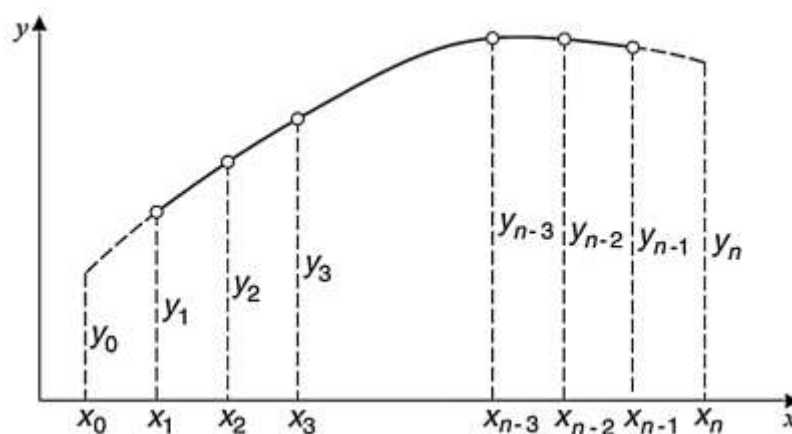


Рис. 11.6. Сіткове розбиття при розв'язанні крайової задачі методами скінченних різниць

Наближене розв'язання рівняння (11.1) визначається у вузлах сітки, тобто воно є множиною значень $y_i = y(x_i)$, $i = 0, 2, \dots, n$. Таку множину часто називають *сітковою функцією* [1, 13].

2. Замінюють похідні у рівнянні (11.1) та у граничних умовах деякими різницевиими відношеннями (див. розділ 8), визначеними на сітці. Нагадаємо, що найпростіший спосіб такої заміни ґрунтується на використанні розкладу у ряд Тейлора.

Класичне визначення похідної функції однієї змінної записується як [13]:

$$\frac{du}{dx} \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x}.$$

Розкладемо функцію u в ряд Тейлора в околі точки x_0 :

$$u(x) = u(x_0) - \frac{\partial u}{\partial x} \cdot dx + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot dx^2 + \dots$$

Нехай $x = x_0 + \Delta x = x_0 + h$. Тоді отримаємо:

$$\frac{du}{dx}(x_0) = \frac{u(x) - u(x_0)}{h} = \frac{u(x_0 + h) - u(x_0)}{h},$$

де $\Delta x = h$ – приріст аргументу (крок сітки), що обирається досить малим.

Наведена рівність називається *правою скінченною різницею* [1, 13].

Інша форма запису правої скінченної різниці:

$$u_x^+(i) = \frac{u_{i+1} - u_i}{h}.$$

Якщо $x = x_0 - h$, то буде отримано *ліву скінченну різницю* [1, 13]:

$$u_x^-(i) = \frac{u_i - u_{i-1}}{h}.$$

Застосовується також третя форма запису різницевих відносин, звана *центральною скінченною різницею* [1, 13]:

$$u_x^o(i) = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2 \cdot h}.$$

Графічна інтерпретація трьох типів різницевих апроксимацій похідних показана на рис. 11.7: АВ – ліва скінченна різниця, СВ – права скінченна різниця, АС – центральна скінченна різниця.

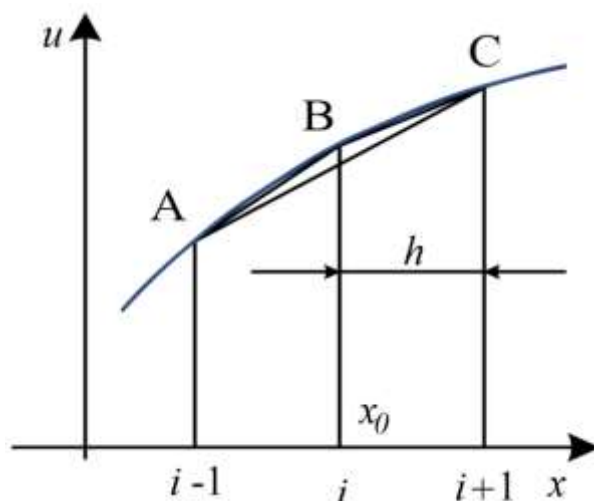


Рис. 11.7. Геометричний зміст типів різницевих апроксимацій похідних

Аналогічним чином отримують різницеве співвідношення для другої похідної. $u_{xx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$.

Представимо другу похідну u_{xx} через першу похідну u_x (використовуємо праву скінченну різницю):

$$u_{xx}(x_0) = \frac{du}{dx}(u_x(x_0)) = \frac{u_x(x_0 + h) - u_x(x_0)}{h}. \quad (11.12)$$

Тепер представимо похідні $u_x(x_0 + h)$ та $u_x(x_0)$ через ліву скінченну різницю (це робиться, щоб остаточний результат був «зміщений праворуч» задля зменшення похибки):

$$u_x^-(x_0 + h) = \frac{u(x_0 + h) - u(x_0)}{h}$$

$$u_x^-(x_0) = \frac{u(x_0) - u(x_0 - h)}{h}.$$

Підставивши ці вирази для $u_x^-(x_0 + h), u_x^-(x_0)$ до вищенаведеного

виразу (11.12), отримаємо:

$$u_{xx} = \frac{u(x_0+h) - 2 \cdot u(x_0) + u(x_0-h)}{h^2} = \frac{u_{i+1} - 2 \cdot u_i + u_{i-1}}{h^2}.$$

Отже, у методі скінченних різниць для крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь найчастіше застосовують такі різницеві відношення (сформульовані на основі (11.12)):

- для “зовнішніх” точок інтервалу інтегрування $[a, b]$:

$$\begin{aligned} y'_0 &= \frac{y_1 - y_0}{h}, \\ y'_n &= \frac{y_n - y_{n-1}}{h}; \end{aligned} \tag{11.13}$$

- для “внутрішніх” точок інтервалу інтегрування (центрально-різницеві співвідношення):

$$\begin{aligned} y'_1 &= \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \\ y''_1 &= \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \end{aligned} \tag{11.14}$$

Для другої похідної:

$$\frac{d^2 y}{dx^2}(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{\Delta x^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1,$$

де $h = \Delta x$ – крок сітки (мала величина).

Зауваження. Крім (11.13)-(11.14), у методах скінченних різниць можуть бути застосовані різні варіанти апроксимації похідних крайової задачі, зокрема центрально-різницеві, «лівограничні» та «правограничні» співвідношення [13].

Застосовуючи наближені різницеві представлення, наприклад, (11.13)-(11.14), замість диференціального представлення крайової задачі (11.1)-(11.2) отримують систему різницевих рівнянь для кожного вузла сітки

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b.$$

Наприклад, для лінійної крайової задачі (11.8)- (11.9) з урахуванням різницьових відношень (11.13)-(11.14) отримуємо систему різницьових лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i \\ (i = 1, 2, \dots, n-1), \\ \alpha_0 y_0 + \alpha_1 \frac{y_1 - y_0}{h} = A; \beta_0 y_n + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B, \end{cases} \quad (11.15)$$

де $\alpha_0, \alpha_1, A, \beta_0, \beta_1, B$ – відомі константи лінійної крайової задачі, y_i ($i = 1, 2, \dots, n-1$) – шукані значення сіткової функції (y_0, y_n – відомі з граничних умов).

Набір різницьових рівнянь, визначених на деякій сітці (наприклад, (11.15)), називається *скінченно-різницевою схемою* (або просто *різницевою схемою*) [1, 13].

3. Розв'язують різницьову схему одним із методів розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь і в результаті отримують шукану функцію $y = y(x)$.

4. Для знаходження розв'язку із заданою точністю використовують *метод подвійного перерахунку* (за принципом, аналогічним описаному у розділі з чисельного обрахунку визначених інтегралів).

Приклад 11.4. Знайти розв'язок крайової задачі (11.4)-(11.5) з граничними умовами першого роду (приклад 11.1) методом скінченних різниць для випадку $L = 0,1$ (м), $\xi = 0,01$ (м⁻²), $T_a = 20$ (°C) та граничних умов $T(0) = 25$ (°C), $T(L) = 26,85$ (°C).

Розв'язок: з урахуванням наданих чисельних значень крайова задача (11.4)-(11.5) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 T}{dx^2} &= 0,01 \cdot (T - 20), \\ T(0) &= 25, \end{aligned} \quad (11.16)$$

$$T(0,1) = 26,85.$$

Побудуємо рівномірну сітку ($n = 5$), прийнявши значення $\Delta x = 0,02$:

$$x_0 = 0, x_1 = 0,02, x_2 = 0,04, x_3 = 0,06, x_4 = 0,08, x_5 = 0,1.$$

Замінімо похідні у рівнянні різницевиими відношеннями:

$$\frac{d^2 T}{dx^2}(x_i) = \frac{T_{i+1} - 2 \cdot T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2},$$

$$i = 1, 2, 3, 4.$$

Отримуємо крайову задачу у скінченно-різницевій формі:

$$\frac{T_{i+1} - 2 \cdot T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = 0,01 \cdot (T - 20),$$

$$T_0 = 25,$$

$$T_5 = 26,85.$$

Проводимо алгебраїчні перетворення і зводимо подібні:

$$-T_{i-1} + (2 + 0,01 \cdot \Delta x^2) \cdot T_i - T_{i+1} = 0,01 \cdot 20 \cdot \Delta x^2,$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1.$$

$$-T_{i-1} + 2,000004 \cdot T_i - T_{i+1} = 0,000080,$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1.$$

Це рівняння застосовується до кожного з внутрішніх вузлів сітки. «Зовнішні» вузли визначаються граничними умовами ($T_0 = 25$, $T_5 = 26,85$). Отже, отримано скінченно-різницеву схему:

$$\begin{cases} -T_0 + 2,000004 \cdot T_1 - T_2 = 0,00008 \\ -T_1 + 2,000004 \cdot T_2 - T_3 = 0,00008 \\ -T_2 + 2,000004 \cdot T_3 - T_4 = 0,00008 \\ -T_3 + 2,000004 \cdot T_4 - T_5 = 0,00008, \end{cases}$$

або, із врахуванням граничних умов:

$$\begin{cases} -25 + 2,000004 \cdot T_1 - T_2 = 0,00008 \\ -T_1 + 2,000004 \cdot T_2 - T_3 = 0,00008 \\ -T_2 + 2,000004 \cdot T_3 - T_4 = 0,00008 \\ -T_3 + 2,000004 \cdot T_4 - 26,85 = 0,00008, \end{cases}$$

після перетворень:

$$\begin{cases} 0 + 2,000004 \cdot T_1 - T_2 = 25,00008 \\ -T_1 + 2,000004 \cdot T_2 - T_3 = 0,00008 \\ -T_2 + 2,000004 \cdot T_3 - T_4 = 0,00008 \\ -T_3 + 2,000004 \cdot T_4 - 0 = 26,85008, \end{cases}$$

чи у матричному вигляді:

$$\begin{pmatrix} 2,000004 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2,000004 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2,000004 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2,000004 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25,00008 \\ 0,00008 \\ 0,00008 \\ 26,85008 \end{pmatrix}.$$

Зауваження 1. Скінченно-різницева схема методу скінченних різниць, як можна бачити, являє собою систему лінійних алгебраїчних рівнянь, кількість яких збігається з кількістю внутрішніх вузлів сітки. Чим більша точність потрібна, тим менший крок $\Delta x = h$ (і відповідно – тим більше точок (вузлів) сітки n) слід брати до розрахунку.

Зауваження 2. Матриця коефіцієнтів скінченно-різницевої схеми має специфічну структуру: вона заповнена ненульовими елементами вздовж головної діагоналі. Для розв’язання систем лінійних рівнянь з матрицями системи такого роду (що мають назву *тридіагональних матриць*) розроблено спеціальні ефективні чисельні методи [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39]. Втім, для скінченно-різницевої схем невеликої розмірності можна скористатися загальними методами розв’язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (див. розділ 3).

Результати розрахунків для знаходження таблиці значень функції $y = y(x)$ наведено на рис. 11.8, де систему рівнянь скінченно-різницевої схеми розв'язано матричним методом:

$$\begin{pmatrix} 2,000004 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2,000004 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2,000004 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2,000004 \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} 25,00008 \\ 0,00008 \\ 0,00008 \\ 26,85008 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25,36995 \\ 25,73993 \\ 26,10993 \\ 26,47995 \end{pmatrix}.$$

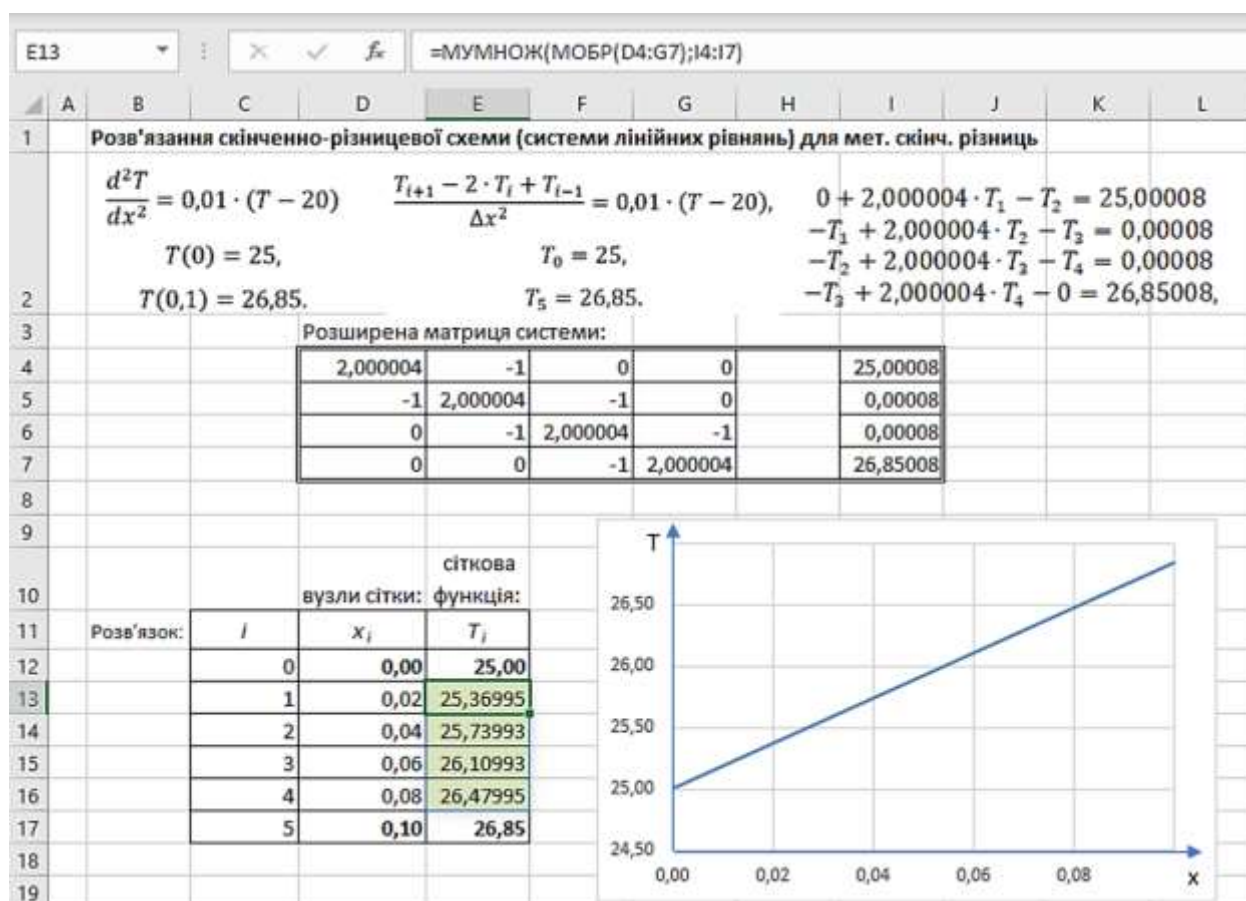


Рис. 11.8. Розв'язання крайової задачі з граничними умовами першого роду методом скінченних різниць

Приклад 11.5. В ході досліджень з молекулярної інженерії було з'ясовано, що зміну концентрації цільового компонента внаслідок хімічного перетворення та дифузії у сполучених тонких каналах (порах каталізатора) у першому наближенні можна описати лінійною крайовою задачею:

$$\frac{d^2C}{dx^2} + D_A(x) \cdot \frac{dC}{dx} - k \cdot C = \omega, \quad x \in [1,2; 1,5], \quad (11.17)$$

$$\begin{cases} C(1,2) = 0,75, \\ C(1,5) + \frac{dC}{dx}(1,5) = 1, \end{cases} \quad (11.18)$$

де $x \in [1,2; 1,5]$ – напрям зміни градієнта концентрації (незалежна змінна інтегрування), мм, $C, C_{\text{поч}}, C_{\text{кінц}}$ – відповідно поточна, початкова, кінцева концентрація реагенту, ммоль/л, $D_A(x) = 2 \cdot x$ – коефіцієнт дифузії $\text{мм}^2/\text{с}$, $k = 1$ – константа швидкості для хімічного перетворення, $\text{м}^3/(\text{моль}^2 \cdot \text{с})$, $\omega = 2$ – просторовий коефіцієнт.

Знайти розв’язок наведеної лінійної крайової задачі методом скінченних різниць.

Розв’язок: з урахуванням наданих чисельних значень крайова задача набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{d^2C}{dx^2} + 2 \cdot x \cdot \frac{dC}{dx} - C &= 4, \quad x \in [1,2; 1,5], \\ \begin{cases} C(1,2) = 0,8, \\ C(1,5) + \frac{dC}{dx}(1,5) = 3, \end{cases} \end{aligned}$$

Позначивши $y = C$, отримаємо:

$$\begin{aligned} y''(x) + 2 \cdot x \cdot y'(x) - y &= 4, \quad x \in [1,2; 1,5], \\ \begin{cases} y(1,2) = 0,8, \\ y(1,5) + y'(1,5) = 3. \end{cases} \end{aligned}$$

Побудуємо рівномірну сітку ($n = 3$), прийнявши значення $h = \Delta x = 0,1$:

$$x_0 = 0, x_1 = 1,2, x_2 = 1,3, x_3 = 1,4.$$

Замінімо похідні у рівнянні різницевиими відношеннями, отримуємо крайову задачу у скінченно-різницевій формі;

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + 2x_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - y_i = 4,$$

$$y_0 = 0,75, y_3 + \frac{y_3 - y_2}{h} = 1, i = 1, 2, 3.$$

У відповідності до (11.15) із врахуванням граничних умов побудуємо систем лінійних рівнянь (скінченно-різницеву схему):

$$\begin{cases} \frac{y_2 - 2y_1 + 0,8}{0,01} + 2 \cdot 1,3 \cdot \frac{y_2 - 0,8}{0,2} - y_1 = 4 \\ \frac{y_3 - 2y_2 + y_1}{0,01} + 2 \cdot 1,4 \cdot \frac{y_3 - y_1}{0,2} - y_2 = 4 \\ y_3 + \frac{y_3 - y_2}{0,1} = 3, \end{cases}$$

або, після перетворень:

$$\begin{cases} -0,4020 \cdot y_1 + 0,2260 \cdot y_2 = -0,1312 \\ 0,1720 \cdot y_1 - 0,4020 \cdot y_2 + 0,2280 \cdot y_3 = 0,0080 \\ -y_2 + 1,1000 \cdot y_3 = 0,3000, \end{cases}$$

чи у матричному вигляді:

$$\begin{pmatrix} -0,4020 & 0,2260 & 0 \\ 0,1720 & -0,4020 & 0,2280 \\ 0 & -1 & 1,1000 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,1312 \\ 0,0080 \\ 0,3000 \end{pmatrix}.$$

Результати розрахунків для знаходження таблиці значень функції $y = y(x)$ наведено на рис. 11.9, де систему рівнянь скінченно-різницевої схеми розв'язано матричним методом:

$$\begin{pmatrix} -0,4020 & 0,2260 & 0 \\ 0,1720 & -0,4020 & 0,2280 \\ 0 & -1 & 1,1000 \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} -0,1312 \\ 0,0080 \\ 0,3000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,9590 \\ 1,1253 \\ 1,2958 \end{pmatrix}.$$

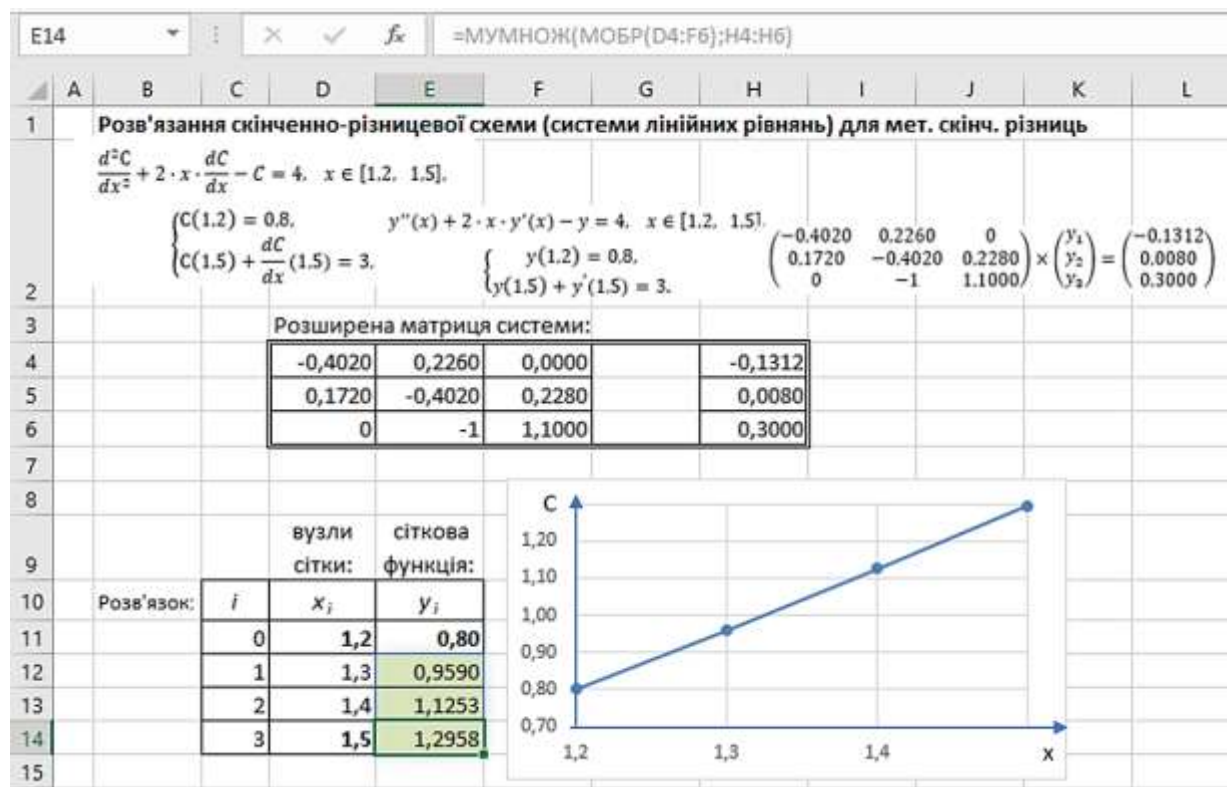


Рис. 11.9. Розв'язання лінійної крайової задачі з граничними умовами третього роду методом скінченних різниць

11.3.2.2 Модифікований метод скінченних різниць (метод прогонки)

У випадках великого діапазону інтегрування або підвищеної точності розрахунку, доводиться розв'язувати крайову задачу на сітці великого обсягу ($n \gg 10$). У випадку скінченно-різницевого підходу у такому разі необхідно скласти і розв'язувати систему лінійних рівнянь великої розмірності, що може бути пов'язане із певними обчислювальними труднощами [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39].

Метод прогонки значній мірі збігається з найпростішим методом скінченних різниць, за винятком способу знаходження коренів різницевої схеми [13].

Розв'язання крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь методом прогонки включає такі етапи:

1. Будують обчислювальну сітку з n вузлів на інтервалі інтегрування $[a, b]: a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ (рис. 11.6).

2. Замінюють похідні у рівнянні (11.1) та у граничних умовах відповідними різницевиими відношеннями, визначеними на сітці (наприклад,

використовують вирази (11.13)-(11.14)) і отримують скінченно-різницеву схему – систему різницевих рівнянь для кожного вузла сітки

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b.$$

3. Розв'язують отриману систему лінійних алгебраїчних рівнянь (різницеву схему) *методом Томаса*, спеціально розробленим для розв'язання систем рівнянь із тридіагональною матрицею (див. також розділ 3), і в результаті отримують шукану функцію $y = y(x)$.

4. Для знаходження розв'язку із заданою точністю використовують *метод подвійного перерахунку* (згідно з підходом, аналогічним описаному у розділі з чисельного обрахунку визначених інтегралів – див. розділ 9).

Метод Л.Х. Томаса для розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (має також назву «алгоритм для тридіагональних матриць», метод Гельфанда-Локуцієвського, алгоритм прогонки тощо) є модифікацією методу послідовного виключення змінних (методу Гауса). Доведено, що у разі застосування до пошуку коренів систем рівнянь із тридіагональною матрицею, метод Томаса дає змогу різко зменшити обсяг обчислень у порівнянні з традиційним методами пошуку коренів (наприклад, із згаданим методом Гауса)¹.

Метод Томаса реалізується у два етапи. На першому етапі (прямому ході) визначаються коефіцієнти прогонки, на другому етапі (зворотному ході) – обчислюються шукані корені. У випадку, якщо розв'язання крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь за методом прогонки виконують *в електронних таблицях*, зручно користатися наочним представленням алгоритму, що має назву *схема прогонки*. Покажемо принцип побудови схеми прогонки на прикладі лінійної крайової задачі (11.8)-(11.9).

Замінімо у (11.8) та (11.9) похідні скінченно-різницевиими співвідношеннями:

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad (11.19)$$

¹ Rosenberg D.U, Durill P.L., Spencer E.H. Numerical solution of partial differential equations representing fixed bed reactions. British chemical engineering. Vol. 7, 1962. No 3, p.186-190. URL: https://archive.org/details/sim_process-technology-international_1962-03_7_3/page/n1/mode/2up

$$\begin{aligned}
y_i'' &= \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2}, \\
y_0' &= \frac{y_1 - y_0}{h}, \\
y_n' &= \frac{y_n - y_{n-1}}{h}, \\
i &= 1, 2, \dots, n-1,
\end{aligned}$$

внаслідок чого отримаємо з (11.8)-(11.9) отримаємо скінченно-різницеву схему – систему лінійних алгебраїчних рівнянь (11.20)-(11.21):

$$\begin{aligned}
\left\{ \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + q_i y_i = f_i, \right. \\
i = 0, 1, 2, \dots, n-2,
\end{aligned} \tag{11.20}$$

$$\begin{cases} \alpha_0 y_0' + a_1 \frac{y_1 - y_0}{h} = A \\ \beta_0 y_n + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B. \end{cases} \tag{11.21}$$

Розглянемо першу половину скінченно-різницевої схеми – $(n-1)$ лінійних алгебраїчних рівнянь (11.20). Уведемо додаткові позначення $m_i = -2 + hp_i$; $k_i = 1 - hp_i + h^2 q_i$ та виконаємо згідно з (11.20) алгебраїчні перетворення:

$$\begin{aligned}
y_{i+2} + (-2 + hp_i)y_{i+1} + (1 - hp_i + h^2 q_i)y_i &= h^2 f_i. \\
y_{i+2} + m_i y_{i+1} + k_i y_i &= h^2 f_i, \\
i &= 0, 1, 2, \dots, n-2.
\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= \frac{h^2}{m_i} f_i - \frac{1}{m_i} y_{i+2} - \frac{k_i}{m_i} y_i, \\
i &= 0, 1, 2, \dots, n-2.
\end{aligned} \tag{11.22}$$

З урахуванням (11.21), отримаємо:

$$y_{i+1} = c_i(d_i - y_{i+2}), \tag{11.23}$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, n - 2,$$

де c_i, d_i – прогонкові коефіцієнти.

Зокрема, для $i = 0$ з (11.21) та (11.22) маємо:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{h^2}{m_0} f_0 - \frac{1}{m_0} y_2 - \frac{k_0}{m_0} y_0, \\ y_0 &= \frac{Ah}{\alpha_0 h - \alpha_1} - \frac{\alpha_1}{\alpha_0 h - \alpha_1} y_1, \\ y_1 &= \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1} \left(\left(\frac{k_0 Ah}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0 \right) - y_2 \right). \end{aligned}$$

Якщо

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1}, \\ d_0 &= \frac{k_0 Ah}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0, \end{aligned} \tag{11.24}$$

то з (11.22) та (11.23) маємо:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= \frac{(h^2 f_i - k_i c_{i-1} d_{i-1}) - y_{i+2}}{m_i - k_i c_{i-1}}, \\ i &= 0, 1, 2, \dots, n - 2. \end{aligned} \tag{11.25}$$

Прирівнявши (11.23) та (11.25), отримаємо розрахункові формули для прогонкових коефіцієнтів:

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{1}{m_i - k_i c_{i-1}}, \\ d_i &= h^2 f_i - k_i c_{i-1} d_{i-1}, \\ i &= 1, 2, \dots, n - 2. \end{aligned} \tag{11.26}$$

Отже, *прямий хід* схеми прогонки (табл. 11.1) полягає у побудові обчислювальної сітки $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 1, 2, \dots, n$ та розрахунку прогонкових коефіцієнтів c_i, d_i за (11.24), (11.26).

Таблиця 11.1. Схема прогонки

i	Прямий хід					Зворотній хід
	x_i	m_i	k_i	d_i	c_i	y_i
0	x_0	$m_0 = -2 + hp_0$	$k_0 = 1 - hp_0 + h^2q_0$	$d_0 = \frac{k_0Ah}{\alpha_1 - \alpha_0h} + h^2f_0$	$c_0 = \frac{\alpha_1 - \alpha_0h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0h) + k_0}$	$y_0 = \frac{\alpha_1y_1 - Ah}{\alpha_1 - \alpha_0h}$
1	x_1	$m_1 = -2 + hp_1$	$k_1 = 1 - hp_1 + h^2q_1$	$d_1 = h^2f_1 - k_1c_0d_0$	$c_1 = \frac{1}{m_1 - k_1c_0}$	$y_1 = c_0(d_0 - y_2)$
2	x_2	$m_2 = -2 + hp_2$	$k_2 = 1 - hp_2 + h^2q_2$	$d_2 = h^2f_2 - k_2c_1d_1$	$c_2 = \frac{1}{m_2 - k_2c_1}$	$y_2 = c_1(d_1 - y_3)$
...	...	...	...	...	...	...
$n-2$	x_{n-2}	$m_{n-2} = -2 + hp_{n-2}$	$k_{n-2} = 1 - hp_{n-2} + h^2q_{n-2}$	$d_{n-2} = h^2f_{n-2} - k_{n-2}c_{n-3}d_{n-3}$	$c_{n-2} = \frac{1}{m_{n-2} - k_{n-2}c_{n-3}}$	$y_{n-2} = c_{n-3}(d_{n-3} - y_{n-1})$
$n-1$	x_{n-1}	$m_{n-1} = -2 + hp_{n-1}$	$k_{n-1} = 1 - hp_{n-1} + h^2q_{n-1}$	$d_{n-1} = h^2f_{n-1} - k_{n-1}c_{n-2}d_{n-2}$	$c_{n-1} = \frac{1}{m_{n-1} - k_{n-1}c_{n-2}}$	$y_{n-1} = c_{n-2}(d_{n-2} - y_n)$
n	x_n	$m_n = -2 + hp_n$	$k_n = 1 - hp_n + h^2q_n$	$d_n = h^2f_n - k_nc_{n-1}d_{n-1}$	$c_n = \frac{1}{m_n - k_nc_{n-1}}$	$y_n = \frac{\beta_1c_{n-2}d_{n-2} + B}{\beta_1(1 + c_{n-2}) + B}$

Під час зворотного ходу схеми прогонки послідовно визначають шукану функцію $y = y(x)$, починаючи з y_n :

$$y_n = \frac{\beta_1c_{n-2}d_{n-2} + Bh}{\beta_1(1 + c_{n-2}) + B_0h}$$

$$y_{n-1} = c_{n-2}(d_{n-2} - y_n)$$

$$y_{n-2} = c_{n-3}(d_{n-3} - y_{n-1})$$

.....

$$y_1 = c_0(d_0 - y_2)$$

$$y_0 = \frac{\alpha_1y_1 - Ah}{\alpha_1 - \alpha_0h}.$$

Приклад 11.6. Використовуючи схему прогонки, розв'язати лінійну крайову задачу з прикладу 11.5:

$$y''(x) + 2 \cdot x \cdot y'(x) - y = 4, \quad x \in [1,2, 1,5],$$

$$\begin{cases} y(1,2) = 0,8, \\ y(1,5) + y'(1,5) = 3. \end{cases}$$

Розв'язок: побудуємо рівномірну сітку ($n = 600$), прийнявши значення

$$h = \Delta x = 0,0005.$$

Запишемо $x_0 = 1,2000$ та обчислимо $x_1 = x_0 + h = 1,2005$ і так далі.

На прямому ході послідовно обчислимо прогонкові коефіцієнти:

$$p_0 = 2x_0 = 2,4000, \quad q_0 = -1,$$

$$f_0 = 4, \quad m_0 = -2 + hp_0 = -1,9988,$$

$$k_0 = 1 - hp_0 + h^2q_0 = 0,9988,$$

$$c_0 = \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1} = -0,5003,$$

$$d_0 = \frac{k_0 A h}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0 = -0,7990, \text{ і так далі.}$$

На зворотному ході схеми прогонки послідовно обчислимо значення сіткової функції, починаючи з останнього:

$$y_n = y_{600} = \frac{\beta_1 c_{n-2} d_{n-2} + B h}{\beta_1 (1 + c_{n-2}) + B_0 h} = \frac{\beta_1 c_{598} d_{598} + B h}{\beta_1 (1 + c_{598}) + B_0 h} = 1,292421,$$

$$y_{n-1} = y_{599} = c_{598} (d_{598} - y_{600}) = 1,291567 \text{ і т. д.}$$

Результати розрахунків за схемою прогонки наведено на рис. 11.10.

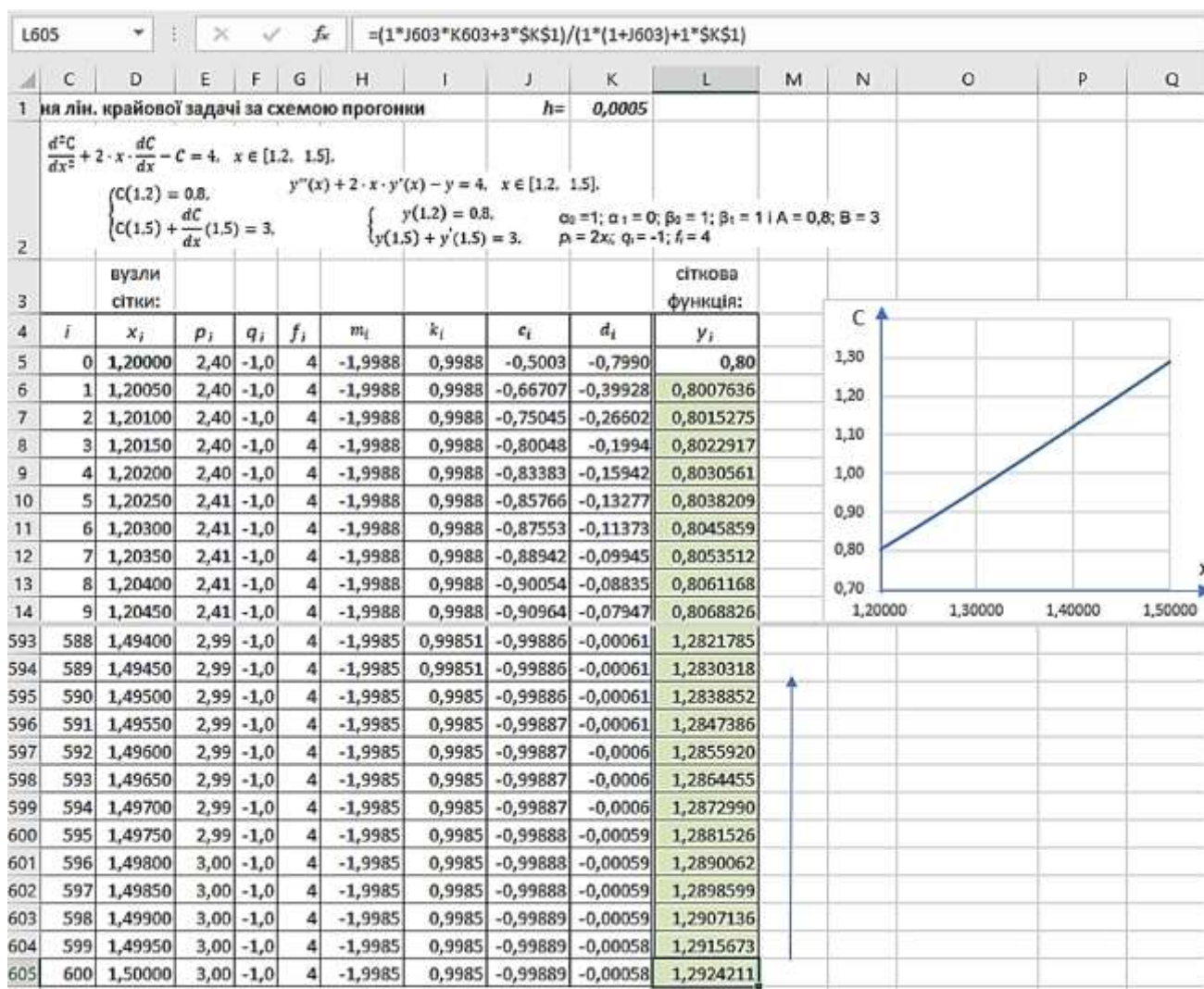


Рис. 11.10. Розв'язання лінійної крайової задачі з граничними умовами третього роду за схемою прогонки

Зауваження. Як видно із наведеного вище, алгоритм методу прогонки значною мірою збігається з алгоритмом методу скінченних різниць, тому деякі фахівці з чисельних методів вважають вказані методи (метод скінченних різниць та метод прогонки) *не двома різними, а одним* методом розв'язання крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь [3-5, 13, 21-23, 27-29, 35-37, 39].

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 11

1. Навести і пояснити формулювання крайової задачі для звичайного диференціального рівняння у порівнянні із задачею Коші.
2. Навести і пояснити склад і геометричну інтерпретацію крайової задачі

з граничними умовами першого роду для звичайного диференціального рівняння.

3. Навести і пояснити склад і геометричну інтерпретацію крайової задачі з граничними умовами другого роду для звичайного диференціального рівняння.

4. Пояснити загальний принцип чисельного розв'язання методом стрільби крайової задачі першого та другого роду для звичайного диференціального рівняння.

5. В якій формі отримується результат чисельного розв'язку звичайних диференціальних рівнянь?

6. Навести математичний апарат, алгоритм та геометричну інтерпретацію методу стрільби.

7. Навести і пояснити склад крайової задачі з граничними умовами третього роду на прикладі лінійної крайової задачі.

8. Послідовність розв'язання крайової задачі методом скінченних різниць. Пояснити поняття сітки (сіткового розбиття), сіткової функції, скінченно-різницевої схеми.

9. Пояснити відмінність методу прогонки від найпростішого методу скінченних різниць. Що таке тридіагональна матриця?

10. Навести структуру схеми прогонки для розв'язання лінійної крайової задачі і пояснити походження стовпців цієї схеми.

11. Досліджується кінетика послідовної хімічної реакції $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} P$, цільовим є продукт B . З попередніх досліджень відомі концентрації проміжного продукту B у два моменти часу: $C_B^{t=7,2\text{ c}} = 0,05$ (моль/л), $C_B^{t=445,1\text{ c}} = 0,05$ (моль/л). Також задано початкову концентрацію $C_{A0} = 1,00$ (моль/л) та константи швидкості реакцій: $k_1 = 0,008$ (с⁻¹), $k_2 = 0,004$ (с⁻¹). Кінетичне рівняння для компоненту B має вигляд:

$$\frac{dC_B(t)}{dt} = k_1 \cdot C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t} - k_2 \cdot C_B(t),$$

Специфіка дослідження передбачає вивчення зміни швидкості

наведеного процесу, тому вказане кінетичне рівняння було повторно продиференційовано за часом:

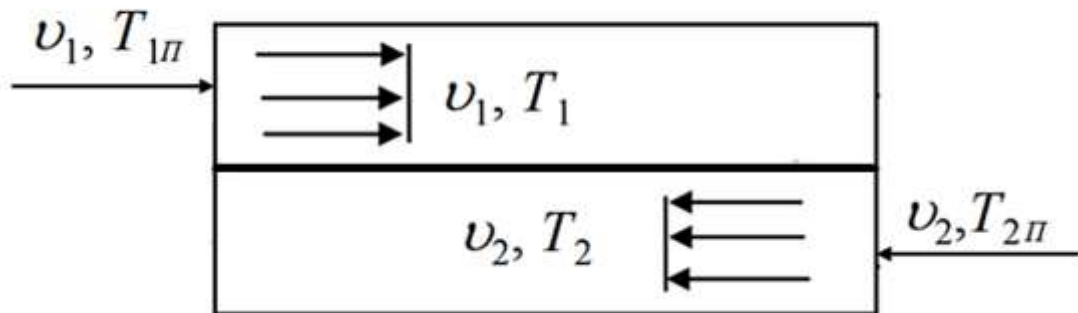
$$\frac{d^2 C_B(t)}{dt^2} = -k_1^2 \cdot C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t} - \frac{k_2 \cdot C_B(t)}{dt},$$

$$k_1 = 0,008 \text{ (с}^{-1}\text{)}, k_2 = 0,004 \text{ (с}^{-1}\text{)},$$

$$C_{A0} = 1,00 \text{ (моль/л)}, C_B^{t=7,2 \text{ с}} = 0,05 \text{ (моль/л)}, C_B^{t=445,1 \text{ с}} = 0,05 \text{ (моль/л)}.$$

Звести наведену вище крайову задачу до системи диференціальних рівнянь першого порядку та знайти її розв'язок методом стрільби.

12. Необхідно розрахувати розподіл температур за довжиною проточного кожухотрубчастого теплообмінного апарату, що описаний гідродинамічною математичною моделлю «витіснення – витіснення».



У випадку протічного режиму, як показано на схемі вище, математичний опис вказаного апарату (в стаціонарному режимі) являє собою систему з двох звичайних диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} -\mathcal{G}_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dx} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ \mathcal{G}_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dx} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases}$$

де індекси 1 та 2 належать відповідно гарячому та холодному теплоносіям; V – об'єм апарату; $\mathcal{G}$ – об'ємна витрата потоку; c_{T_1}, c_{T_2} – теплоємності теплоносіїв; F – площа поверхні теплообміну; K_T – коефіцієнт теплопередачі; T – температура теплоносія; L – довжина апарату; x – поточне значення

довжини апарату.

Граничні умови для випадку протиточного руху теплоносіїв: при $l=0$: $T_1(0)=T_{1П}$; при $l=L$: $T_2(L)=T_{2П}$.

Якщо $G_1 = 0,267$ (м³/с), $G_2 = 0,26 \cdot 10^{-3}$ (м³/с), $F=13$ (м²); $L=1,5$ (м), $K_T=60$ (Вт/м²·град), $c_{T1}=1670$ (Дж/м³·град), $c_{T2}= 4185 \cdot 10^3$ (Дж/м³·град); початкові умови $T_1(0)=T_{1П}=90,00$ (°C), $T_2(L)=T_{2П}=70,00$ (°C), то маємо:

$$\begin{cases} -445,89 \frac{dT_1}{dx} - 520(T_1 - T_2) = 0 \\ 1088,10 \frac{dT_2}{dx} - 520(T_2 - T_1) = 0, \end{cases}$$

$$T_1(0) = 90,00, T_2(L) = 70,00,$$

або, після належних перетворень:

$$\begin{cases} \frac{dT_1}{dx} = 1,1662(T_1 - T_2) \\ \frac{dT_2}{dx} = -0,4749(T_2 - T_1), \end{cases}$$

$$T_1(0) = 90,00, T_2(L) = 70,00.$$

Знайти розв'язок наведеної вище крайової задачі методом стрільби.

13. Досліджується процес дифузії, сполучений із хімічною реакцією, у порі твердого каталізатора (пора має форму, близьку до циліндричної). Компонент А вступає в реакцію на стінках пори відповідно до такого механізму:



У досліджуваному процесі вихідна речовина А дифундує в пори через нижчу концентрацію компоненту А всередині пори, ніж у «гирлі» пори. Оскільки продукт В утворюється в результаті реакції, концентрація продукту В всередині пори більша, ніж на вході, що спричиняє дифузію продукту В з пори. Нехай на вході у пору ($x=0$) має місце концентрація $C_{A_0} = 1,0$ гмоль/л. Припускається, що кінець пори ($x=L$) закритий, тому витрата компоненту А

при $x=L$ відсутня. Другою граничною умовою є умова «відсутності витрати при $x=L$ ». Математична модель для описаної ситуації може бути представлена таким чином:

$$D_A \cdot \frac{d^2 C_A}{dx^2} = k \cdot C_A^2,$$

$$C_A(0) = C_{A_0},$$

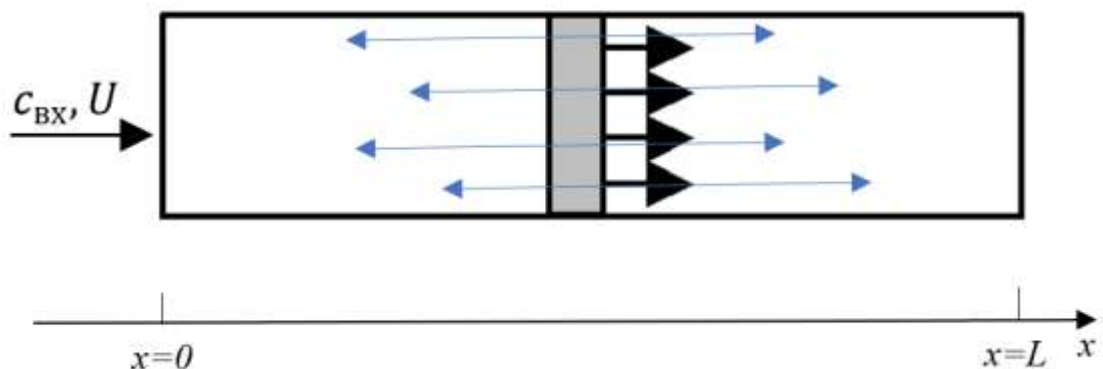
$$\frac{dC_A(L)}{dx} = 0,$$

де C_A – поточна концентрація компоненту А, $x \in [0, L]$ – напрям координат (змінна інтегрування), $k = 0,01 \text{ л/г} \cdot \text{с}$ – константа швидкості реакції, $D_A = 1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ – коефіцієнт дифузії, $L = 1 \text{ см}$ – довжина пори.

Розв'язати наведену крайову задачу методом скінченних різниць.

Зауваження: Рекомендовано застосувати для розв'язку безрозмірну відстань $y = x/L$; для «правої» граничної умови використати належну скінченно-різницеvu форму другого порядку.

14. У трубчастому реакторі з аксіально-дисперсним рухом потоків протікає реакція першого порядку.



Досліджуваний процес може бути описаний диференціальним рівнянням:

$$D \cdot \frac{d^2 c}{dx^2} - U \cdot \frac{dc}{dx} - k \cdot c = 0,$$

де c – поточна концентрація компоненту, моль/л , $x \in [0, L]$ – координата

(змінна інтегрування), м, $k = 2 \text{ год}^{-1}$ – константа швидкості реакції, $D = 5000 \text{ м}^2/\text{год}$ – коефіцієнт дифузії, $L = 100 \text{ м}$ – загальна довжина реактора, $U = 100 \text{ м}/\text{год}$ – лінійна швидкість потоку у реакторі.

Граничні умови можна сформулювати таким чином:

$$U \cdot c_{\text{вх}} = U \cdot c(x=0) - D \cdot \frac{dc}{dx}(x=0),$$

$$\frac{dc}{dx}(x=L) = 0,$$

де $c_{\text{вх}}$ – концентрація компонента у потоці на вході, $\text{моль}/\text{л}$.

Для наведеної крайової задачі:

а) знайти розв'язок методом скінченних різниць (прийняти $\Delta x = 10 \text{ м}$);

б) знайти розв'язок методом прогонки;

в) порівняти результати, отримані у п. а) та б), між собою та з наступним аналітичним розв'язком даної задачі:

$$c = \frac{U \cdot c_{\text{вх}}}{(U - D \cdot \lambda_1) \cdot \lambda_2 \cdot e^{\lambda_2 \cdot L} - (U - D \cdot \lambda_2) \cdot \lambda_1 \cdot e^{\lambda_1 \cdot L}} \times \\ \times (\lambda_2 \cdot e^{\lambda_2 \cdot L} \cdot e^{\lambda_1 \cdot L} - \lambda_1 \cdot e^{\lambda_1 \cdot L} \cdot e^{\lambda_2 \cdot L}),$$

$$\text{де } \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{U}{2 \cdot D} \cdot \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{4 \cdot k \cdot D}{U^2}} \right).$$

12 ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ

12.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 12

Вище було розглянуто методи розв'язання задачі Коші та крайові задачі для звичайних диференціальних рівнянь.

Під диференціальним рівнянням у частинних похідних розуміють диференціальне рівняння відносно функції двох або більшої кількості змінних, яке містить хоча б одну частинну похідну цієї функції [13]. При цьому сама функція та незалежні змінні можуть і не входити до рівняння явним чином. Будь-яке рівняння у частинних похідних з n змінними може бути подане у такому загальному вигляді:

$$\begin{aligned} F(x_1, x_2, \dots, x_n, u, u_{x_1}, u_{x_2}, \dots, u_{x_n}, \\ u_{x_1x_1}, u_{x_1x_2}, \dots, u_{x_nx_n}, u_{x_1x_1x_1}, \dots) = 0, \end{aligned} \quad (12.1)$$

де $x_1, x_2, \dots, x_n$ — незалежні змінні інтегрування (просторові координати, час), $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — шукана функція (концентрація, температура тощо), неперервна і така що має неперервні похідні відповідних порядків, де $u_{x_1} = \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, u_{x_1x_2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, u_{x_1x_1x_1} = \frac{\partial^3 u}{\partial x_1^3}, \dots$ — частинні похідні.

Наприклад, математична модель трубчастого реактора з повздовжнім та поперечним перемішуванням потоків у нестационарному режимі має вигляд

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_R \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - w,$$

де $c = c(t, x, r)$ — концентрація, v — лінійна швидкість потоку, w — швидкість реакції, D_L, D_R — відповідно коефіцієнти дифузії в поздовжньому та поперечному напрямках; змінні інтегрування: t — час, x, r — розподіл відповідно за радіусом та довжиною реактора.

Кілька диференціальних рівнянь у частинних похідних, які розв'язуються спільно, складають систему диференціальних рівнянь у

частинних похідних [13].

Наприклад, рух в'язкої рідини у трубопроводі може бути описаний системою диференціальних рівнянь Нав'є-Стокса:

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \Delta v_x \\ \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \Delta v_y \\ \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \Delta v_z, \end{cases}$$

де x, y, z – незалежні змінні інтегрування (просторові координати), ρ – густина, P – тиск, v_x, v_y, v_z – проекції швидкості потоку, μ – коефіцієнт динамічної в'язкості потоку.

Під *розв'язком* диференціального рівняння (12.1) розуміють функцію $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, яка обертає рівняння в тотожність відносно змінних $x_1, x_2, \dots, x_n$.

Порядок диференціального рівняння визначається порядком старшої похідної, що входить до рівняння [13].

Диференціальне рівняння в частинних похідних називається *лінійним*, якщо воно є лінійним щодо невідомої функції та всіх її похідних, з коефіцієнтами, що залежать лише від незалежних змінних, і *нелінійним*, якщо хоча б одна із згаданих умов не виконується [13].

Якщо серед незалежних змінних диференціального рівняння в частинних похідних присутній час, таке рівняння називають *нестационарним*; якщо ж серед змінних інтегрування – лише просторові змінні, то диференціальне рівняння – *стаціонарне* [13].

Диференціальні рівняння та системи диференціальних рівнянь у частинних похідних відзначаються значною різноманітністю. Вивченню видів диференціальних рівнянь у частинних похідних та способів їх розв'язання присвячено розділ математичного аналізу, що має назву «Теорія диференціальних рівнянь», зокрема, підрозділ «Рівняння математичної фізики». У прикладному аспекті подібними рівняннями займаються фахівці-

дослідники складних явищ у процесах хімічної технології: кінетики хімічних реакцій, нестационарного масо- та теплообміну тощо¹. Розглянемо лише деякі класи диференціальних рівнянь у частинних похідних, що є найбільш значимими у практиці хіміка-технолога [1, 5, 9, 10, 27-30, 32, 33, 39, 45]. Зокрема, зосередимося на лінійних рівняннях другого порядку. Для *двох незалежних змінних* лінійні диференціальні рівняння другого порядку у частинних похідних в загальному вигляді можна представити таким чином:

$$A \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2 \cdot B \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + b \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + c \cdot u = F(x, y), \quad (12.2)$$

де x, y – незалежні змінні інтегрування, A, B, C, a, b, c – деякі коефіцієнти, що є константами, або функціонально залежать від змінних інтегрування.

В залежності від особливостей диференціальних рівнянь підходи до їх розв'язання *різняються*. Тому слід розглянути класифікацію диференціальних рівнянь другого порядку у частинних похідних, яка дозволяє використовувати певні методи для розв'язання кожного з підтипів названих рівнянь.

Якщо для рівняння (12.2) вираз $(B^2 - 4 \cdot A \cdot C) < 0$, то вказане рівняння (12.2) є *еліптичним*, при $(B^2 - 4 \cdot A \cdot C) = 0$ рівняння (12.2) є *параболічним*, у разі $(B^2 - 4 \cdot A \cdot C) > 0$ рівняння (12.2) вважають *гіперболічним* [1, 13].

Еліптичні рівняння зазвичай використовуються для характеристики стаціонарних (незмінних у часі) систем. Відповідно, такі рівняння зазвичай використовуються для визначення стаціонарного розподілу досліджуваної величини.

Наприклад, до еліптичного типу відносять двовимірне рівняння Лапласа у задачі про стаціонарний розподіл температури в деякому об'ємному тілі:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0.$$

Параболічні рівняння визначають, як досліджувана величина змінюється

¹ Радченко Л.Б., Мікульонюк І.О. Моделювання процесів хімічної технології: навч. посібник. К.: «Політехніка», 2005. Ч. 1: Теоретичні основи. 126 с

як у просторі, так і в часі. Очевидно, що у випадку функцій з двома незалежними невідомими параболічні рівняння описують розподіл досліджуваної величини в просторі лише за однією координатою.

Параболічним є, наприклад, рівняння теплопровідності, що містить час та одну просторову координату:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

де $T = T(t, x)$ – температура, $\alpha > 0$ – константа, що описує швидкість поширення тепла.

Гіперболічні диференціальні рівняння у частинних похідних також описують зміну досліджуваної величини у просторі-часі [1, 13]. При цьому важливою відмінністю від рівнянь параболічного типу є наявність другої похідної за часом. Як наслідок, гіперболічні рівняння здатні описувати коливальні процеси.

До гіперболічного типу належить, зокрема, хвильове рівняння для опису поведінки рідини в пружно деформованих трубопроводах (наприклад, полімерних):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2},$$

де $v = v(t, x)$ – шукана функція, v – фазова швидкість.

Наведена вище *математична* класифікація диференціальних рівнянь у частинних похідних ґрунтується на так званому «методі характеристик»¹ і є загальнопоширеною [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39], оскільки кожна з категорій рівнянь пов'язана конкретними випадками застосування і спеціальними методами розв'язання.

Зауваження 1. У випадках, коли A , B і C залежать від змінних інтегрування, розрахунку виразу $(B^2 - 4 \cdot A \cdot C)$ виявляється недостатньо для

¹ Lapidus, L., Pinder G. F. Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering. NY: Wiley, 1999. 694 p.

однозначної класифікації – рівняння може належати до іншої категорії: так, при $A = A(y) = y$ рівняння $y \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ є *еліптичним* в разі $y > 0$, *параболічним* при $y = 0$, та *гіперболічним* при $y < 0$.

Зауваження 2. Використовують також *натурну (фізичну) класифікацію* диференціальних рівнянь у частинних похідних, пов'язану із галузями їх застосування (зокрема, розділяють стаціонарні («рівноважні») задачі, еволюційні («маршеві») задачі та відповідні їм диференціальні рівняння у частинних похідних)¹ [13, 29, 30, 32, 33, 35-37, 39].

Будь-яке диференціальне рівняння у частинних похідних має безліч розв'язків. Практичний сенс мають розв'язки, що задовольняють відповідним *граничним умовам*. Ці умови полягають у зазначенні «поведінки» інтегральної кривої $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, яка є розв'язком диференціального рівняння, на певній *граничній лінії* (або на певній *граничній поверхні*), замкненій або розімкненій, дискретній або неперервній. При цьому *початкові умови* диференціальних рівнянь у частинних похідних можуть бути розглянуті як граничні умови, задані для незалежної змінної інтегрування – часу.

Наприклад, для розв'язування диференціального рівняння:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_x \frac{\partial u}{\partial x} + a_y \frac{\partial u}{\partial y} = \sigma_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(t, x, y, z, u)$$

при відомих коефіцієнтах рівняння a_x, a_y, σ_x слід задати:

- початкову умову («граничну умову за часом t »);
- дві граничні умови за координатою x ;
- одну граничну умову за координатою y ;
- дві граничні умови за координатою z .

Математичний опис, що включає одне й те ж диференціальне рівняння, проте різні граничні умови, може характеризувати суттєво різні процеси. Наведемо для прикладу класифікацію граничних умов, які можуть

¹ Tannehill J. C., Anderson D. A, Pletcher R. H. et al. Computational fluid mechanics and heat transfer. Boca Raton: CRC Press, 2020. 974 p.

застосовуватися під час розрахунку теплового балансу трубчастого реактора з повздовжнім перемішуванням (рис. 12.1), у якому протікає проста незворотна реакція типу $nX \rightarrow P$.

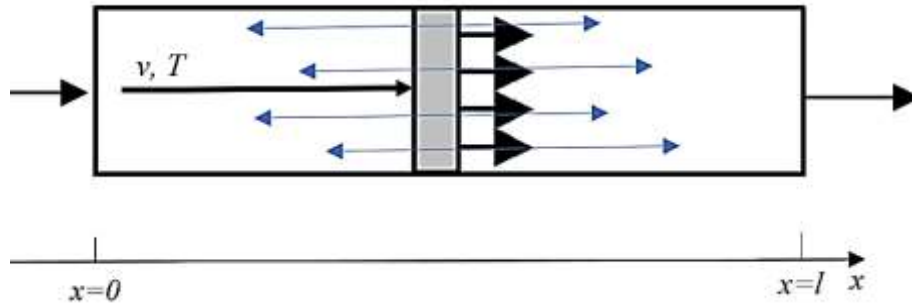


Рис. 12.1. Схематичне представлення трубчастого реактора з повздовжнім перемішуванням

Диференціальне рівняння, що описує тепловий баланс вказаного реактора, має вигляд:

$$\rho \cdot C_T \cdot \left[\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right] = \lambda \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta H \cdot w,$$

де T – температура потоку в реакторі, w – швидкість реакції, ΔH – тепловий ефект реакції; C_T , ρ – відповідно теплоємність та густина суміші в реакторі; v – лінійна швидкість потоку в реакторі; λ – коефіцієнт теплопровідності; $t \in [0, t_{\text{кінц}}]$, $x \in [0, l]$ – незалежні змінні інтегрування (відповідно, час і координата за довжиною реактора).

Початкові умови для досліджуваного процесу задають розподіл температури за довжиною реактора у початковий момент часу:

$$T(t = 0, x) = T^0(x).$$

Граничні умови першого роду (граничні умови Діріхле) визначають температури на границях (на вході та виході) реактора:

$$T(t, x = 0) = \phi_1(t), \quad T(t, x = l) = \phi_2(t).$$

Граничні умови другого роду (граничні умови Неймана) задають зміну температури на границях реактора:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = 0) = \phi_1(t),$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = l) = \phi_2(t).$$

Граничні умови третього роду (граничні умови Робéна або ж граничні умови Ньютона) визначають закон вільного теплообміну з навколишнім середовищем на границях реактора:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = 0) = \alpha\{T(t, x = 0) - T_{\text{серед}}\},$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = l) = \alpha\{T(t, x = l) - T_{\text{серед}}\},$$

де α — коефіцієнт тепловіддачі, $T_{\text{серед}}$ — температура навколишнього середовища.

Змішані граничні умови (граничні умови загального виду) трапляються, якщо при постановці задачі використовуються граничні умови різних родів, наприклад:

$$T(t, x = 0) = \phi_1(t),$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = l) = \alpha\{T(t, x = l) - T_{\text{серед}}\}.$$

Диференціальні рівняння в частинних похідних розв'язують 1) теоретичними (аналітичними) методами, або 2) чисельними методами.

Аналiтичні розв'язання можливі лише для деяких класів спрощених диференціальних рівнянь в частинних похідних. Наприклад, наведена вище система рівнянь Нав'є-Стокса не може бути розв'язана аналітично без значного, критичного для результату спрощення. Саме неможливість аналітичного розв'язку обмежувала в «докомп'ютерну еру» практичне застосування рівнянь в частинних похідних.

До *чисельних* методів розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних належать скінченно-різницеві методи та скінченно-елементні методи

[1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 39].

Зауваження. Слід розуміти, що на практиці чисельне розв'язання (з достатньою точністю) рівнянь в частинних похідних потребує дуже великої кількості обчислень, і, отже, вимагає застосування високопродуктивних комп'ютерів. Широке практичне застосування рівнянь в частинних похідних стало можливим завдяки стрімкому зростанню потужності обчислювальної техніки, а також можливості використання хмарних обчислень.

12.2 ЗАГАЛЬНА КОНЦЕПЦІЯ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ. МЕТОД СІТОК

Суть скінченно-різницевого методу сіток у випадку диференціальних рівнянь в частинних похідних полягає в такому [1, 13]:

1. Наноситься *різницева сітка*: область безперервної зміни аргументу замінюється областю дискретного аргументу, виділяються точки, які називаються *вузлами*.

2. Область безперервної зміни функції замінюється областю дискретної зміни функції, коли функція визначена лише у вузлах сітки (таке представлення називається *сітковою функцією*).

3. Всі похідні, що входять до вихідних диференціальних рівнянь граничних умов, замінюються скінченно-різницевими алгебраїчними співвідношеннями сіткових функцій.

4. Замість інтегрування диференціального рівняння записують різницеву схему, з якої визначають значення шуканої функції у вузлах сітки.

Для розв'язування диференціального рівняння скінченно-різницеvim методом сіток спочатку область, де шукається розв'язок, замінюють дискретною множиною точок – різницевою сіткою. Взагалі кажучи, можлива найрізноманітніша структура сітки: різницева сітка може мати квадратні, прямокутні, трикутні тощо комірки сталого чи змінного розміру. Однак, як правило, у методі сіток використовуються регулярні різницеві сітки з прямокутними комірками [1, 13].

Нехай розв'язується рівняння від двох змінних x та y , граничними умовами якого задано область інтегрування у вигляді прямокутника. Відповідно до методу сіток, осі x та y розбиваються на відрізки, які є кроками сітки за відповідними напрямками (рис. 12.2):

$$\begin{aligned} x_i &= x_0 + i \cdot h, \quad i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ y_j &= y_0 + j \cdot l, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \end{aligned} \quad (12.3)$$

де x, y – незалежні змінні; h, l – відповідно значення кроку за змінною x та y .

Через точки розподілу проводяться прямі, паралельні осям координат. Сукупність точок перетину (вузлів) цих прямих і утворює сітку в заданій двовимірній області.

Спосіб побудови сітки не змінюється і у разі, якщо граничними умовами Γ задана деяка *не прямокутна* область інтегрування G довільної форми (рис. 12.2).

Вузли, відстань між якими дорівнює кроку сітки по одній з осей, називаються *сусідніми*.

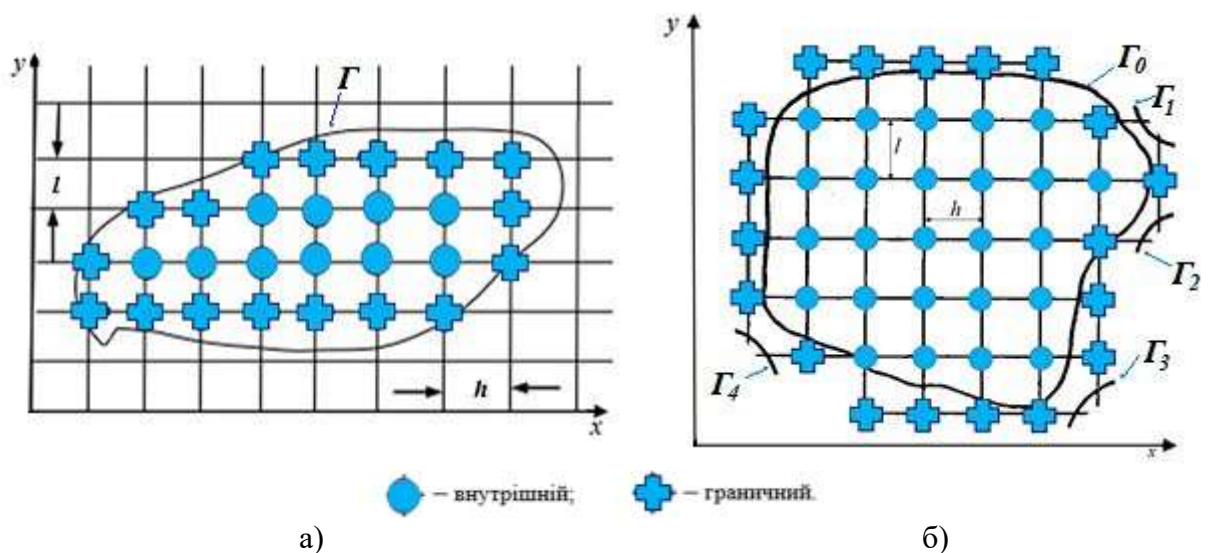


Рис. 12.2. Схематичне представлення сітки, накладеної на область інтегрування G , обмежену граничними: а) – випадок простих (замкнених) граничних умов, б) – випадок дискретних граничних умов

Для простих замкнених граничних умов *внутрішніми* вузлами називаються вузли різницевої сітки, що потрапили всередину області інтегрування G і мають усі чотири сусідніх вузли, що потрапили до області,

обмеженої граничними умовами Γ (рис. 12.2, а). Вузли, що потрапили до області, обмеженої граничними умовами Γ , але не є внутрішніми, мають назву *граничних* вузлів сітки. Для складних розімкнених (дискретних) граничних умов, наприклад, $\Gamma \in \{\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4\}$ зовнішні вузли обирають за максимальною відповідністю контуру області інтегрування G (рис. 12.2, б).

Наступним етапом є заміна різницевиими відношеннями похідних, що входять до рівнянь та граничних умов:

$$\begin{aligned} u_x(x, y) &\approx \frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h}, \\ u_{xx}(x, y) &\approx \frac{1}{h^2} \cdot (u(x+h, y) - 2u(x, y) + u(x-h, y)), \\ u_y(x, y) &\approx \frac{u(x, y+l) - u(x, y)}{l}, \\ u_{yy}(x, y) &\approx \frac{1}{l^2} \cdot (u(x, y+l) - 2 \cdot u(x, y) + u(x, y-l)), \end{aligned}$$

або

у внутрішніх вузлах сітки:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2 \cdot h}, \\ \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i,j} &\approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2 \cdot l}; \end{aligned} \tag{12.4}$$

у зовнішніх (граничних) вузлах сітки:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h}, \\ \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i,j} &\approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{l}; \end{aligned} \tag{12.5}$$

для похідних другого порядку:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,j} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{l^2}, \tag{12.6}$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,j} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2 \cdot u_{i,j} + u_{i,j-1}}{l^2}.$$

Як видно з (12.4)-(12.6), різницеві відношення, що відповідають диференціальному рівнянню, записуються у внутрішніх вузлах сітки. різницеві відношення, що відповідають граничним умовам, записуються в граничних вузлах сітки. В результаті отримуємо різницеву схему – систему лінійних алгебраїчних рівнянь, кількість яких може бути досить великою, оскільки визначається кількістю внутрішніх вузлів сіткової області. Розв'язком вихідного диференціального рівняння є значення шуканої функції у вузлах сітки – сукупність коренів згаданої системи алгебраїчних рівнянь.

Розглянемо особливості застосування методу сіток у випадку параболічних диференціальних рівнянь в частинних похідних.

Необхідно розв'язати задачу теплопровідності, тобто розрахувати профіль температур у довгому тонкому однорідному стрижні (рис. 12.3). Нехай температура лівого кінця стрижня фіксована, а на правому кінці відбувається теплообмін із навколишнім середовищем, таким чином, що тепловий потік пропорційний різниці температур кінця стрижня та середовища.

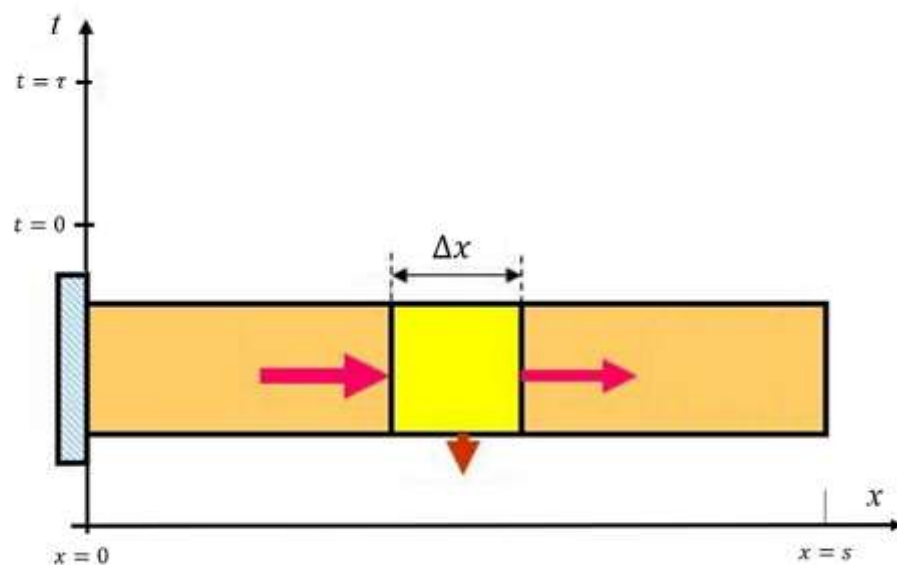


Рис. 12.3. До розрахунку розподілу температур у тонкому однорідному стрижні (рівняння теплопровідності)

Нестационарне рівняння теплопровідності з відповідними початковими

та граничними умовами має вигляд:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (12.7)$$

де t, x — незалежні змінні інтегрування (відповідно, час та просторова координата), $t \in [0, \tau], x \in [0, s], T = T(x, t)$ — шукана функція (температура), α — константа, що описує швидкість поширення тепла у стрижні (визначається матеріалом стрижня, приймемо в даному випадку $\alpha = 1$).

Початкові та граничні умови для рівняння (12.7):

$$\begin{aligned} T|_{t=0} &= f(x), \\ T|_{x=0} &= \varphi(t), \\ T|_{x=s} &= \psi(t), \end{aligned} \quad (12.8)$$

де $f(x), \varphi(t), \psi(t)$ — деякі функції.

Побудуємо для $t \in [0, \tau], x \in [0, s]$ різницеву сітку (рис. 12.4) з розбиттям відповідно до (12.3).

Зауваження. З метою забезпечення надійності процедури інтегрування значення кроку розбиття для незалежних координат доцільно пов'язувати між собою, наприклад:

$$\begin{aligned} h &= \frac{s - 0}{n}, \\ l &= \frac{\sigma}{\alpha} \cdot h^2, \end{aligned} \quad (12.9)$$

де h, l — значення кроку розбиття відповідно для незалежних координат $x; t$, n — кількість кроків розбиття по координаті x ; α — константа з рівняння (12.7); σ — константа зв'язку між кроками сітки (докладніше про вибір константи σ буде сказано далі).

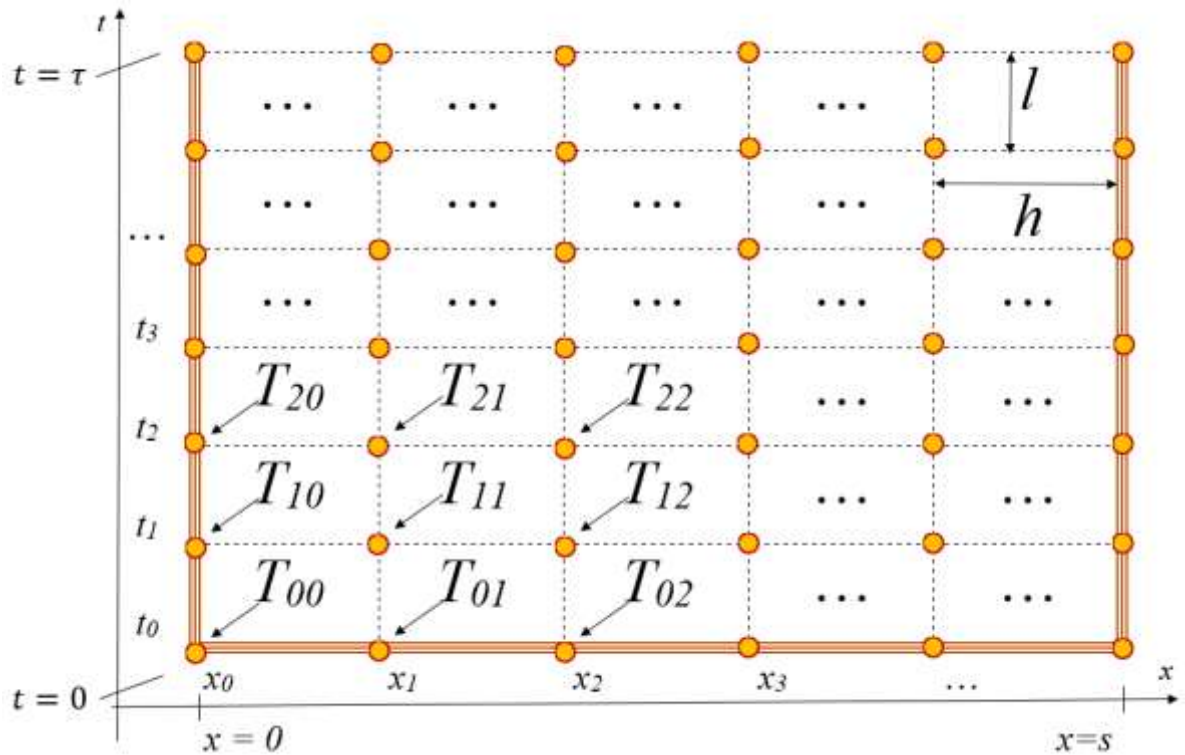


Рис. 12.4. Різницева сітка для розв'язання рівняння теплопровідності

Функцію $T = T(x, t)$ замінюємо сітковою функцією: T_{ij} . Усі похідні, що входять до диференціального рівняння (12.7) та граничних умов (12.8), замінюємо скінченно-різницевиими алгебраїчними співвідношеннями сіткових функцій:

– для другої похідної:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{ij} \approx \frac{T_{i+1,j} - 2 \cdot T_{ij} + T_{i-1,j}}{h^2}, \quad (12.10)$$

– для першої похідної:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{ij} \approx \frac{T_{i,j+1} - T_{ij}}{l}, \quad (12.11)$$

або

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{ij} \approx \frac{T_{ij} - T_{i,j-1}}{l}. \quad (12.12)$$

На основі співвідношення (12.10) з урахуванням (12.9) отримуємо:

$$\frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\sigma \cdot h^2} = \frac{T_{i+1,j} - 2 \cdot T_{i,j} + T_{i-1,j}}{h^2},$$

або

(12.13)

$$T_{i,j+1} = \sigma \cdot T_{i-1,j} + (1 - 2 \cdot \sigma) \cdot T_{i,j} + \sigma \cdot T_{i+1,j}.$$

Аналогічно, на основі співвідношення (12.12) отримуємо:

$$\frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\sigma \cdot h^2} = \frac{T_{i+1,j} - 2 \cdot T_{i,j} + T_{i-1,j}}{h^2}.$$

або

(12.14)

$$(1 + 2 \cdot \sigma) \cdot T_{i,j} - \sigma \cdot (T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) - T_{i,j-1}.$$

Зауваження. Співвідношення (12.13) та (12.14) представляють два різні підходи до наближеного розрахунку сіткової функції [1, 13].

У даному випадку так звана *явна різницева схема* (12.13) передбачає наближений розрахунок функції $T = T(x, t)$ в $(j + 1)$ -й момент часу (у $(j + 1)$ шарі сітки) за значеннями сіткової функції у трьох сусідніх вузлах, попереднього, j шару (рис. 12.5, а).

Неявна різницева схема реалізується на основі залежностей (12.14), які виражають функцію $T = T(x, t)$ в j -й момент часу (у j -тому шарі сітки) через «наступні у часі» значення сіткової функції $(j + 1)$ шару (рис. 12.5, б). Для знаходження таких значень реалізується «прогонковий» підхід.

Схематичне зображення вузлів сітки, пов'язаних рівнянням різницевої схеми, називають *різницеvim шаблоном*. Різницеві шаблони для різницевих схем (12.13) і (12.14) мають відповідно вигляд рис. 12.5, а, та рис. 12.5, б.



Рис. 12.5. Різницеві шаблони для побудови скінченно-різницевої схеми у випадку рівняння параболічного типу: а – шаблон для явної схеми розрахунку, б – шаблон для неявної схеми розрахунку

Використання неявної схеми обумовлене можливим виникненням нестійкості в ході розв'язання диференціального рівняння за найпростішою – явною схемою. Під нестійкістю процедури розрахунку розуміють різке зростання похибки на певному кроці розрахунку; стійкість процесу розв'язку у значній мірі визначається кроком різницевої сітки. Доведено¹, що процес розв'язку одновимірних рівнянь теплопровідності за явною схемою є стійким лише при такому значенні константи σ (12.9), пов'язаної з кроком сітки:

$$0 < \sigma \leq 0,5. \quad (12.15)$$

Зауваження 1. У діапазоні $0 < \sigma \leq 0,5$ у деяких випадках можливе виникнення паразитних осциляцій (коливань) розв'язку². Найбільш надійні розв'язки рівняння явним методом сіток гарантує значення $0 < \sigma \leq 0,25$.

Зауваження 2. Крім неявної схеми розв'язання диференціального рівняння, використовують також інші, більш складні спеціальні різницеві схеми розрахунку (наприклад, схеми Кранка-Ніколсона, схеми Саульєва тощо) [1, 3-5, 13, 17-19, 21-23, 27-29, 35-37, 39].

12.2.1 Особливості знаходження сіткової функції за явною схемою

Якщо реалізується явна схема методу сіток, то після формування різницевої сітки відповідно до (12.3), (12.9) виконують обчислення значень сіткової функції $t = t_0 = 0: T_{i0}, i = 0, 1, \dots, n$ у початковому шарі за часом

¹ Chapra S. C., Canale R. P. Numerical methods for engineers. McGraw Hill, 2014. 992 p.

² Carnahan B., Luther H.A., Wilkes J.O. Applied Numerical Methods. NY: Wiley, 1969. 604 p.

(рис. 12.4), тобто, згідно (12.8):

$$\begin{aligned} T(x_i, 0) &= T|_{t=0}^x = f(x_i), i = 0, 1, \dots n. \\ T(0, t_j) &= T|_{x=0}^t = \varphi(t_j), \\ T(s, t_j) &= T|_{x=s}^t = \psi(t_j), \\ j &= 0. \end{aligned}$$

На основі розрахованих значень сіткової функції у початковому шарі $T_{0i}, i = 0, 1, \dots n$ за (12.13) знаходять значення сіткової функції $T_{ij}, i = 0, 1, \dots n$ у наступних шарах сітки $j = 1, 2, \dots$

12.2.2 Особливості знаходження сіткової функції за неявною схемою

Якщо реалізується *неявна* схема методу сіток, то після формування різницевої сітки відповідно до (12.3), (12.9) підставляють задані початкові та граничні умови з (12.8) до неявної різницевої схеми (12.14).

В подальшому задача, зведена до системи лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею коефіцієнтів, вирішується методом Томаса (прогонки), аналогічним за суттю методу розв'язання крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь, викладеному у розділі 11.

Приклад 12.1. Користуючись явною схемою методу сіток розрахувати профіль температур у довгому тонкому стрижні (рис. 12.3). Нехай температура лівого кінця стрижня фіксована, а на правому кінці відбувається теплообмін із навколишнім середовищем, так що тепловий потік пропорційний різниці температур кінця стрижня та середовища¹. Нестационарне рівняння теплопровідності з відповідними початковими та граничними умовами має вигляд:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

¹ Наведена задача має назву задачі теплопровідності.

$$T|_{t=0}^x = \sin(\pi \cdot x),$$

$$T|_{x=0}^t = 0,$$

$$T|_{x=0,5}^t = t - 0,035,$$

де t, x – незалежні змінні інтегрування (відповідно, час та просторова координата), $x \in [0, 0,5], t \in [0, 20], T = T(t, x)$ – температура.

Прийняти крок за змінною x рівним $h = 0,1$, константу зв'язку між кроками сітки, рівною $\sigma = 0,5$, константу, що описує швидкість поширення тепла у стрижні $\alpha = 1$.

Розв'язок: будуємо різницеву сітку у відповідності до (12.3), прийнявши $h = 0,1$ з умови завдання та розрахувавши за (12.9)

$$l = \frac{\sigma}{\alpha} \cdot h^2 = 0,5 \cdot (0,1)^2 = 0,05.$$

Заповнюємо рядок початкових умов (початковий шар таблиці), тобто граничних умов для $t = 0$: для усіх значень координати $x \in [0, 0,5]$ шукана функція $T(x, 0) = \sin(\pi \cdot x)$. Наприклад,

$$T(x, 0) = \sin(\pi \cdot x) = \sin(\pi \cdot 0) = 0; T(x, 0,1) = \sin(\pi \cdot 0,1) = 0,3090; \\ T(x, 0,2) = \sin(\pi \cdot 0,2) = 0,5878 \text{ і т.д.}$$

Заповнюємо стовпчик граничних умов для $x = 0$: в даному випадку згідно умови для усіх моментів часу, $t \in [0, 20]$ значення $T(0, t) = 0$.

Заповнюємо стовпчик граничних умов для $x = 0,5$: для усіх моментів часу, $t \in [0, 20]$ значення $T(0,5, t) = t - 0,035$. Наприклад,

$$T(0,5, 0,005) = 1,0000 - 0,035 = 0,9650;$$

$$T(0,5, 0,010) = 0,9650 - 0,035 = 0,9300 \text{ і т.д.}$$

Для значень різницевої функції у j -тому шарі сітки $j = 1, 2, \dots, 20$ у випадку $\sigma = 0,5$ отримаємо:

$$T_{ij} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j}}{2}, \quad i = 0, 1, 2, 3, 4, 5. \quad (12.16)$$

Користуючись розрахованими значеннями сіткової функції T_{ij} у початковому шарі (для $t = 0$) та стовпцях граничних умов (для $x = 0, x = 0,5$), знаходимо за (12.16) значеннями сіткової функції T_{ij} у першому шарі (для $t = 1$) і далі аналогічно розраховуємо значеннями сіткової функції T_{ij} у наступних шарах ($j = 2, 3, \dots, 20$).

Наприклад,

$$T_{11} = T(0,1,0,005) = \frac{T_{2,0} + T_{0,0}}{2} = \frac{0,5878 + 0}{2} = 0,2939;$$

$$T_{21} = T(0,2,0,005) = \frac{T_{3,0} + T_{1,0}}{2} = \frac{0,8090 + 0,3090}{2} = 0,5590 \text{ і т.д.}$$

Таблиця розрахунків та графічне відображення розв'язку (інтегральна поверхня) наведені на рис. 12.6 та рис. 12.7.

E9									
	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$	$T _{t=0} = \sin(\pi \cdot x),$					$x \in [0, 0,5], t \in [0, 20],$		
2	$T _{x=0} = 0,$	$T _{x=0,5} = t - 0,035,$					$h = 0,1, \sigma = 0,5,$		
3							$\alpha = 1.$		
4				$h = 0,1$	$\sigma = 0,5$		$l = 0,005$		
5		i	0	1	2	3	4	5	
6		x_i	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	
7		j	t_j						
8		0	0,000	0	0,3090	0,5878	0,8090	0,9511	1,0000
9		1	0,005	0	0,2939	0,5590	0,7694	0,9045	0,9650
10		2	0,010	0	0,2795	0,5317	0,7318	0,8672	0,9300
11		3	0,015	0	0,2658	0,5056	0,6994	0,8309	0,8950
12		4	0,020	0	0,2528	0,4826	0,6683	0,7972	0,8600
13		5	0,025	0	0,2413	0,4605	0,6399	0,7641	0,8250
14		6	0,030	0	0,2303	0,4406	0,6123	0,7325	0,7900
15		7	0,035	0	0,2203	0,4213	0,5865	0,7012	0,7550
16		8	0,040	0	0,2107	0,4034	0,5612	0,6708	0,7200
17		9	0,045	0	0,2017	0,3859	0,5371	0,6406	0,6850
18		10	0,050	0	0,1930	0,3694	0,5133	0,6110	0,6500
19		11	0,055	0	0,1847	0,3531	0,4902	0,5816	0,6150
20		12	0,060	0	0,1766	0,3375	0,4674	0,5526	0,5800
21		13	0,065	0	0,1687	0,3220	0,4450	0,5237	0,5450
22		14	0,070	0	0,1610	0,3069	0,4228	0,4950	0,5100
23		15	0,075	0	0,1534	0,2919	0,4010	0,4664	0,4750
24		16	0,080	0	0,1460	0,2772	0,3792	0,4380	0,4400
25		17	0,085	0	0,1386	0,2626	0,3576	0,4096	0,4050
26		18	0,090	0	0,1313	0,2481	0,3361	0,3813	0,3700
27		19	0,095	0	0,1240	0,2337	0,3147	0,3530	0,3350
28		20	0,100	0	0,1168	0,2194	0,2934	0,3248	0,3000
29									

Рис. 12.6. Результати розв'язку рівняння теплопровідності параболічного типу явним методом сіток

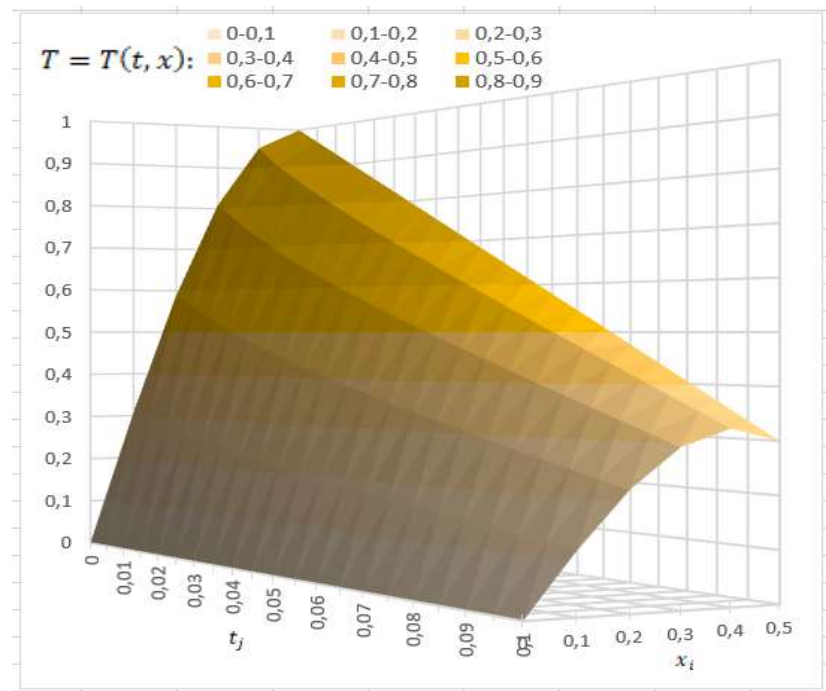


Рис. 12.7. Інтегральна поверхня розв'язку рівняння теплопровідності параболічного типу явним методом сіток

Зауваження. Аналогічно описаному вище скінченно-різницевому методу розв'язання рівнянь теплопровідності параболічного типу, можна розв'язати методом сіток будь-яке диференціальне рівняння в частинних похідних, за явною або неявною схемою, підібравши належні скінченно-різницеві відношення для опису похідних.

12.3 ПОНЯТТЯ ПРО МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ

Вище було представлено скінченно-різницеві методи для розв'язування диференціальних рівнянь у частинних похідних. У цих методах область розв'язання подається як сітка дискретних точок (вузлів). Потім диференціальне рівняння та граничні умови кожного вузла замінюються скінченно-різницеви́ми співвідношеннями. Хоча таке «поточкове» наближення концептуально легко зрозуміле, воно має низку недоліків. Зокрема, виникають проблеми в разі його застосовування до системи зі *складною геометрією* як шуканої функції, так і граничних умов.

Метод скінченних елементів пропонує альтернативу, яка краще

підходить для згаданих «складних» об'єктів дослідження.

Розглянемо загальні засади цього методу¹.

В стислому представленні застосування методу скінченних елементів передбачає такі етапи [13]:

I етап. Розбиття заданої області на скінченні елементи.

Метод скінченних елементів ґрунтується на тому, що будь-який безперервний розподіл шуканої змінної $u(x, y, z, t)$ у розрахунковій області (наприклад, температурне поле, поле концентрацій або деформацію) можна апроксимувати набором скінченних елементів – кусково-неперервних функцій, визначених на скінченній кількості підобластей. Ці елементи мають загальні вузлові точки та в сукупності апроксимують форму області. Отже, на відміну від методів скінченних різниць, метод скінченних елементів ділить область розв'язання на області (об'єми) простої форми, або «елементи». Найчастіше застосовуються найпростіші елементи – $(n + 1)$ -вимірні трикутники-симплекси². Наприклад, для двовимірної задачі симплекс-елементом буде тривузловий трикутник, а для тривимірних – чотиривузловий тетраедр.

На рис. 12.8 показано скінченно-елементну схему (тривузлові симплекси) та результати розв'язку рівняння еліптичного типу – рівняння Пуассона для опису двовимірного стаціонарного температурного поля³.

Використання елементів, а не сітки, забезпечує набагато краще наближення.

II етап. Побудова кусково-інтерполюючої функції, своєї для кожного зі скінченних елементів. Таким чином, для кожного зі скінченних елементів можна розробити наближений розв'язок диференціального рівняння.

¹ Більш докладний опис методу скінченних елементів можна знайти, зокрема, в посібниках:

– Chapra S. C., Canale R. P. Numerical methods for engineers. McGraw Hill, 2014. 992 p.
– Logan D. L. A First Course in the Finite Element Method. Cengage Learning, 2022. 976 p.

² Широке застосування у методі скінченних елементів симплексів у якості елементів обумовлене тим, що симплекси «зручно упаковуються», тобто дозволяють заповнювати розрахункову область (довільної форми) повністю (без розривів); також, для математичного опису цих елементів використовуються зручні поліноми першого порядку.

³ Fenics Project. Solving the Poisson equation. URL: https://fenicsproject.org/pub/tutorial/sphinx1/_ftut1003.html

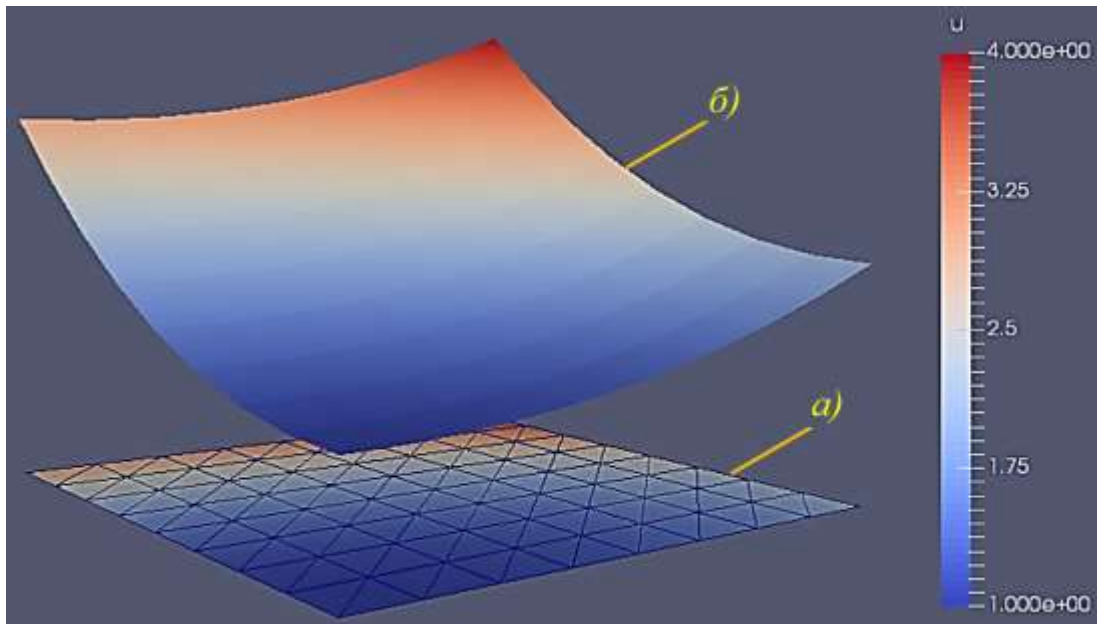


Рис. 12.8. Застосування методу скінченних елементів для розв'язання диференціального рівняння еліптичного типу: а) скінченно-елементна схема, б) результати розв'язку

III етап. Об'єднання скінченних елементів в єдине ціле. На цьому етапі отримані на попередньому етапі рівняння, які характеризують окремі скінченні елементи, об'єднуються в систему рівнянь, що характеризує область інтегрування в цілому. Шляхом з'єднання окремих розв'язків із забезпеченням безперервності на межах між елементами в подальшому й «складається» загальний розв'язок. Таким чином, значення шуканої функції можна отримати не дискретно, а у вигляді неперервної функції.

IV етап. Визначення розв'язку – вектора вузлових значень шуканої змінної $u(x, y, z, t)$ у розрахунковій області.

Математичний апарат методу скінченних елементів базується на *варіаційному численні* – спеціальному розділі математики, що має на меті відшукування кривої (поверхні), яка відповідає мінімуму заданої функції (що має назву функціоналу). На відміну від класичних методів оптимізації, у варіаційному численні мінімізована функція (функціонал) є складною, являючи собою функцію кількох інших функцій.

Зауваження. Чисельне розв'язання рівнянь в частинних похідних та їх систем як правило здійснюють за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення [31, 38, 40, 47]. Для таких програм часто використовують загальну назву – програми *обчислювальної гідродинаміки* – *Computational fluid dynamics (CFD)*, яка походить від однієї з галузей застосування рівнянь у частинних похідних.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 12

1. Навести і пояснити поняття диференціального рівняння у частинних похідних.
2. Навести і пояснити склад і геометричну інтерпретацію крайових задач для диференціальних рівнянь у частинних похідних, у порівнянні із формулюванням крайової задачі для звичайного диференціального рівняння.
3. Навести і пояснити математичну класифікацію лінійних диференціальних рівняння другого порядку у частинних похідних від двох незалежних змінних.
4. Навести і пояснити натурну (фізичну) класифікацію диференціальних рівнянь у частинних похідних.
5. Пояснити загальний принцип скінченно-різницевого методу сіток для розв'язування диференціального рівняння у частинних похідних. Навести математичний апарат, алгоритм та геометричну інтерпретацію методу.
6. В якій формі отримується результат чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь?
7. Пояснити концепцію явної та неявної схем реалізації скінченно-різницевого методу сіток для розв'язування диференціального рівняння у частинних похідних.
8. Навести послідовність побудови різницевої сітки на прикладі параболічного рівняння теплопровідності, пояснити особливості вибору значень кроку сітки.
9. Пояснити сутність явища нестійкості розв'язку на прикладі методу сіток, способи уникнення нестійкості розв'язку.
10. Пояснити сутність методу скінченних елементів: переваги порівняно з методом сіток, основні кроки методу.
11. Знайти чисельний розв'язок диференційного рівняння параболічного типу (рівняння теплопровідності):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

при заданих граничних умовах:

$$T(x, 0) = 6, x \in [0, 5], T(0, t) = 0, T(5, t) = 5, t \in [0, 20],$$

де t, x – незалежні змінні інтегрування, $T = T(t, x)$ – шукана функція температура, $\alpha = 0,2$ – константа, що описує швидкість поширення тепла.

Знайти розв’язок методом сіток за явною схемою із параметрами кроку сітки $h = 1, \sigma = 1/6$.

12. Знайти методом сіток за неявною схемою із параметрами кроку сітки $h = 1, \sigma = 1/6$ розв’язок диференційного рівняння параболічного типу із завдання 10. Порівняти результати з отриманими у завданні 10.

13. Знайти методом сіток за явною схемою із параметрами кроку сітки $h = 0,1, \sigma = 1/8$ розв’язок диференційного рівняння параболічного типу (рівняння теплопровідності) із завдання 10. Порівняти результати з отриманими з отриманими у завданні 10.

14. Знайти чисельний розв’язок диференційного рівняння параболічного типу (рівняння теплопровідності), що описує теплопровідність сталевого стрижня:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

при таких граничних умовах:

$$T(x, 0) = 6, x \in [0, 5], T'_x(0, t) = 0, T(5, t) = 5, t \in [0, 20],$$

де t, x – незалежні змінні інтегрування, $T = T(t, x)$ – шукана функція (температура), α – константа, що описує швидкість поширення тепла:

$$\alpha = \frac{k}{\rho \cdot c_p},$$

де k – теплопровідність, ρ – густина, c_p – питома теплоємність. Для сталі $k = 45,4 \text{ Вт/м} \cdot \text{К}$, $\rho = 7700 \text{ кг/м}^3$, $c_p = 460 \text{ Дж/кг} \cdot \text{К}$.

Знайти розв’язок методом сіток за явною схемою із параметрами кроку сітки $h = 1, \sigma = 1/6$.

13 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА ПРАВИЛА ТЕОРІЇ ІМОВІРНОСТЕЙ

13.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 13

Теорія імовірностей – це математична наука, яка вивчає закономірності у випадкових явищах. Випадковим називають явище, яке при неодноразовому відтворенні того самого досліду кожного разу протікає дещо по-іншому [1, 24].

Методи теорії імовірностей за своєю природою пристосовані для досліджень масових випадкових явищ. Вказані методи не призначені для передбачення результату окремого випадкового явища, але дають можливість передбачити середній сумарний результат маси однорідних випадкових явищ [1, 2, 20, 44, 46]. Тобто конкретний результат кожного з маси аналогічних дослідів є невизначеним та випадковим.

Математичні закони теорії імовірностей є відображенням реальних статистичних законів, об'єктивно існуючих у масових, випадкових явищах природи.

Поняття та визначення, розглянуті у даному розділі, наведено за джерелами [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]; ці визначення є загальновідомими, але важливими для розуміння.

13.1.1 Випадкові події

Подією (випадковою подією) називають будь-який факт, який у результаті досліду може відбутися або не відбутися [1, 24]. Події прийнято позначати великими літерами латинського алфавіту, наприклад: $A, B, C, \dots$; якщо подій багато – однією буквою з індексами, наприклад, $A_1, A_2, \dots, A_n$.

Події $A_1, A_2, \dots, A_n$ називаються *несумісними*, якщо поява однієї з них у даному досліді унеможливорює появу інших у тому самому досліді. В інших випадках події є *сумісними* [1, 24].

Події $A_1, A_2, \dots, A_n$ утворюють *повну групу*, якщо в результаті досліду відбудеться обов'язково хоча б одна з них [1, 24].

Події $A_1, A_2, \dots, A_n$ називають *рівноможливими* в даному досліді, якщо жодна з них не є об'єктивно більш можливою, ніж інша.

Події, які утворюють повну групу, несумісні й рівноможливі, називають *випадками*, а про дослід кажуть, що він зводиться до *схеми випадків*.

Достовірною називають подію B , яка у даному досліді неодмінно відбудеться. *Неможливою* називають подію C , яка у даному досліді не може відбутися [1, 24].

Імовірність події – це числова міра ступеня об’єктивності можливості цієї події [1, 24]. Імовірність події A позначається $P(A)$. Якщо дослід зводиться до схеми випадків, то імовірність будь-якої події A обчислюється за формулою

$$P(A) = \frac{m_A}{n}, \quad (13.1)$$

де n – загальна кількість випадків; m_A – кількість випадків, сприятливих події A (які забезпечують її появу).

Формулу (13.1) називають *класичною формулою визначення імовірностей* [1, 2, 20].

За одиницю вимірювання імовірності випадкових подій приймають імовірність достовірної події, яку приймають рівною 1:

$$P(A) = 1;$$

тоді інші події, які можливі, але не достовірні, характеризуватимуться імовірностями, які менші за 1, і становитимуть якусь частку одиниці. Імовірність неможливої події дорівнюватиме 0:

$$P(A) = 0.$$

Отже, імовірність будь-якої події A укладається між нулем і одиницею:

$$0 \leq P(A) \leq 1.$$

Практично достовірною називають подію, імовірність якої дуже близька до 1: $P(A) \approx 1$ [1, 24]. *Практично неможливою* називають подію, імовірність якої близька до 0: $P(A) \approx 0$ [1, 24].

Принцип практичної неможливості малоїмовірних подій полягає у

такому: якщо випадкова подія має дуже малу імовірність, то на практиці можна вважати, що в одиничному досліді ця подія не настане.

Протилежними називають дві несумісні події, які утворюють повну групу. Подію, протилежну події A , прийнято позначати $\bar{A}$.

При безпосередньому обчисленні імовірностей використовують деякі елементи *комбінаторики* ([Додаток Г](#)).

Приклад 13.1. У коробці знаходяться 3 синіх та 4 жовтих керамічних плитки. Дослід полягає у тому, що з коробки обирають одразу 2 плитки. Знайти імовірність того, що обидві плитки сині.

Розв'язок: подія A полягає в тому, що обидві плитки сині. Тоді загальна кількість випадків, коли з усіх плиток обирають 2 сині:

$$n = C_7^2 = \frac{7!}{2! \cdot (7-2)!} = 21,$$

а кількість випадків, сприятливих події A (з трьох синіх плиток одразу обирають дві):

$$m_A = C_3^2 = 3,$$

тоді за формулою (13.1):

$$P(A) = \frac{3}{21} = \frac{1}{7} \approx 0,14.$$

Отже, імовірність того, що обидві плитки сині, становить 0,14.

Приклад 13.2. В коробці знаходяться 3 зелених та 4 жовтих виробів зі скла. Дослід полягає у тому, що з коробки обирають одразу 3 вироби. Знайти імовірність того, що два з цих виробів будуть жовтими, а один - зелений.

Розв'язок: загальна кількість випадків, коли з усіх плиток обирають 3 вироби:

$$n = C_7^3 = \frac{7!}{3! \cdot (7-3)!} = 35;$$

кількість випадків, у яких з чотирьох жовтих виробів одразу оберуть два:

$$C_4^2 = \frac{4!}{2! \cdot 2!} = 6,$$

а кількість випадків, у яких з трьох зелених виробів оберуть 1:

$$C_3^1 = \frac{3!}{1! \cdot 2!} = 3,$$

Тоді

$$m_A = C_4^2 \cdot C_3^1 = 6 \cdot 3 = 18,$$

і за формулою (13.1):

$$P(A) = \frac{18}{35} \approx 0,51.$$

Отже, імовірність того, що 2 з 3х обраних виробів будуть жовтими, а один виріб – зеленим, становить 0,51.

Приклад 13.3. У партії із 100 виробів 10 виробів бракованих. Визначити імовірність того, що серед взятих навмання чотирьох виробів три будуть небраковані.

Розв'язок: взяти 4 вироби із 100 можна числом способів $n = C_{100}^4$. Число випадків, коли серед цих 4-х виробів будуть 3 не браковані, дорівнює $m_A = C_{90}^3 \cdot C_{10}^1$.

Шукана імовірність за формулою (13.1) дорівнює:

$$P(A) = \frac{m_A}{n} = \frac{C_{90}^3 \cdot C_{10}^1}{C_{100}^4} = \frac{90! \cdot 10! \cdot 96! \cdot 4!}{3! \cdot 87! \cdot 9! \cdot 100!} = \frac{1424}{4752} \approx 0,3.$$

Таким чином, імовірність того, що серед взятих навмання чотирьох виробів три будуть небраковані, дорівнює 0,3.

Відносною частотою події A називають відношення кількості дослідів, в яких ця подія з'явилась, до загальної кількості фактично проведених

дослідів [1, 24]:

$$P^*(A) = \frac{M_A}{N}, \quad (13.2)$$

де N – загальна кількість фактично виконаних дослідів; M_A – кількість дослідів, в яких з’явилась подія A .

Порівнюючи визначення імовірності та відносної частоти події, можна помітити, що для визначення відносної частоти передбачається, що досліді були проведені. Слід пам’ятати, що при невеликій кількості дослідів відносна частота події носить випадковий характер і може помітно змінюватись від однієї групи дослідів до іншої. При збільшенні кількості дослідів значення відносної частоти події наближається до певної постійної величини, яку приймають за наближене значення імовірності та називають її *статистичною імовірністю* [1, 2, 20].

13.1.2 Основні правила теорії імовірностей

Прямі методи обчислення імовірностей із застосуванням формул (13.1), (13.2) набагато рідше використовуються на практиці, ніж непрямі методи. До непрямих методів відносять, наприклад, обчислення імовірності однієї події через імовірності інших подій, більш простих. Непрямі методи базуються на двох найважливіших правилах теорії імовірностей – правилах додавання та віднімання імовірностей.

Сумою двох подій A і B називають подію C , яка полягає в появі хоча б однієї з подій A або B . Сумою декількох подій називають подію, яка полягає в появі хоча б однієї з цих подій [1, 24].

Теорема додавання імовірностей: імовірність суми двох несумісних подій дорівнює сумі ймовірностей цих подій [1, 24]:

$$P(C) = P(A + B) = P(A) + P(B). \quad (13.3)$$

Імовірність суми двох сумісних подій дорівнює сумі двох імовірностей цих подій без урахування імовірності їх одночасної появи:

$$P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB),$$

де AB – добуток подій A і B . Розрахунок добутку подій буде розглянуто нижче.

Якщо події $A_1, A_2, \dots, A_n$ несумісні, то

$$P\left(\sum_{i=1}^n A_i\right) = \sum_{i=1}^n P(A_i).$$

Якщо події $A_1, A_2, \dots, A_n$ несумісні і утворюють повну групу, то сума їх імовірностей дорівнює одиниці:

$$\sum_{i=1}^n P(A_i) = 1.$$

Сума імовірностей протилежних події дорівнює одиниці:

$$P(A) + P(\bar{A}) = 1.$$

Приклад 13.4. У лабораторії знаходяться 20 проб води: 5 – не відповідають нормам, 7 – придатні до вживання в якості питної води і 8 – придатні до використання в якості технічної води. З полиці, де знаходяться проби, навмання беруть одну пробу. Знайти імовірність того, що вона не відповідатиме нормам або може бути використана як технічна вода.

Розв’язок: позначимо через A подію, яка полягає в тому, що зразок не відповідатиме нормам, а через B – подію, яка полягає в тому, що зразок відповідатиме нормам якості технічної води. Тоді:

$$P(A) = \frac{5}{20} = 0,25; \quad P(B) = \frac{8}{20} = 0,40.$$

Події A і B несумісні (поява зразка, що не відповідає нормам, виключає появу зразка, що відповідає нормам до якості питної води і навпаки), тому за формулою (13.3) маємо:

$$P(A + B) = P(A) + P(B) = 0,25 + 0,40 = 0,65.$$

Отже, імовірність того, взятий з полиці зразок не відповідатиме нормам

або може бути використаний як технічна вода, становить 0,65.

Імовірність події A , яка обчислена за умови настання події B , називається умовною імовірністю події A і позначається $P(A/B)$ або $P_B(A)$.

Приклад 13.5. У ящику знаходяться керамічні плитки: 2 білих, 3 з квітковим орнаментом і 5 – з геометричним малюнком. Дослід полягає в тому, що із ящика виймають одну плитку. Знайти імовірність вилучення оздобленої (не білої) плитки.

Розв'язок: нехай подія A полягає у вилученні плитки з квітковим орнаментом, а подія B – у вилученні плитки з геометричним малюнком. Тоді імовірність події A становить:

$$P(A) = \frac{C_3^1}{C_{10}^1} = 0,3;$$

а імовірність події B :

$$P(B) = \frac{C_5^1}{C_{10}^1} = 0,5.$$

Тоді

$$P(A + B) = P(A) + P(B) = 0,3 + 0,5 = 0,8.$$

Отже, імовірність того, що взята навмання плитка буде з візерунком (з квітковим орнаментом чи геометричним малюнком), становить 0,8.

Приклад 13.6. У лабораторії знаходяться 10 зразків води, серед яких 4 відповідають нормам якості до питної води. Знайти імовірність того, що серед трьох навмання взятих зразків хоча б один відповідає нормам

Розв'язок: нехай подія A полягає у тому, що серед трьох навмання взятих зразків є хоча б один зразок, який відповідає нормам, тоді подія $\bar{A}$ є протилежною до події A – полягає у тому, що серед взятих зразків немає жодного, що відповідає нормам.

Імовірність події A шукатимемо за формулою:

$$P(A) = 1 - P(\bar{A}).$$

Загальна кількість способів, якими можна взяти 3 зразка з 10:

$$C_{10}^3 = \frac{10!}{3!(10-3)!} = \frac{240}{2} = 120,$$

а кількість зразків, що не відповідають нормам, можна вилучити такою кількістю способів:

$$C_6^3 = \frac{6!}{3!(6-3)!} = 20.$$

Тоді

$$P(\bar{A}) = \frac{C_6^3}{C_{10}^3} = \frac{20}{120} = \frac{1}{6} \approx 0,17;$$

$$P(A) = 1 - P(\bar{A}) = 1 - 0,17 = 0,83.$$

Отже, імовірність того, що серед трьох навмання взятих зразків хоча б один відповідає нормам, становить 0,83.

Дві події A і B називають *незалежними*, якщо поява однієї з них не змінює імовірності появи другої. В іншому випадку події називають *залежними*. Для незалежних подій $P(A/B) = P(A)$, $P(B/A) = P(B)$.

Якщо подій декілька, то їх називають *незалежними у сукупності* або просто *незалежними*, якщо жодне з них не залежить від будь-якої комбінації (суміщення) інших подій.

Наприклад, якщо події A_1, A_2, A_3 незалежні у сукупності, то події $A_1 + A_2$, $A_1 + A_3$, $A_2 + A_3$, $A_1 + A_2 \cdot A_3$, $A_2 + A_1 \cdot A_3$, $A_3 + A_1 \cdot A_2$ також незалежні.

Декілька подій називають *попарно незалежними*, якщо кожні дві з них незалежні. Наприклад, події A , B та C попарно незалежні, якщо незалежні A і B , B і C , C і A . Однак якщо декілька подій незалежні попарно, то звідси ще не

слідуює, що вони незалежні у сукупності.

Умовною імовірністю $P_A(B)$ називають імовірність події B , обчисленої у припущенні, що подія A вже відбулась. Умовну імовірність також можна позначити як $P(B/A)$.

Приклад 13.7. У коробці знаходяться 4 сірих та 3 червоних плитки. З коробки двічі виймають по одній плитці, не повертаючи їх назад. Знайти імовірність того, у другому досліді дістануть сіру плитку, якщо при першому досліді з коробки взяли червону.

Розв'язок: нехай подія A полягає у тому, у першому досліді з коробки вийняли червону плитку, а подія B – це поява сірої плитки у другому досліді.

Обчислимо умовну імовірність події B за умови, що подія A вже відбулась:

$$P_A(B) = \frac{4}{6} = \frac{2}{3} \approx 0,67.$$

Добутком двох подій A і B називають подію C , яка полягає в одночасній появі подій A і B [1, 24]. Добутком декількох подій називають подію, яка полягає в одночасній появі всіх цих подій [1, 2, 20, 24].

Теорема множення імовірностей [1, 2, 20, 24]: імовірність сумісної появи двох незалежних подій дорівнює добутку імовірностей цих подій:

$$P(AB) = P(A) \cdot P(B),$$

де A і B - незалежні події.

Приклад 13.8. Знайти ймовірність того, що при одночасному падінні двох настінних термометрів обидва впадуть лицьовою стороною догори. При розв'язання задачі прийняти, що термометри можуть впасти тільки лицьовою або оборотною стороною.

Розв'язок: нехай подія A полягає у тому, що при падінні перший термометр впаде лицьовою стороною догори, а подія B полягає у тому, що при падінні другий термометр впаде лицьовою стороною догори.

Тоді імовірність того, що при одночасному падінні обидва термометри впадуть лицьовою стороною догори, становить:

$$P(A \cdot B) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4} = 0,25$$

Імовірність сумісної появи декількох подій, незалежних в сукупності, дорівнює добутку імовірностей цих подій [1, 2, 20, 24]:

$$P(A_1, A_2, \dots, A_k) = P(A_1)P(A_2) \dots P(A_k). \quad (13.4)$$

Імовірність сумісної появи двох залежних подій A і B дорівнює добутку імовірностей однієї з них на умовну імовірність другої, обчисленої за умови, що перша подія відбулася [1, 24].

$$P(AB) = P(A)P(B/A). \text{ або } P(AB) = P(B)P(A/B).$$

Імовірність сумісної появи кількох залежних подій дорівнює добутку імовірності однієї з них на умовні імовірності всіх інших [1, 2, 20, 24].

$$P(A_1, A_2, \dots, A_n) = P(A_1)P\left(\frac{A_2}{A_1}\right)P\left(\frac{A_3}{A_1A_2}\right) \dots P\left(\frac{A_n}{A_1A_2 \dots A_{n-1}}\right). \quad (13.5)$$

Приклад 13.9. У ящику знаходяться 3 білих та 4 жовтих цеглини. З ящика одну за одною виймають дві цеглини. Знайти імовірність того, що обидві цеглини будуть білими.

Розв'язок: нехай подія A полягає у тому, що перша цеглина буде білою, а подія B – у тому, що друга цеглина теж буде білою.

Оскільки події A і B залежні, то:

$$P(A \cdot B) = P(A) \cdot P_A(B).$$

Знайдемо імовірності подій $P(A)$ та $P_A(B)$:

$$P(A) = \frac{3}{7} = 0,429;$$

$$P_A(B) = \frac{2}{6} = 0,333.$$

Тоді

$$P(A \cdot B) = 0,429 \cdot 0,333 \approx 0,14.$$

Отже, імовірність того, що обидві цеглини, які вийняли одна за одною, будуть білими, становить 0,14.

Приклад 13.10. У першому з трьох ящиків 10 керамічних плиток, серед яких 4 стандартні; в другому – 8 плитки, серед яких 2 стандартні; в третьому – 12 плитки, серед яких 6 стандартних. З кожного ящика навмання виймають по одній плитці. Знайти імовірність того, що всі три вийняті плитки будуть стандартними.

Розв'язок: позначимо через A подію, яка полягає в тому, що з першого ящика вийняли стандартну плитку, B – з другого ящика вийняли стандартну плитку, C – з третього ящика вийняли стандартну плитку. Імовірності цих подій такі:

$$P(A) = \frac{4}{10} = 0,4; \quad P(B) = \frac{2}{8} = 0,25; \quad P(C) = \frac{6}{12} = 0,5.$$

Оскільки події A , B і C незалежні в сукупності, то за формулою (13.4) маємо:

$$P(ABC) = P(A) \cdot P(B) \cdot P(C) = 0,4 \cdot 0,25 \cdot 0,5 = 0,05.$$

13.1.3 Імовірність появи хоча б однієї події з n незалежних подій

На практиці досить часто зустрічаються задачі, для яких потрібно обчислити *імовірність появи хоча б однієї події*. Розглянемо особливості розв'язання таких задач.

Нехай події $A_1, A_2, \dots, A_n$ – незалежні в сукупності та імовірності їх появи дорівнюють $P(A_1) = p_1, P(A_2) = p_2, \dots, P(A_n) = p_n$. В результаті випробування можуть з'явитися або всі події $A_1, A_2, \dots, A_n$, або якась частина з

них, або лише одна подія з усіх. Позначимо через A подію, яка полягає в тому, що може з'явитися хоча б одна з подій $A_1, A_2, \dots, A_n$.

Імовірність появи події A дорівнює різниці між одиницею і добутком імовірностей протилежних подій $\overline{A_1}, \overline{A_2}, \dots, \overline{A_n}$:

$$P(A) = 1 - P(\overline{A_1}) \cdot P(\overline{A_2}) \dots P(\overline{A_n}) = 1 - q_1 q_2 \dots q_n,$$

де $q_i = 1 - p_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

Якщо всі n подій мають однакову імовірність, тобто $P(A_1) = P(A_2) = \dots = P(A_n) = p$, то імовірність того, що з'явиться хоча б одна з подій, обчислюється за такою формулою:

$$P(A) = 1 - q^n, \quad (13.6)$$

де $q = 1 - p$.

Приклад 13.11. Два студенти проводять якісний аналіз речовини. Імовірність правильного визначення речовини при одній спробі для першого студента дорівнює 0,6, а для другого – 0,7. Знайти імовірність того, що при першій спробі правильно визначить речовину тільки один студент.

Розв'язок: позначимо події:

A_1 , - правильно визначив речовину перший студент;

A_2 , - правильно визначив речовину другий студент;

B_1 - правильно визначив речовину тільки перший студент, $B_1 = A_1 \overline{A_2}$;

B_2 - правильно визначив речовину тільки другий студент, $B_2 = \overline{A_1} A_2$.

Події B_1 і B_2 несумісні. Подія $C = B_1 + B_2$ полягає у тому, що правильно визначив речовину тільки один студент. За формулою (13.3):

$$P(C) = P(B_1 + B_2) = P(A_1 \overline{A_2}) + P(\overline{A_1} A_2) = P(A_1) \cdot P(\overline{A_2}) + P(\overline{A_1}) \cdot P(A_2).$$

За умовою,

$$P(A_1) = 0,6, \quad P(A_2) = 0,7.$$

Тоді

$$P(\overline{A_1}) = 1 - 0,6 = 0,4, \quad P(\overline{A_2}) = 1 - 0,7 = 0,3.$$

Отже, шукана імовірність дорівнює

$$P(C) = 0,6 \cdot 0,3 + 0,4 \cdot 0,7 = 0,18 + 0,28 = 0,46.$$

Приклад 13.12. В ящику знаходиться 6 синіх, 5 жовтих і 4 білих плитки. Кожний дослід полягає у тому, що навмання виймають одну плитку, не повертаючи її в ящик. Знайти імовірність того, що при першому досліді з'явиться синя плитка (подія A), при другому досліді – жовта (подія B) і при третьому – біла (подія C).

Розв'язок: імовірність появи синьої плитки при першому досліді:

$$P(A) = \frac{6}{15} = 0,4.$$

Імовірність появи жовтої плитки при другому досліді за умови, що при першому досліді з'явиться синя плитка, тобто умовна імовірність:

$$P_A(B) = \frac{5}{14} \approx 0,36.$$

Імовірність появи білої плитки при третьому досліді за умови, що при першому з'явиться синя плитка, а при другому – жовта:

$$P_{AB}(C) = \frac{4}{13} \approx 0,31.$$

Шукана імовірність, за формулою (13.5):

$$P(ABC) = P(A) \cdot P(B/A) \cdot P(C/AB) = 0,4 \cdot 0,36 \cdot 0,31 \approx 0,045.$$

Приклад 13.13. У лабораторії 4 рН-метри. Для кожного рН-метру ймовірність того, що він увімкнений в даний момент, дорівнює $p = 0,6$. Знайти імовірність того, що в даний момент увімкнений хоча б один рН-метр (подія A).

Розв'язок: оскільки події «рН-метр увімкнений» і «рН-метр не увімкнений» (в даний момент) протилежні, то сума їх імовірностей дорівнює одиниці: $p + q = 1$. Звідси імовірність того, що рН-метр в даний момент не увімкнений, дорівнює

$$q = 1 - p = 1 - 0,6 = 0,4.$$

Шукана імовірність, за формулою (13.6),

$$P(A) = 1 - q^4 = 1 - 0,4^4 = 1 - 0,0256 = 0,9744.$$

13.1.4 Формула повної імовірності

Нехай $B_1, B_2, \dots, B_n$ – несумісні події, які утворюють повну групу подій; A – подія, яка може відбутись лише за умови появи однієї з подій $B_1, B_2, \dots, B_n$.

Відомі імовірності $P(B_1), P(B_2), \dots, P(B_n)$ та умовні імовірності $P_{B_1}(A), P_{B_2}(A), \dots, P_{B_n}(A)$. Потрібно знайти $P(A)$, тобто імовірність події A , яка настає лише при появі однієї з несумісних подій.

За умовою, настання події A рівнозначно появі однієї з подій $B_1 \cdot A, B_2 \cdot A, \dots, B_n \cdot A$, тоді

$$\begin{aligned} P(A) &= P(B_1) \cdot P(A/B_1) + P(B_2) \cdot P(A/B_2) + \dots + P(B_n) \cdot P(A/B_n) = \\ &= \sum_{i=1}^n P(B_i) \cdot P(A/B_i), \end{aligned}$$

Отже,

$$P(A) = \sum_{i=1}^n P(B_i) \cdot P(A/B_i). \quad (13.7)$$

Це є формула *повної імовірності* [1, 2, 20, 24].

Приклад 13.14. Імовірність того, що при роботі газового хроматографу відбудеться збій у роботі випарника, блоці програмування температур та

інших елементів знаходиться у відношенні 3:2:5.

Імовірність виявлення збою у роботі випарника дорівнює 0,8; в блоці програмування температур – 0,9; а в інших елементах – 0,9. Знайти імовірність того, що збій у роботі хроматографа буде виявлено.

Розв'язок: нехай подія A полягає у тому, що збій у роботі хроматографа буде виявлений, B_1 – збій стався у роботі випарника, B_2 – збій у блоці програмування температур, B_3 – збій виявлено в інших елементах хроматографа. Розрахуємо імовірність вказаних подій за формулою (13.1). Отримаємо:

$$\begin{aligned} p(B_1) &= 0,3; \quad p(B_2) = 0,2; \quad p(B_3) = 0,5; \\ p_{B_1}(A) &= 0,8; \quad p_{B_2}(A) = 0,9; \quad p_{B_3}(A) = 0,9. \end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned} P(A) &= P(B_1) \cdot P_{B_1}(A) + P(B_2) \cdot P_{B_2}(A) + P(B_3) \cdot P_{B_3}(A) = \\ &= 0,3 \cdot 0,8 + 0,2 \cdot 0,9 + 0,5 \cdot 0,9 = 0,87. \end{aligned}$$

Отже, імовірність того, що збій у роботі хроматографа буде виявлено, дорівнює 0,87.

13.1.5 Формули Байєса

Нехай $B_1, B_2, \dots, B_n$ - несумісні події, які утворюють повну групу подій. Їх називають *гіпотезами*, оскільки заздалегідь не відомо, яка з них відбудеться [1, 2, 20, 24, 25]. Імовірності цих подій до проведення дослідів відомі і дорівнюють $P(B_1), P(B_2), \dots, P(B_n)$ відповідно.

Припустимо, що проведено випробування, в результаті якого з'явилася подія A . Потрібно визначити, як після цього змінилися імовірності гіпотез, тобто необхідно знайти умовні імовірності $P_A(B_1), P_A(B_2), \dots, P_A(B_n)$.

За правилом множення імовірностей залежних подій:

$$P(A \cdot B_1) = P(A) \cdot P_A(B_1) = P(B_1) \cdot P_{B_1}(A),$$

звідки

$$P_A(B_1) = \frac{P(B_1) \cdot P_{B_1}(A)}{P(A)}.$$

Аналогічно

$$P_A(B_2) = \frac{P(B_2) \cdot P_{B_2}(A)}{P(A)}, \dots, P_A(B_n) = \frac{P(B_n) \cdot P_{B_n}(A)}{P(A)}.$$

Або

$$P_A(B_i) = \frac{P(B_i) \cdot P_{B_i}(A)}{P(A)}, (i = 1, 2, \dots, n), \quad (13.8)$$

$$\text{де } P(A) = \sum_{i=1}^n P(B_i) \cdot P_{B_i}(A).$$

Ці формули – *формули Байеса* – дозволяють переоцінити ймовірності подій (гіпотез) $B_1, B_2, \dots, B_n$ після того, як стане відомим результат випробувань, в якому відбулася подія A [1, 2, 20, 24, 25].

Приклад 13.15. 30 % приладів налаштовує спеціаліст високої кваліфікації і 70 % – середньої. Надійність роботи приладу, налаштованого спеціалістом високої кваліфікації, становить 0,9; а спеціалістом середньої кваліфікації – 0,8. Взятий прилад виявився надійним. Визначити ймовірність, що прилад налаштований спеціалістом високої кваліфікації

Розв'язок: подія A – надійна робота приладу. Для перевірки приладу можливі гіпотези: B_1 – прилад налаштований спеціалістом високої кваліфікації, B_2 – прилад налаштований спеціалістом середньої кваліфікації. Ймовірності цих гіпотез за умовою задачі за формулою (13.1) дорівнюють:

$$P(B_1) = 0,3, \quad P(B_2) = 0,7.$$

Умовні ймовірності:

$$P(A/B_1) = 0,9, \quad P(A/B_2) = 0,8.$$

Визначимо ймовірності гіпотез B_1 і B_2 за умови, що подія A відбулася. За

формулами (13.8) маємо:

$$P\left(\frac{B_1}{A}\right) = \frac{P(B_1) \cdot P\left(\frac{A}{B_1}\right)}{P(B_1) \cdot P_{B_1}(A) + P(B_2) \cdot P_{B_2}(A)} = \frac{0,3 \cdot 0,9}{0,3 \cdot 0,9 + 0,7 \cdot 0,8} =$$

$$= \frac{0,27}{0,83} = 0,325;$$

$$P\left(\frac{B_2}{A}\right) = \frac{P(B_2) \cdot P\left(\frac{A}{B_2}\right)}{P(B_1) \cdot P_{B_1}(A) + P(B_2) \cdot P_{B_2}(A)} = \frac{0,7 \cdot 0,8}{0,3 \cdot 0,9 + 0,7 \cdot 0,8} =$$

$$= \frac{0,56}{0,83} = 0,675.$$

Отже, імовірність того, що прилад налаштований спеціалістом високої кваліфікації (гіпотеза B_1) збільшилася, а ймовірність того, що прилад налаштований спеціалістом середньої кваліфікації (гіпотеза B_2), зменшилася.

13.2 ПОВТОРЕННЯ ВИПРОБУВАНЬ

13.2.1 Формула Бернуллі

Нехай відбувається n незалежних випробувань, в кожному з яких деяка подія A може з'явитися або не з'явитися. В кожному з цих випробувань подія A настає з однаковою імовірністю $P(A) = p$ (відповідно, подія не настає з імовірністю $q = 1 - p$). Потрібно знайти імовірність того, що в n випробуваннях подія A відбудеться рівно k раз (або не відбудеться $n - k$ раз). Позначимо таку подію через $P_n(k)$ і будемо обчислювати її за *формулою Бернуллі* [1, 2, 20, 24, 25]:

$$P_n(k) = C_n^k p^k q^{n-k}, \quad (13.9)$$

де $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ (див. [Додаток Г](#)).

Формулу Бернуллі доцільно використовувати, якщо n та k досить малі.

Приклад 13.16. Знайти імовірність того, що подія A з'явиться в п'яти незалежних випробуваннях не менше двох разів, якщо в кожному випробуванні імовірність появи події A дорівнює 0,3.

Розв'язок: за умовою, кількість проведених випробувань $n=5$. Імовірність появи події A в кожному випробуванні є стала величина і дорівнює $p = 0,3$. Тоді імовірність того, що подія A не з'явиться, дорівнює $q = 1 - p = 0,7$.

Знайдемо за формулою Бернуллі імовірності:

$$P_5(0) = C_5^0 \cdot (0,3)^0 \cdot (0,7)^5 = \frac{5!}{0! \cdot 5!} \cdot 1 \cdot 0,168 \approx 0,168,$$

$$P_5(1) = C_5^1 \cdot (0,3)^1 \cdot (0,7)^4 = \frac{5!}{4! \cdot 1!} \cdot 0,3 \cdot 0,24 \approx 0,36.$$

Шукана імовірність дорівнюватиме

$$P_5(k > 1) = 1 - [P_5(0) + P_5(1)] = 1 - 0,528 = 0,472.$$

13.2.2 Найімовірніша кількість появи подій

Найімовірнішою кількістю появи події A в n незалежних випробуваннях називається число m_0 , якому відповідає найбільше значення імовірності $P_n(m)$ [1, 24]. Для визначення m_0 будемо користуватися подвійною нерівністю:

$$np - q \leq m_0 \leq np + p. \quad (13.10)$$

Можливі випадки:

- 1) $np - q$ – ціле число, тоді існує два значення найімовірнішого числа, а саме: $m_0 = np - q$ і $m_0 = np + p$;
- 2) $np - q$ – дробове число, тоді найімовірніше число – це одне число, яке знаходиться між дробовими числами, які отримані з нерівності (13.10);
- 3) якщо np – ціле число, то $m_0 = np$.

Приклад 13.17. Пристрій має 100 елементів, які працюють незалежно один від одного. Імовірність того, що елемент працює у певний момент часу,

стала для кожного елемента i дорівнює 0,9. Обчислити найімовірнішу кількість елементів, що працюють у певний момент часу.

Розв'язок: за умовою задачі $p = 0,9$; $q = 1 - p = 1 - 0,9 = 0,1$.

На основі (13.10) запишемо:

$$\begin{aligned} 100 \cdot 0,9 - 0,1 &\leq m_0 \leq 100 \cdot 0,9 + 0,9, \\ 89,9 &\leq m_0 \leq 90,9. \end{aligned}$$

Отже, найімовірніша кількість елементів, що працюють у певний момент часу, дорівнює $m_0 = 90$.

Приклад 13.18. Фахівець з якості оглядає 24 зразки продукції. Імовірність того, що кожний зразок буде визнано придатним до застосування, дорівнює 0,6. Знайти найімовірнішу кількість зразків, які фахівець визнає придатним до застосування.

Розв'язок: за умовою задачі: $n = 24$, $p = 0,6$; $q = 1 - p = 1 - 0,6 = 0,4$.

З нерівності (13.10) маємо

$$\begin{aligned} 24 \cdot 0,6 - 0,4 &\leq m_0 \leq 24 \cdot 0,6 + 0,6, \\ 14 &\leq m_0 \leq 15. \end{aligned}$$

Оскільки $np - q$ – ціле число, то існує два значення найімовірнішої кількості подій, а саме: $m_0 = 14$; або $m_0 = 15$.

Якщо число випробувань n досить велике, то обчислення за формулою Бернуллі стають досить громіздкими. Тому на практиці використовують наближені асимптотичні формули, які для достатньо великих n дають нескінченно малу відносну похибку обчислення.

13.2.3 Асимптотична формула Лапласа

Якщо імовірність появи випадкової події у кожному із n незалежних випробувань (n досить велике) стала і дорівнює p ($0 < p < 1$), то має місце наближена формула

$$P_n(k) \approx \frac{\phi(x)}{\sqrt{npq}}, \quad (13.11)$$

$$\text{де } x = \frac{k-np}{\sqrt{npq}}, \text{ а } \phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Значення $\phi(x)$ знаходимо з довідкової літератури, наприклад, [1, 24, 25]. Також можна скористатися вбудованими функціями електронних таблиць, наприклад, MS Excel [6-8, 14, 15], або математичних пакетів [31, 41-43, 47], наприклад, MathCad [38]. При виконанні обчислень слід пам'ятати, що функція $\phi(x)$ парна, тобто $\phi(-x) = \phi(x)$.

Приклад 13.19. Знайти імовірність того, що подія A з'явиться рівно 80 раз в 400 випробуваннях, якщо ймовірність появи події A в кожному випробуванні дорівнює 0,2.

Розв'язок: за умовою задачі: $n=400$; $p=0,2$; $q=0,8$.

Скористаємося формулою (13.11):

$$P_{400}(80) \approx \frac{1}{\sqrt{400 \cdot 0,2 \cdot 0,8}} \cdot \phi(x) = \frac{1}{8} \cdot \phi(x),$$

$$x = \frac{k - np}{\sqrt{npq}} = \frac{80 - 400 \cdot 0,2}{8} = 0.$$

З довідкової літератури знаходимо [1, 24]:

$$\phi(0) = 0,3989.$$

Отже, шукана імовірність

$$P_{400}(80) \approx \frac{1}{8} \cdot 0,3989 \approx 0,04986.$$

Якщо імовірність появи випадкової події A в кожному з n незалежних випробувань (n досить велике) стала і дорівнює p ($0 < p < 1$), то імовірність $P_n(k_1, k_2)$ того, що подія A з'явиться від k_1 до k_2 раз в n випробуваннях можна наближено обчислити за формулою, отриманою на основі *інтегральної теореми Муавра-Лапласа*:

$$P_n(k_1, k_2) \approx \Phi(x'') - \Phi(x'), \quad (13.12)$$

$$\text{де } x' = \frac{k_1 - np}{\sqrt{npq}}; x'' = \frac{k_2 - np}{\sqrt{npq}}; \Phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^x e^{-\frac{z^2}{2}} dz.$$

Функція $\Phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^x e^{-\frac{z^2}{2}} dz$ називається функцією Лапласа, вона непарна, тобто $\Phi(-x) = -\Phi(x)$; її протабульовані значення можна знайти у довідковій літературі, наприклад, [1, 24]. Зазвичай таблиці функції Лапласа складають для додатних значень x , а для $x < 0$ використовують ту саму таблицю з врахуванням непарності $\Phi(x)$. Якщо в таблиці наведені значення $\Phi(x)$ тільки для $x \in [0; 5]$, то для $x > 5$ приймають $\Phi(x) = 0,5$. Також можна розрахувати значення функції Лапласа за допомогою вбудованих функцій електронних таблиць (MS Excel) [6-8, 14, 15], або математичних пакетів (MathCad тощо) [31, 38, 40-43, 47].

Приклад 13.20. Імовірність того, що проба води нестандартна, $p=0,2$. Знайти імовірність того, що серед 400 випадково відібраних проб, нестандартних виявиться від 70 до 100.

Розв'язок: За умовою $p = 0,2$; $q = 0,8$; $n = 400$; $k_1 = 70$; $k_2 = 100$.

Скористаємося формулою (13.12):

$$P_{400}(70,100) \approx \Phi(2,5) - \Phi(-1,25) = \Phi(2,5) + \Phi(1,25).$$

За допомогою MS Excel знаходимо

$$\Phi(2,5) = 0,4938; \Phi(1,25) = 0,3944.$$

Тоді шукана імовірність

$$P_{400}(70,100) \approx 0,4938 + 0,3944 = 0,8882.$$

Якщо імовірність появи випадкової події A в кожному з n незалежних випробувань стала і дорівнює p ($0 < p < 1$), то можна знайти імовірність того,

що відхилення відносної частоти $\frac{m}{n}$ від сталої імовірності p за абсолютною величиною не перевищує заданого числа $\varepsilon > 0$, за формулою

$$P\left(\left|\frac{m}{n} - p\right| \leq \varepsilon\right) \cong 2\Phi\left(\varepsilon \sqrt{\frac{n}{pq}}\right). \quad (13.13)$$

Приклад 13.21. Імовірність того, що проба води нестандартна, $p=0,1$. Знайти імовірність того, що серед випадково відібраних 400 проб відносна частота появи нестандартних проб відхилиться від імовірності $p=0,1$ за абсолютною величиною не більше, ніж на 0,03.

Розв'язок: За умовою $n = 400$; $p = 0,1$; $q = 0,9$; $\varepsilon = 0,03$. Потрібно знайти $P\left(\left|\frac{m}{400} - 0,1\right| \leq 0,03\right)$. Користуючись формулою (13.13), отримаємо

$$P\left(\left|\frac{m}{400} - 0,1\right| \leq 0,03\right) \cong 2\Phi\left(0,03 \sqrt{\frac{400}{0,1 \cdot 0,9}}\right) = 2\Phi(2).$$

За допомогою MS Excel знаходимо $\Phi(2) = 0,4772$.

Тоді $2\Phi(2) = 2 \cdot 0,4772 = 0,9544$.

Отже, шукана імовірність дорівнює 0,9544. Це означає: якщо взяти достатньо велику кількість проб води по 400 проб в кожній, то приблизно в 95,44 % цих проб відхилення відносної частоти від сталої імовірності $p=0,1$ за абсолютною величиною не перевищить 0,03.

13.2.4 Формула Пуассона для малоімовірних випадкових подій

Якщо імовірність p появи події A в кожному випробуванні стала, але мала ($p < 0,1$), число незалежних випробувань n достатньо велике, то імовірність $P_n(k)$ наближено визначають за асимптотичною формулою Пуассона [1, 24, 25]

$$P_n(k) \approx \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}, \quad (13.14)$$

де $\lambda = np$ ($\lambda = \text{const}$).

Для спрощення розрахунків з використанням формули Пуассона можна скористатись таблицею значень функції Пуассона $\frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$ з літературних джерел, наприклад, [1, 24], або розрахувати значення функції за допомогою вбудованих функцій електронних таблиць (MS Excel) [6-8, 14, 15], або математичних пакетів (MathCad тощо) [31, 38, 40-43, 47].

Приклад 13.22. Імовірність відбору нестандартної проби води дорівнює 0,004. Знайти імовірність того, що серед 1000 відібраних проб виявиться 5 нестандартних.

Розв'язок: за умовою $n = 1000$; $p = 0,004$;

$$\lambda = n \cdot p = 1000 \cdot 0,004 = 4.$$

За формулою (13.14) маємо: $P_{1000}(5) \approx \frac{4^5 e^{-4}}{5!} \approx 0,1563$.

Отже, імовірність того, що серед 1000 відібраних проб виявиться 5 нестандартних, дорівнює 0,1563.

13.3 ВИПАДКОВІ ВЕЛИЧИНИ

Випадковою називається величина, яка у результаті досліду може прийняти те або інше значення, причому наперед невідомо, яке саме [1, 24].

Випадкові величини, значення яких неперервно заповнюють деякий проміжок, називаються *неперервними* [1, 24]. Наприклад, помилка, що виникає при зважуванні речовини на аналітичних вагах, – неперервна випадкова величина. При цьому число можливих значень неперервної випадкової величини є нескінченним.

Випадкові величини, які приймають лише окремі ізольовані значення, які можна заздалегідь перелічити, називаються *дискретними* [1, 24, 25]. Випадкові величини прийнято позначати великими літерами латинського алфавіту, а їхні можливі значення – відповідними маленькими. Наприклад, випадкова величина X , її можливі значення – $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$.

Приклад дискретної випадкової величини: кількість нестандартних проб серед 10 відібраних для дослідження є випадковою величиною, але може

приймати такі значення: 0, 1, 2,...,10. Таким чином, дискретна випадкова величина може приймати окремі можливі значення, які відокремлені одне від одного певними інтервалами, з відповідними імовірностями. При цьому кількість таких можливих значень може бути кінцевою або нескінченною.

Законом розподілу випадкової величини називається співвідношення, що встановлює зв'язок між можливими значеннями випадкової величини і відповідними їм імовірностями; його можна задати *таблично (ряд розподілу), графічно або аналітично* [1, 2, 20, 24, 25].

Отже, для завдання дискретної випадкової величини потрібно не тільки перелічити всі її можливі значення, а й вказати їх імовірності.

Таблиця є найпростішою формою завдання закону розподілу дискретної випадкової величини, яка складається з двох рядків (таблиця 13.1): у верхньому вказують всі можливі значення випадкової величини X ($x_1, x_2, \dots, x_n$), у нижньому – їх імовірності ($p_1, p_2, \dots, p_n$).

Таблиця 13.1. Ряд розподілу

X	x_1	x_2	...	x_n
p	p_1	p_2	...	p_n

Значення p_i ($i = 1, 2, \dots, n$) є імовірністю події, яка полягає в тому, що випадкова величина X набуде значення x_i :

$$\begin{aligned} p_1 &= P(X = x_1), \\ p_2 &= P(X = x_2), \\ &\dots, \\ p_n &= P(X = x_n), \end{aligned}$$

Причому $\sum_{i=1}^n p_i = 1$.

Приклад 13.23. У навчальній лабораторії знаходяться 100 мірних колб: 5 колб на 10 мл, 15 колб на 25 мл, 30 колб на 50 мл, 30 колб на 100 мл і 20 колб об'ємом 200 мл. Записати закон розподілу випадкової величини X – колби певного об'єму на одного студента.

Розв'язок: запишемо можливі значення величини X :

$$x_1 = 10, x_2 = 25, x_3 = 50, x_4 = 100, x_5 = 200.$$

Запишемо імовірність того, що одна навмання взята колба матиме об'єм 10 мл; оскільки в лабораторії наявно 5 колб по 10 мл, то $p_1 = \frac{5}{100} = 0,05$.

Аналогічно обчислимо імовірності можливих значень колб на 25, 50, 100 і 200 мл:

$$p_2 = \frac{15}{100} = 0,15; p_3 = \frac{30}{100} = 0,3; p_4 = \frac{30}{100} = 0,3; p_5 = \frac{20}{100} = 0,2.$$

Таким чином, шуканий закон розподілу:

X	10	25	50	100	200
p	0,05	0,15	0,3	0,3	0,2

Перевірка – сума імовірностей має дорівнювати одиниці: $0,05+0,15+0,3+0,3+0,2=1$.

Багатокутник розподілу (рис. 13.1) є графічною формою завдання закону розподілу дискретної випадкової величини; для його побудови в прямокутній системі координат будують точки з координатами (x_1, p_1) , (x, p_2) , ..., (x_n, p_n) і з'єднують їх відрізками прямих.

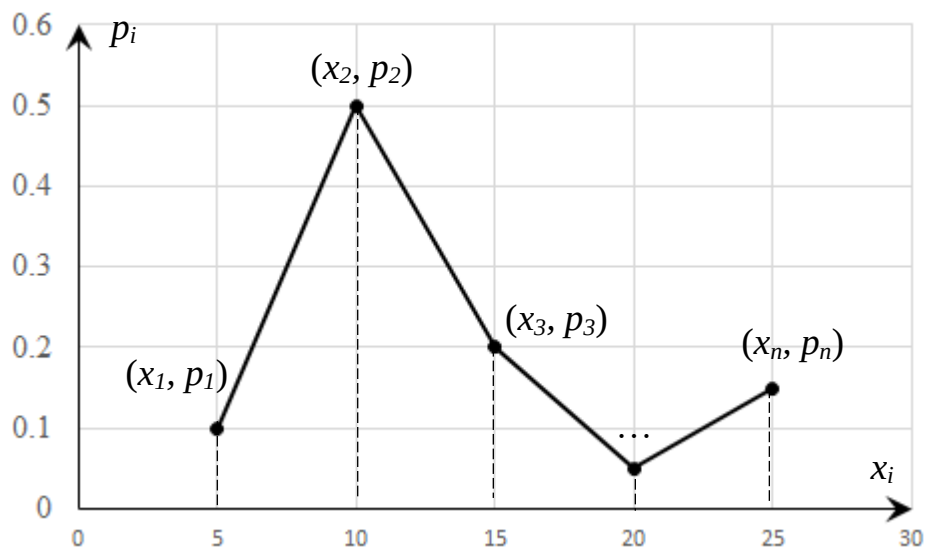


Рис. 13.1. Багатокутник розподілу

Функція розподілу $F(x)$ є однією з форм закону розподілу як дискретних, так і неперервних випадкових величин [1, 2, 20]. Функція $F(x)$ визначає для

кожного значення x імовірність того, що випадкова величина X прийме значення, менше x , тобто

$$F(x) = P(X < x).$$

Функцію розподілу $F(x)$ називають також *інтегральною функцією розподілу*, або *інтегральним законом розподілу* [1, 2, 20]. Приклад інтегральної функції випадкової величини показано на рис. 13.2.

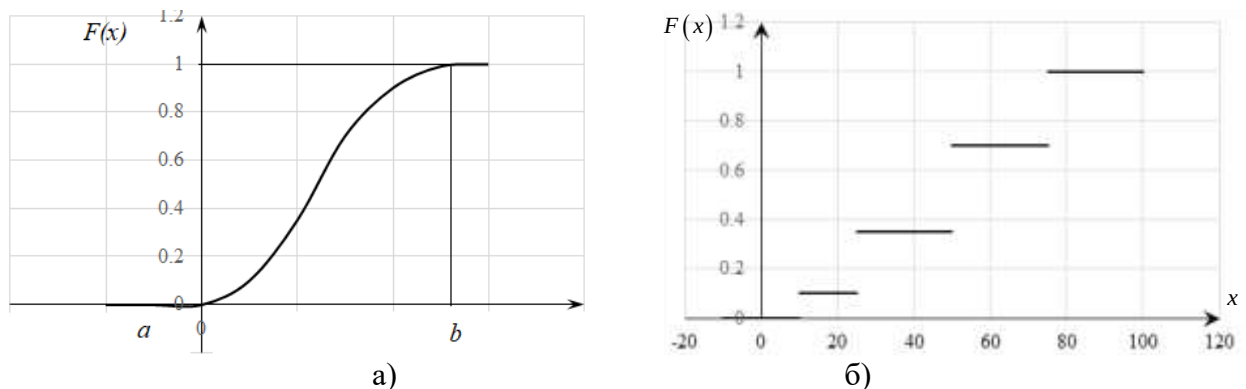


Рис. 13.2. Графіки інтегральної функції випадкових величин:
а) – неперервної, б) - дискретної

Функція розподілу має такі *властивості* [1, 2, 20, 24, 25]:

1. Значення функції розподілу належать відрізку $[0;1]$: $0 \leq F(x) \leq 1$.
2. $F(x)$ – неспадаюча функція, тобто при $x_2 > x_1$ $F(x_2) \geq F(x_1)$.

З другої властивості випливають два *наслідки*:

- I. Імовірність того, що випадкова величина X прийме значення, яке знаходиться в інтервалі (a, b) , дорівнює приросту функції розподілу на цьому інтервалі:

$$P(a < x < b) = F(b) - F(a).$$

- II. Імовірність того, що неперервна випадкова величина X прийме одне визначене значення, наприклад, x_1 , дорівнює нулю:

$$P(X = x_1) = 0.$$

3. Якщо всі можливі значення випадкової величини X належать інтервалу (a, b) , то $F(x)=0$ при $x \leq a$, $F(x)=1$ при $x > b$.

З третьої властивості випливає такий *наслідок*: якщо можливі значення неперервної випадкової величини розташовані на всій осі OX , то справедливі такі граничні співвідношення:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0; \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1.$$

Графік функції розподілу неперервної випадкової величини, побудований на основі властивостей 1-3, наведений на рис. 13.2, а.

Для дискретної випадкової величини X функція розподілу $F(x)$ дорівнює сумі ймовірностей p_i тих її значень x_i , які менші за x :

$$F(x) = \sum_{x_i < x} p_i.$$

Приклад 13.24. Знайти функцію розподілу для випадкової величини X , заданої рядом розподілу:

X	10	25	50	75	100
p	0,1	0,25	0,35	0,2	0,1

Розв'язок: розрахуємо значення функції розподілу:

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq 10 \\ 0,1 & \text{при } 10 < x \leq 25 \\ 0,35 & \text{при } 25 < x \leq 50 \\ 0,7 & \text{при } 50 < x \leq 75 \\ 0,9 & \text{при } 75 < x \leq 100 \\ 1 & \text{при } x > 100 \end{cases},$$

а її графік являє собою функцію, що показана на рис. 13.2, б.

У точках $x_1 = 10$, $x_2 = 25$, $x_3 = 50$, $x_4 = 75$, $x_5 = 100$ функція $F(x)$ змінюється стрибкоподібно, причому величина стрибків дорівнює ймовірностям $p_1 = 0,1$; $p_2 = 0,25$; $p_3 = 0,35$; $p_4 = 0,2$; $p_5 = 0,1$.

Однією з форм закону розподілу, що застосовується тільки для неперервних випадкових величин, є *щільність розподілу* $f(x)$, яка дорівнює першій похідній функції розподілу $F'(x)$:

$$f(x) = F'(x).$$

Функцію $f(x)$ називають також *диференціальною функцією розподілу* випадкової величини X , або *диференціальним законом розподілу* [2, 20, 44, 46].

Щільність розподілу має такі *властивості*:

1. $f(x) \geq 0$: ця властивість випливає з того, що функція розподілу $F(x)$ є неспадною функцією, отже, її похідна $F'(x)=f(x)$ є невід'ємною функцією.

Геометрично ця властивість означає, що графік щільності розподілу (крива розподілу) розташований не нижче осі абсцис.

2. Невласний інтеграл від щільності розподілу в нескінченних межах дорівнює одиниці:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1.$$

Геометрично це означає, що повна площа, обмежена кривою розподілу і віссю абсцис, дорівнює одиниці. У разі, якщо всі можливі значення випадкової величини належать інтервалу (a, b) , то

$$\int_a^b f(x)dx = 1.$$

Імовірність того, що неперервна випадкова величина X прийме значення, що належить інтервалу (a, b) , дорівнює визначеному інтегралу від щільності розподілу, узятому в межах від a до b :

$$P(a < X < b) = \int_a^b f(x)dx.$$

Знаючи щільність розподілу $f(x)$, можна знайти функцію розподілу $F(x)$ за формулою:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x)dx.$$

13.4 ЧИСЛОВІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН

У практичних задачах для опису випадкових величин зручніше використовувати не закон розподілу, а числа, які характеризують ту чи іншу особливість розподілу випадкової величини; наприклад, середнє значення випадкової величини; розсіювання можливих значень випадкової величини навколо середнього значення тощо [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46].

Нижче розглянуто числові характеристики випадкових величин, які найчастіше використовуються для обробки результатів спостережень у задачах хімічної технології: математичне сподівання, мода, медіана, дисперсія, стандартне відхилення, та їх властивості.

Нехай дискретна випадкова величина X приймає значення $x_1, x_2, \dots, x_n$ з імовірностями $p_1, p_2, \dots, p_n$. Середнє значення усіх можливих значень величини X з урахуванням «ваги» кожного значення, що дорівнює імовірності цього значення, називається *математичним сподіванням* випадкової величини:

$$M(X) = \frac{x_1 p_1 + x_2 p_2 + \dots + x_n p_n}{p_1 + p_2 + \dots + p_n} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i p_i}{\sum_{i=1}^n p_i}.$$

Оскільки $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, то

$$M(X) = \sum_{i=1}^n x_i p_i. \quad (13.15)$$

Таким чином, *математичним сподіванням дискретної випадкової величини X* називається сума добутків усіх можливих значень випадкової величини на імовірності цих значень [1, 25].

Математичне сподівання характеризує положення випадкової величини на числовій осі. При досить великій кількості дослідів математичне сподівання наближається до середнього арифметичного значень випадкової величини, тобто

$$\bar{X} \approx M(X).$$

Для неперервної випадкової величини X математичне сподівання виражається не сумою, а інтегралом:

$$M(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx, \quad (13.16)$$

де $f(x)$ – щільність розподілу неперервної випадкової величини X .

Якщо можливі значення неперервної випадкової величини X належать відрізьку $[a, b]$, то (13.16) можна записати:

$$M(X) = \int_a^b xf(x)dx.$$

Основні властивості математичного сподівання [1, 2, 20, 24, 25]:

1. Математичне сподівання постійної величини дорівнює самій постійній величині:

$$M(const) = const.$$

2. Постійний множник можна виносити за знак математичного сподівання:

$$M(C \cdot X) = C \cdot M(X).$$

3. Математичне сподівання добутку декількох взаємно незалежних випадкових величин дорівнює добуткові їхніх математичних сподівань:

$$M\left[\prod_{i=1}^n X_i\right] = \prod_{i=1}^n M(X_i).$$

4. Математичне сподівання суми двох або більше випадкових величин дорівнює сумі математичних сподівань цих величин:

$$M(X_1 + X_2 + \dots + X_n) = M(X_1) + M(X_2) + \dots + M(X_n).$$

Остання властивість справедлива як для незалежних, так і для залежних випадкових величин.

Модою дискретної випадкової величини X називається таке її значення, яке має найбільшу імовірність [1, 25]. Модою неперервної випадкової величини X називається таке її значення, при якому щільність її розподілу досягає максимуму.

Якщо багатокутник розподілу (крива розподілу) має більше одного максимуму, то такий розподіл називається *полімодальним*. Розподіл, що має мінімум, але не має максимуму, називається *антимодальним*.

Медіаною випадкової величини називають таке її значення, для якого справедлива рівність [1, 25]

$$P(X < Me) = P(X > Me),$$

тобто однаково імовірно, чи виявиться випадкова величина X більшою або меншою за Me .

Мода та медіана теж є характеристиками положення випадкової величини. Якщо математичне сподівання, мода і медіана розподілу збігаються, то такий розподіл називають *симетричним*.

Числовою характеристикою розсіювання можливих значень випадкової величини навколо її математичного сподівання є дисперсія.

Дисперсією випадкової величини X називають математичне сподівання квадрата відхилення випадкової величини від її математичного сподівання:

$$D(X) = M(X - M(X))^2.$$

Якщо X – випадкова дискретна величина, то

$$D(X) = \sum_{i=1}^n [x_i - M(X)]^2 p_i.$$

де x_i – можливі значення випадкової величини X ; p_i – відповідні ймовірності.

Для випадкових неперервних величин дисперсія обчислюється за формулою

$$D(X) = \int_{-\infty}^{\infty} [x - M(x)] f(x) dx,$$

де $f(x)$ – щільність розподілу.

Якщо можливі значення X належать відрітку $[a, b]$, то

$$D(X) = \int_a^b [x - M(x)] f(x) dx.$$

Дисперсію як дискретних, так і випадкових неперервних величин зручніше обчислювати за формулою

$$D(X) = M(X^2) - [M(X)]^2,$$

де $M(X^2) = \sum_{i=1}^n x_i^2 p_i$, якщо X – випадкова дискретна величина, і $M(X^2) = \int_a^b x^2 f(x) dx$, якщо X – випадкова неперервна величина.

Дисперсія має розмірність квадрата випадкової величини, тому її незручно використовувати для розв'язання практичних задач. Тому величину розсіювання можливих значень випадкової величини навколо середнього значення можна охарактеризувати *стандартним відхиленням* ¹

$$\sigma(X) = \sqrt{D(X)},$$

розмірність якого збігається з розмірністю випадкової величини [1, 2, 20, 25].

Узагальненням основних числових характеристик випадкових величин є *поняття моментів випадкової величини* [1, 24, 25]. Відомості про початкові та центральні моменти випадкових величин наведені у [Додатку Д](#). Розглянуті моменти називаються *теоретичними*.

У практичних задачах хімічної технології оперують нормованими випадковими величинами. *Нормованою випадковою величиною* T називають центровану випадкову величину $\overset{\circ}{X}$, виражену в частках стандартного

¹ Інша назва - середнє квадратичне відхилення

відхилення:

$$T = \frac{\overset{\circ}{X}}{\sigma(X)} = \frac{X - M(X)}{\sigma(X)}.$$

Математичне сподівання нормованої випадкової величини $M(T)$ дорівнює нулю, а дисперсія $D(T)$ дорівнює одиниці.

13.5 ЗАКОНИ РОЗПОДІЛУ ДИСКРЕТНИХ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН

13.5.1 Біноміальний розподіл

Біноміальним називають розподіл імовірностей випадкової дискретної величини X – кількість випадків появи деякої події A в n незалежних дослідах, у кожному з яких імовірність появи події постійна і дорівнює p , які визначаються за формулою Бернуллі (13.9).

У табличній формі біноміальний закон розподілу має вигляд:

Таблиця 13.2. Біноміальний закон розподілу у табличній формі

X	0	1	2	...	k	...	n
p	$C_n^0 p^0 q^n$	$C_n^1 p^1 q^{n-1}$	$C_n^2 p^2 q^{n-2}$	...	$C_n^k p^k q^{n-k}$	...	$C_n^n p^n q^0$

Математичне сподівання випадкової величини X , що підпорядковується біноміальному закону розподілу, дорівнює добутку числа дослідів n на імовірність p появи події в кожному досліді:

$$M(X) = n \cdot p.$$

Дисперсія і стандартне відхилення біноміального розподілу визначаються за формулами [1, 2, 20, 24, 25]:

$$D(X) = npq; \sigma(X) = \sqrt{npq}.$$

Показники асиметрії й ексцесу для біноміального розподілу мають вигляд

$$A_s = \frac{q - p}{\sqrt{npq}}; \quad E_k = \frac{1 - 6pq}{npq}.$$

Біноміальний розподіл набув широкого застосування у процедурах контролю якості хімічної продукції.

13.5.2 Розподіл Пуассона

Пуассонівським називають розподіл імовірностей випадкової дискретної величини X – кількість випадків появи події в n незалежних дослідах (n досить велике), у кожному з яких імовірність появи події постійна і дорівнює p ($p \leq 0,1$), обумовлених асимптотичною формулою Пуассона (13.14). Цей розподіл залежить від одного параметра – λ . Тобто параметр λ однозначно визначає ймовірність появи подій у розподілі Пуассона [1, 2, 20, 24, 25].

У табличній формі закон Пуассона має вигляд:

Таблиця 13.3. Закон Пуассона у табличній формі

X	0	1	2	...	k	...	n
p	$e^{-\lambda}$	$\frac{\lambda}{1!}e^{-\lambda}$	$\frac{\lambda^2}{2!}e^{-\lambda}$	...	$\frac{\lambda^k}{k!}e^{-\lambda}$	...	$\frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda}$

Особливістю розподілу Пуассона є рівність математичного сподівання і дисперсії:

$$M(X) = D(X) = \lambda = np.$$

Показники асиметрії й ексцесу мають вигляд:

$$A_s = 1/\sqrt{\lambda}; \quad E_k = 1/\lambda.$$

Розподіл Пуассона у хімічній технології та інженерії застосовують, наприклад, для прогнозування кількісних та якісних показників продукції.

13.6 ЗАКОНИ РОЗПОДІЛУ НЕПЕРЕРВНИХ ВИПАДКОВИХ ВЕЛИЧИН

13.6.1 Показниковий розподіл

Показниковим (експоненційним) називають розподіл імовірностей випадкової неперервної величини X , що описується диференціальною функцією [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ \lambda e^{-\lambda x} & \text{при } x \geq 0 \end{cases}$$

де λ – додатна постійна величина.

Показниковий розподіл визначається одним параметром λ . Параметр λ однозначно визначає імовірність появи подій у показниковому розподілі.

Інтегральна функція показникового розподілу має вигляд:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ 1 - e^{-\lambda x} & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

Математичне сподівання показникового розподілу дорівнює оберненій величині параметра λ :

$$M(X) = \frac{1}{\lambda}.$$

Дисперсія показникового розподілу:

$$D(X) = \frac{1}{\lambda^2}.$$

Стандартне відхилення дорівнює математичному сподіванню:

$$\sigma(X) = M(X) = \frac{1}{\lambda}.$$

Асиметрія та ексцес показникового розподілу при будь-якому значенні параметра λ мають постійні значення:

$$A_s = 2; \quad E_k = 9.$$

Показниковий розподіл знаходить широке застосування у прикладних науках, наприклад, у теорії надійності; для цього використовують функцію надійності, яка визначається рівністю:

$$R(t) = e^{-\lambda t}, \quad (13.17)$$

де λ – інтенсивність відмов: чим більше це число, тим довше пропрацює прилад.

Приклад 13.25. Час безвідмовної роботи блоку програмування температур у газовому хроматографі розподілений за показниковим законом $f(t) = 0,002e^{-0,002t}$ при $t \geq 0$ (t – час у годинах). Знайти імовірність того, що блок програмування температур пропрацює безвідмовно 500 годин.

Розв'язок: за умовою, постійна інтенсивність відмов $\lambda=0,002$. Скористаємось формулою (13.17):

$$R(500) = e^{-0,002 \cdot 500} = e^{-1} \approx 0,37.$$

Отже, імовірність того, що блок програмування температур у газовому хроматографі безвідмовно пропрацює 500 годин, становить 0,37.

13.6.2 Рівномірний розподіл

Рівномірним називають розподіл імовірностей випадкової неперервної величини X , якщо на інтервалі (a, b) , якому належать усі можливі значення X , щільність розподілу зберігає постійне значення $\left(f(x) = \frac{1}{b-a}\right)$, а поза межами цього інтервалу – $f(x) = 0$ [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46].

Диференціальна та інтегральна функції рівномірного розподілу мають вигляд:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq a, \\ \frac{1}{b-a} & \text{при } a \leq x \leq b, \\ 0 & \text{при } x > b; \end{cases} \quad F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq a, \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{при } a \leq x \leq b, \\ 1 & \text{при } x > b. \end{cases}$$

Математичне сподівання рівномірно розподіленої випадкової величини X : $M(X) = \frac{a+b}{2}$.

Дисперсія випадкової величини X : $D(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$.

Стандартне відхилення: $\sigma(X) = \frac{b-a}{2\sqrt{3}}$.

Оскільки рівномірний розподіл є симетричним, то $A_s = 0$, коефіцієнт ексцесу $E_k = -1,2$; медіана $Me = M(X) = \frac{a+b}{2}$; моди рівномірний розподіл не має.

13.6.3 Нормальний розподіл

Нормальним називають розподіл імовірностей неперервної випадкової величини X , якщо диференціальна функція має вигляд [1, 2, 20, 25]

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}}.$$

Нормальний розподіл визначається двома параметрами: a – математичне сподівання, σ – стандартне відхилення.

Особливість нормального закону розподілу полягає в тому, що він є граничним для інших законів розподілу [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46].

Графік диференціальної функції нормального розподілу, який називається *нормальною кривою (кривою Гауса)*, розташований над віссю абсцис, симетричний відносно прямої $x = a$ (рис. 13.3):

- при $x = a$ функція $f(x)$ має максимум, рівний $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$;
- точки графіка $\left(a - \sigma, \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi e}}\right)$ і $\left(a + \sigma, \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi e}}\right)$ є точками перегину;
- при $x \rightarrow \pm\infty$ крива асимптотично наближається до вісі абсцис.

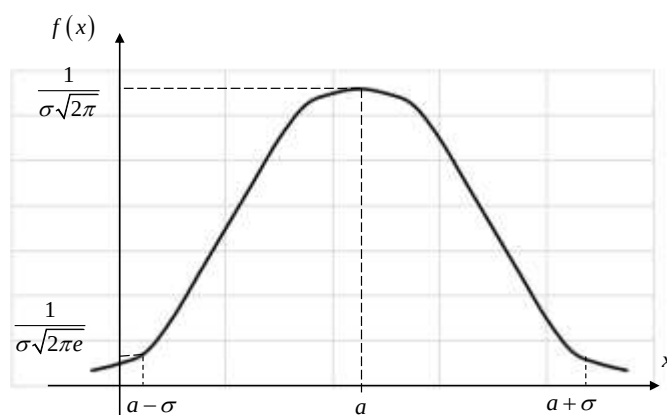


Рис. 13.3. Нормальна крива

Розташування нормальної кривої уздовж осі абсцис змінюється зі зміною параметра a ; форма нормальної кривої міняється при зміні параметра σ : зі зростанням σ максимальна ордината кривої зменшується, а сама крива стає більш пологою, і навпаки.

Асиметрія, ексцес, мода, медіана нормального розподілу відповідно дорівнюють:

$$A_s = 0; E_k = 0; M_0 = a; Me = a.$$

Нормованим називають нормальний розподіл з параметрами $a = 0$, $\sigma = 1$.

Тоді диференціальна функція нормованого розподілу має вигляд

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}.$$

На практиці часто виникає необхідність обчислювати імовірність того, що нормально розподілена випадкова величина X прийме значення, що належать інтервалу (a, b) , з використанням рівності

$$P(\alpha < X < \beta) = \Phi\left(\frac{\beta - a}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{\alpha - a}{\sigma}\right), \quad (13.18)$$

де $\Phi(x)$ – функція Лапласа, (13.11).

Приклад 13.26. У результаті проведених досліджень виявилось, що математичне сподівання вмісту кисню в газовій суміші становить 11,75 %; стандартне відхилення – 0,12 %. Знайдіть імовірність того, що вміст кисню у суміші прийме значення в інтервалі (11,5; 12,5), якщо відомо, що значення вмісту кисню в газовій суміші розподілене за нормальним законом.

Розв’язок: у даному прикладі вміст кисню в газовій суміші – випадкова величина X , яка розподілена за нормальним законом; її математичне сподівання $a = 11,75$, стандартне відхилення $\sigma = 0,12$. Тоді за формулою (13.18) знайдемо ймовірність того, що вміст кисню у суміші прийме значення в інтервалі:

$$\begin{aligned} P(11,5 < X < 12,5) &= \Phi\left(\frac{12,5 - 11,75}{0,12}\right) - \Phi\left(\frac{11,5 - 11,75}{0,12}\right), \\ P(11,5 < X < 12,5) &= \Phi(6,25) - \Phi(-2,08) = \Phi(6,25) + \\ &+ \Phi(2,08) = 0,50 + 0,48 = 0,98. \end{aligned}$$

Отже, імовірність того, що вміст кисню у суміші прийме значення в інтервалі (11,5; 12,5), дорівнює 0,98.

Імовірність відхилення нормально розподіленої випадкової величини X від її математичного сподівання a на величину, меншу від заданого додатного числа δ , визначають, користуючись рівністю:

$$P(|X - a| < \delta) = 2\Phi\left(\frac{\delta}{\sigma}\right). \quad (13.19)$$

Прийmemo $\delta = \sigma t$ отримаємо:

$$P(|X - a| \leq \sigma t) = 2\Phi(t). \quad (13.20)$$

Приклад 13.27. Допустиме відхилення температури продукту на виході

з реактора не повинно перевищувати ± 10 °С від заданого значення. Стандартне відхилення випадкової похибки становить $\sigma = 8$ °С. Визначите імовірність, з якою результат вимірювання температури укладеться в заданий інтервал ± 10 °С. При розв'язанні задачі прийняти, що випадкова похибка розподілена за нормальним законом.

Розв'язок: скористаємось формулою (13.19):

$$P(|X - a| < 10) = 2\Phi\left(\frac{10}{8}\right) = 2\Phi(1,25) = 2 \cdot 0,3944 = 0,7844.$$

Отже, імовірність того, що відхилення результату вимірювання температури продукту на виході з реактора не перевищуватиме 0,7844.

13.6.4 Правило трьох сігм

Правилом трьох сігм користуються, коли необхідно визначити, чи має досліджувана випадкова величина нормальний розподіл [1, 2, 20, 44, 46]. Якщо умова, яка зазначена в правилі, виконується, то випадкова величина розподілена нормально, у протилежному випадку розподіл випадкової величини нормальним не буде.

При $t = 3$ за формулою (13.20) маємо:

$$P(|X - a| < 3\sigma) = 2\Phi(3) = 2 \cdot 0,49865 = 0,9973,$$

тобто можна вважати практично достовірним подію, яка полягає в тому, що випадкова величина X , яка підпорядковується нормальному закону, прийме значення в інтервалі $(a - 3\sigma, a + 3\sigma)$.

Сутність *правила трьох сигм* [1, 2, 20]:

якщо випадкова величина розподілена за нормальним законом, то абсолютна величина її відхилення від математичного сподівання не перевершує потроєного стандартного відхилення.

Якщо про розподіл випадкової величини невідомо нічого, крім діапазону її випадкових відхилень, то на підставі правила трьох сигм можна орієнтовно оцінити стандартне відхилення: варто взяти максимальне практично можливе

відхилення випадкової величини від її середнього значення і розділити це відхилення на три.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 13

1. Які питання вивчає теорія імовірностей? Математична статистика?
2. Дайте визначення поняттю «випадкова подія».
3. Які події називають несумісними, рівноможливими, достовірними?
4. Як обчислити імовірність події? Імовірність появи хоча б однієї події?
5. Сформулюйте основні правила теорії імовірностей.
6. Наведіть приклади застосування формул: повної імовірності, Байєса, Бернуллі, Лапласа, Пуассона.
7. Дайте визначення закону розподілу випадкової величини.
8. Наведіть числові характеристики випадкових величин.
9. Сформулюйте закони розподілу дискретних випадкових величин.
10. Сформулюйте закони розподілу неперервних випадкових величин.
11. Наведіть приклад застосування правила трьох сігм.
12. В студентській групі 20 студентів, серед яких 5 відмінників. Навмання по списку відібрано 8 студентів. Визначити ймовірність того, що серед відібраних студентів виявиться 3 відмінники.
13. В партії із 10 виробів 7 бракованих. Визначити ймовірність того, що серед навмання взятих 6 виробів рівно 4 вироби браковані.
14. В студентській групі 25 студентів, серед яких 9 студентів мають спортивний розряд. За списком навмання відібрано 10 студентів. Знайти ймовірність того, що серед них виявиться 4 студенти-розрядники.
15. В партії з 20 приладів 5 несправних. Визначити ймовірність того, що серед навмання взятих для перевірки трьох приладів виявиться:
а) тільки справні прилади; б) тільки несправні прилади; в) один несправний і два справних прилади.
16. В майстерню для ремонту поступило 15 приладів, серед яких 6 приладів потребують загального регулювання. Майстер навмання бере

- 5 приладів. Яка ймовірність того, того що два з них потребують загального регулювання?
17. В розіграші університетської першості з баскетболу приймають участь 18 команд, з яких випадково формують дві групи по 9 команд в кожній. Серед учасників змагань є 5 команд екстракласу. Знайти ймовірність таких подій: а) всі команди екстракласу попадуть в одну й ту ж групу; б) дві команди екстракласу попадуть в одну групу, а три в іншу.
18. В групі з 30 учнів на контрольній роботі 6 студентів отримали оцінку “відмінно”, 10 учнів – “добре”, 9 учнів – “задовільно”. Визначити ймовірність того, що всі три учні, які викликані до дошки, мають незадовільні оцінки по контрольній роботі.
19. Шість операторів можуть обслуговувати 10 пронумерованих приладів. Кожний оператор вибирає випадково і з однаковою ймовірністю будь-який прилад, але за умови, що жоден прилад не може обслуговуватися більш ніж одним оператором. Знайти ймовірність того, що будуть вибрані для обслуговування прилади з номерами 1, 2, 3, 4, 5, 6.
20. Робітник обслуговує три станки, які працюють незалежно один від одного. Ймовірність того, що на протязі години не потребує уваги робітника перший станок – 0,9, другий – 0,8, третій – 0,85. Знайти ймовірність того, що на протязі години хоча б один станок потребує уваги робітника.
21. Прилад складається з чотирьох вузлів – першого, другого, третього, четвертого, які за час T роботи приладу можуть незалежно один від одного виходити з ладу. Надійність (ймовірність безвідмовної роботи) i -го вузла дорівнює p_i ($p_1 = 0,3$, $p_2 = 0,4$, $p_3 = 0,6$, $p_4 = 0,8$); ймовірність відмови $q_i = 1 - p_i$ ($i = 1, 2, 3, 4$). Знайти ймовірності таких подій:
- А – всі вузли працюють безвідмовно; В – перший вузол відмовив, інші ні;
 - С – один з вузлів відмовив, інші ні; D – відмовили рівно два вузли з чотирьох;
 - Е – відмовило не менш двох вузлів; F – відмовив хоча б один вузол.

22. Над виготовленням виробу працюють послідовно k робітників; якість виробу підчас передачі наступному робітнику не перевіряється. Перший робітник допускає брак з ймовірністю p_1 , другий – з ймовірністю p_2 , і т.д. Знайти ймовірність того, що при виготовленні виробу буде допущений брак. Вважати, що $k=5$, $p_1 = 0,1$; $p_2 = 0,2$; $p_3 = 0,4$; $p_4 = 0,6$; $p_5 = 0,8$.
23. На трьох автоматичних станках виготовляються однакові деталі. Відомо, що 30 % продукту виробляється першим станком, 25 % – другим і 45 % – третім. Ймовірність виготовлення стандартної деталі на першому станку дорівнює 0,99, на другому – 0,988 і на третьому – 0,98. Виготовлені деталі знаходяться на складі. Знайти ймовірність того, що навмання взята деталь не відповідає стандарту.
24. В групі спортсменів 20 лижників, 6 велосипедистів і 4 бігуна. Ймовірність виконати кваліфікаційну норму для лижника 0,9, для велосипедиста 0,8 і для бігуна 0,75. Знайти ймовірність того, що вибраний навмання спортсмен виконає норму.
25. Для участі в студентських відбіркових спортивних змаганнях виділено з першої групи курсу 4, з другої 6, з третьої 5 студентів. Ймовірності того, що студент першої, другої і третьої групи попаде в збірну інституту, відповідно дорівнюють 0,9; 0,7 і 0,8. Навмання вибраний студент внаслідок змагання попав в збірну. До якої з груп найімовірніше всього належав цей студент?
26. В першому ящику знаходиться 20 деталей, серед яких 15 стандартних; в другому – 30 деталей, серед яких 24 стандартних; в третьому – 10 деталей, серед яких 6 стандартних. Знайти ймовірність того, що вибрана навмання деталь із навмання вибраного ящика – стандартна.
27. Завод відправив на базу 5000 доброякісних виробів. Ймовірність того, що під час транспортування їх на базу один виріб буде пошкоджено, становить 0,0002. Обчислити ймовірність того, що серед 5000 виробів під час транспортування буде пошкоджено: а) рівно 3 вироби; б) рівно один виріб; в) не більше 3 виробів; г) більше трьох виробів.

28. Ймовірність того, що за час t один конденсатор вийде з ладу дорівнює 0,2. Знайти ймовірність того, що за час t із 100 незалежно працюючих конденсаторів вийдуть з ладу: а) не менше 20 конденсаторів; б) менше 28 конденсаторів; г) від 14 до 26 конденсаторів.
29. Пристрій, який складається з п'яти незалежно працюючих елементів, включається на час t . Ймовірність відмови кожного з елементів за цей час дорівнює 0,2. Знайти ймовірності того, що за час t відмовлять: а) два елементи; б) не менше двох елементів.
30. В цеху 6 моторів. Для кожного мотора ймовірність того, що він в заданий момент увімкнутий, дорівнює 0,8. Знайти ймовірність того, що в даний момент часу виявляться увімкнутими: а) 4 мотора; б) не менше чотирьох моторів; в) менше трьох моторів.

14 ОСНОВИ МАТЕМАТИЧНОЇ СТАТИСТИКИ

Математична статистика – це розділ науки, який займається теоретичним аналізом і розробкою методів отримання та аналізу емпіричних (експериментальних) даних, що містять елемент випадковості, тобто теорією планування експериментів, відбору даних, статистичних оцінок, перевірки гіпотез і статистичних моделей. Використовуючи апарат теорії імовірностей, вона має на меті оцінити властивості розподілу наявних даних і методологічно спланувати збір даних так, щоб ця оцінка була ефективною. Отже, якщо теорія імовірностей визначає імовірність певного результату (випадкового експерименту) на основі знання поведінки певної випадкової величини, то математична статистика шукає властивості випадкової величини на основі наявних даних. Ця процедура називається статистичною індукцією. Основними типами статистичної індукції є точкова оцінка, інтервальна оцінка та перевірка гіпотези.

Одним із завдань математичної статистики є формулювання та перевірка складних гіпотез щодо даних, які зазвичай пов'язані із визначенням кількох параметрів або складної структури даних. Зокрема, завданнями математичної статистики є перевірка гіпотез про закон розподілу випадкової величини, про форму зв'язку між випадковими величинами або про значення параметру, який оцінюють [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46].

14.1 ЗБІР СТАТИСТИЧНИХ ДАНИХ

Збирання даних може здійснюватися безпосередньо дослідником шляхом проведення *експериментальних досліджень* або *спостережень*. При цьому статистичний експеримент передбачає планування дослідження, включаючи виконання певних дій з об'єктом дослідження, встановлення меж варіювання змінних, кількість паралельних дослідів тощо відповідно до певного протоколу випробувань. Під час спостережень маніпулювання з об'єктом дослідження не проводиться, натомість дані збираються для вивчення зв'язку між однією або декількома незалежними змінними.

Окрім безпосереднього проведення експерименту чи спостережень,

дослідник може отримувати дані з інших джерел, наприклад, з наукових звітів, статей тощо. Зібрану інформацію треба ретельно описати: завжди треба реєструвати джерело даних, метод збирання даних, час та дату вимірювань¹, методику, за якою проводилось вимірювання, обладнання, яке використовувалось в процесі вимірювання тощо.

Сучасні прилади та засоби вимірювальної техніки дозволяють збирати велику кількість інформації. З одного боку, чим більше об'єм даних, тим більше інформації можна отримати відносно об'єкту дослідження. З іншого боку, велика кількість даних ускладнює їх сприйняття. Тому перед проведенням досліджень/спостережень важливо встановити мету збирання даних та способи їх аналізу та класифікації.

Процес отримання необхідної інформації можна розділити на декілька етапів [1, 17-19].

На першому етапі треба визначити мету збирання даних; для інженерних задач такою метою може бути:

- контроль і керування технологічним процесом;
- аналіз відхилень від встановлених норм та вимог;
- контроль якості продукції тощо.

Другий етап збирання даних пов'язаний із класифікацією даних за визначеними ознаками. Важливо класифікувати дані з декількох можливих кутів розгляду, щоб забезпечити об'єктивність дослідження та дозволити якомога повніше зрозуміти явища, що досліджуються. Наприклад, якщо ставиться задача зрозуміти, чому два різних працівника виробляють неякісну продукцію, то треба вибирати такі дані, щоб можна було порівняти роботу кожного з них. Таке розділення даних на декілька підгруп за тою чи іншою ознакою називають *розшиаруванням* або *стратифікацією*. Ще одним корисним прийомом на цьому етапі є *збір даних парами*. Це важливо у випадках, коли треба встановити залежність між двома показниками. Коли дані парні, їх легко аналізувати за *діаграмами розсіювання*, приклади яких наведені нижче. На другому етапі збирання даних доцільно вивчати тематичну літературу,

¹ Якщо дослідження передбачає проведення вимірювань

долучати експертів, проводити імітаційне моделювання.

На *третьому етапі* збирання даних треба перевіряти надійність результатів вимірювань. Для цього дані «фільтруються» за допомогою серії заздалегідь визначених кроків, щоб витягти найбільш відповідну інформацію. Наприклад, якщо в ряду вимірів одне чи декілька значень суттєво відрізняються від інших, потрібно додатково проаналізувати їх; і якщо це промах (груба похибка), то такі дані слід виключити з ряду вимірювань.

14.2 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 14

Нехай проводиться випадковий експеримент¹ з метою дослідження певної випадкової ознаки X , що характерна для великої кількості однотипних об'єктів. Множину цих об'єктів з досліджуваною ознакою X (або сукупність значень ознаки X всіх об'єктів даного типу) називають *генеральною сукупністю* [1, 25]. Число об'єктів N у генеральній сукупності називається *об'ємом генеральної сукупності* [1, 25].

Вибірковою сукупністю або *вибіркою* об'єму n ($n < N$) називається сукупність n випадково вибраних об'єктів з генеральної сукупності для дослідження ознаки X (або сукупність $x_1, x_2, \dots, x_n$ значень ознаки X випадково вибраних n об'єктів з генеральної сукупності) [1, 17-19, 25].

Вибірки поділяють на *повторні* та *безповторні*: якщо досліджуваний об'єкт перед відбором наступного повертається у генеральну сукупність, то така вибірка називається *повторною*; якщо об'єкт не повертається, то така вибірка є *безповторною*. На практиці найчастіше застосовують безповторний випадковий відбір.

Сукупність значень $x_1, x_2, \dots, x_n$, прийнятих випадковою величиною X в n дослідках, називають *простою статистичною сукупністю* або *простим статистичним рядом* [1, 17-19, 25]:

Таблиця 14.1. Простий статистичний ряд

i	1	2	3	...	n
x_i	x_1	x_2	x_3	...	x_n

Статистичним розподілом частот (відносних частот) називають

¹ Визначення випадкового експерименту наведено у розділі 13.

сукупність можливих значень випадкової величини X , тобто $(x_1, x_2, \dots, x_k)$, і відповідних їм частот n_i ($n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$) або відносних частот W_i ($W_i = \frac{n_i}{n}$). Вказані розподіли представляють зазвичай у вигляді таблиць 14.2 та 14.3.

Таблиця 14.2. Статистичний розподіл частот

x_i	x_1	x_2	...	x_k
n_i	n_1	n_2	...	n_k

Таблиця 14.3. Статистичний розподіл відносних частот

x_i	x_1	x_2	...	x_k	$\sum_{i=1}^k W_i = 1$
W_i	W_1	W_2	...	W_k	

Значення випадкової величини зазвичай записують у порядку їх зростання. Тоді значення $x_1, x_2, \dots, x_k$ називають *варіантами*, а послідовність варіант, записаних у зростаючому порядку – *варіаційним рядом* [1, 17-19, 25].

Графічним зображенням статистичного розподілу частот є *полігон частот*, яким називають ламану, що складається з відрізків, які з'єднують точки з координатами $(x_1, n_1), (x_2, n_2), \dots, (x_k, n_k)$. *Полігоном відносних частот* називають ламану, яка з'єднує точки з координатами $(x_1, W_1), (x_2, W_2), \dots, (x_k, W_k)$. Полігон частот та полігон відносних частот зображено на рис. 14.1 (а) та (б) відповідно. Полігон частот та полігон відносних частот використовують для візуалізації статичного розподілу [1, 17-19, 25].

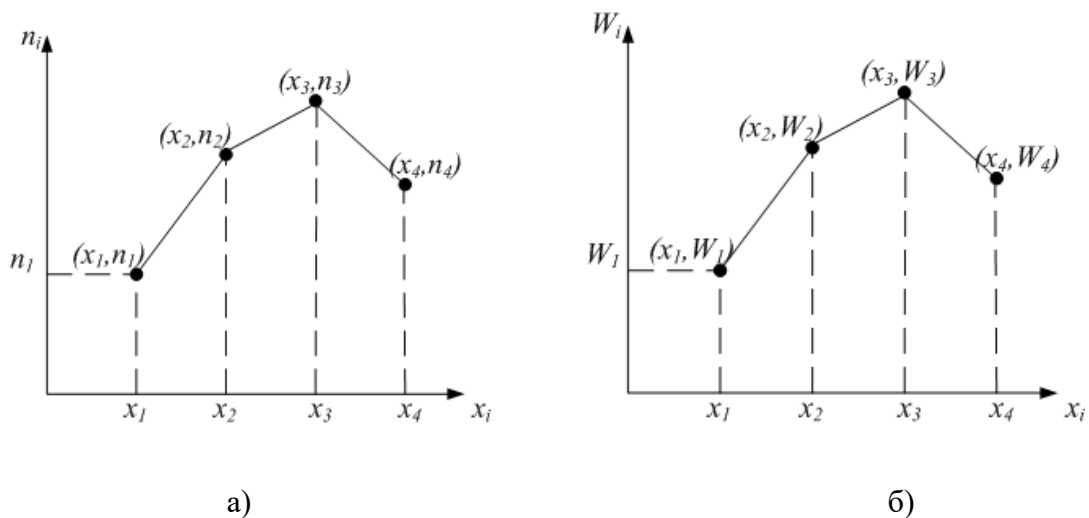


Рис. 14.1. Полігон частот (а) та полігон відносних частот (б)

У тих випадках, коли кількість експериментальних даних велика, всю сукупність значень розділяють на інтервали і визначають *частоти* попадання випадкової величини в інтервал. Число інтервалів не повинне бути занадто великим чи занадто малим.

Групування в інтервали доцільно проводити при об'ємі вибірки більше 30; при $n > 100$ рекомендоване число інтервалів складає від 10 до 20, при $n < 100$ – від 6 до 8. Довжини інтервалів можуть бути як однаковими, так і різними. Для зручності обчислень довжини інтервалів варто брати однаковими. У такому випадку величину кроку розбиття h знаходять за формулою [1, 25]:

$$h \approx \frac{x_{\max} - x_{\min}}{1 + 3,2 \cdot \lg(n)}. \quad (14.1)$$

Нижню межу x інтервального ряду обирають так, щоб варіанти вибірки групувалися поблизу середніх значень інтервалів розбиття. Якщо у вибірці зустрічаються m значень, що дорівнюють x_i ($i = \overline{2, k}$), то у випадку парного m половину значень відносять до інтервалу I_{i-1} , а половину до I_i . Якщо m непарне, то $\frac{m-1}{2}$ значень відносять до I_{i-1} , а $\frac{m+1}{2}$ – до I_i .

Якщо дослідні дані розподілені нерівномірно, то в області найбільшої щільності розподілу можна брати інтервали більш вузькі, ніж в області малої щільності.

Статистичний розподіл, який задано у вигляді послідовності інтервалів і відповідних їм частот (відносних частот), називають *інтервальним статистичним розподілом частот (відносних частот)* [1, 17-19, 25]. В якості частоти, відповідної даному інтервалу, приймають суму частот тих варіант, що потрапили в цей інтервал.

Інтервальний статистичний розподіл частот (відносних частот) також представляють у вигляді таблиць:

Таблиця 14.4. Інтервальний статистичний розподіл частот

I_i	$x_1 - x_2$	$x_2 - x_3$	...	$x_k - x_{k+1}$
m_i	m_1	m_2	...	m_k

Таблиця 14.5. Інтервальный статистичний розподіл відносних частот

I_i	$x_1 - x_2$	$x_2 - x_3$	...	$x_k - x_{k+1}$
W_i	W_1	W_2	...	W_k

де m_i – частоти; W_i – відносні частоти; k – кількість інтервалів.

Графічним зображенням інтервального статистичного розподілу є гістограми. *Гістограмою частот* називають фігуру, що складається з прямокутників, основами яких є інтервали довжиною h , а висоти дорівнюють відношенню $\frac{m_i}{h}$ (щільності частоти); m_i – сума частот варіант, що потрапили в i -й інтервал [1, 17-19, 24, 25].

Площа гістограми частот дорівнює об'єму вибірки

$$S = \sum \frac{m_i}{h} h = \sum m_i = n.$$

Якщо по осі ординат відкласти $\frac{W_i}{h}$ (щільність відносної частоти), то отримаємо *гістограму відносних частот* [1, 17-19, 24, 25]. Площа гістограми відносних частот дорівнює сумі всіх відносних частот, тобто 1.

Приклад 14.1. Внаслідок 10 експериментальних визначень молярної теплоємності газової суміші C_p , кДж/(кг К) отримано значення в інтервалах $C_p = 10-20$, $20-30$, та $30-40$ кДж/(кг К). Побудувати гістограму частот і відносних частот та визначити їх площу для заданого інтервального статистичного розподілу:

I_i	10-20	20-30	30-40
m_i	2	5	3

Розв'язок: величина кроку для даного інтервального статистичного розподілу $h=10$; $n = \sum m_i = 10$.

Розрахунки, необхідні для побудови гістограми частот і відносних частот представимо у таблиці:

I_i	10-20	20-30	30-40
m_i	2	5	3
$\frac{m_i}{h}$	0,2	0,5	0,3
$W_i = \frac{n_i}{n}$	0,2	0,5	0,3
$\frac{W_i}{h}$	0,02	0,05	0,03

де m_i – частоти; W_i - відносні частоти.

Побудуємо гістограма частот та відносних частот (рис. 14.2):

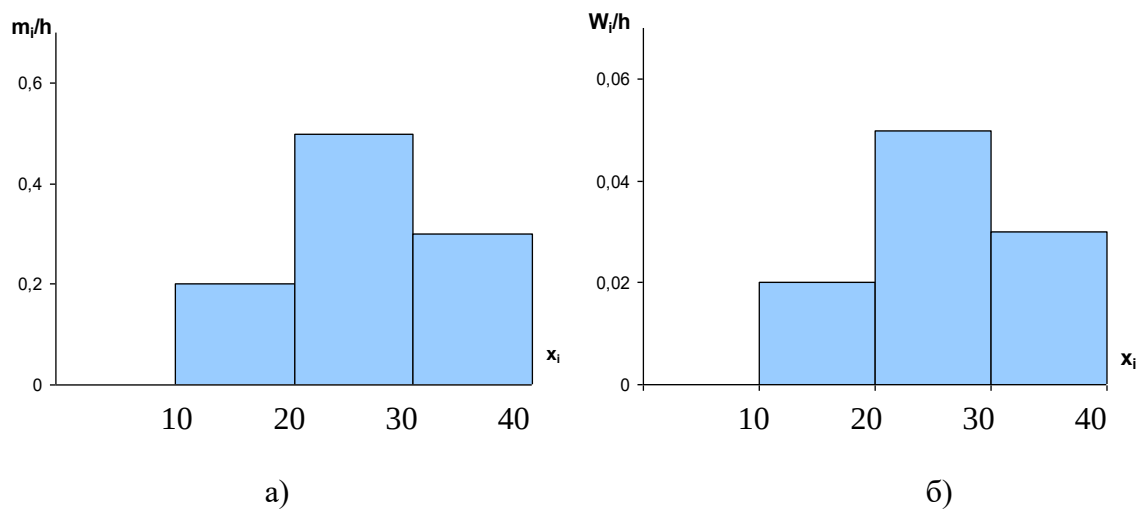


Рис. 14.2. Гістограма частот (а) та гістограма відносних частот (б)

Площа гістограми частот дорівнює об'єму вибірки: $n=10$, площа гістограми відносних частот дорівнює сумі відносних частот: $\sum W_i = 1$.

14.3 ЧИСЛОВІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТАТИСТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ

Нехай для вибірки об'ємом n побудовано статистичний розподіл частот:

x_i	x_1	x_2	...	x_k
n_i	n_1	n_2	...	n_k

Вибірковою середньою $\bar{x}_B$ називають середню зважену значень випадкової величини з вагами, що дорівнюють відповідним частотам [1, 25]:

$$\bar{x}_B = \frac{x_1 \cdot n_1 + x_2 \cdot n_2 + \dots + x_k \cdot n_k}{n},$$

або

$$\bar{x}_B = \frac{\sum_{i=1}^k x_i \cdot n_i}{n},$$
(14.2)

де $n = n_1 + n_2 + \dots + n_k$.

Якщо кількість експериментальних даних досить велика і розділена на декілька груп, оперують поняттями групової та загальної середніх: *груповою середньою* називають середнє арифметичне значень випадкової величини, які належать групі; *загальною середньою* називають середнє арифметичне значень випадкової величини, які належать всій сукупності [1, 25].

Вибіркова дисперсія характеризує розсіювання значень x_i ($x_1, x_2, \dots, x_k$), отриманих у досліді, навколо вибіркової середньої $\bar{x}_B$. Вона дорівнює середній зваженій квадратів відхилень значень x_i від їх середнього значення $\bar{x}_B$ з вагами, що дорівнюють відповідним частотам [1, 17-19, 24, 25]:

$$D_B = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_B)^2}{n}.$$
(14.3)

Розмірність вибіркової дисперсії відповідає квадрату розмірності досліджуваної випадкової величини.

На практиці досить часто для обчислення D_B застосовують формулу:

$$D_B = \bar{x}_B^2 - (\bar{x}_B)^2,$$
(14.4)

де $\bar{x}_B$ – вибірка середня, $(\bar{x}_B)^2$ – квадрат вибіркової середньої, $\bar{x}_B^2$ – середнє квадратів значень x_i :

$$\bar{x}_B^2 = \frac{x_1^2 \cdot n_1 + x_2^2 \cdot n_2 + \dots + x_k^2 \cdot n_k}{n}.$$
(14.5)

Якщо сукупність експериментальних даних розділена на групи за тою чи іншою ознакою (стратифікована), оцінити розсіювання можна за допомогою *групової, внутрішньогрупової, міжгрупової та загальної дисперсій* [1, 17-19,

24, 25].

Груповою дисперсією $D_{j\text{гр}}$ називають дисперсію значень x_i ($x_1, x_2, \dots, x_k$) відносно групової середньої $\bar{x}_j$:

$$D_{j\text{гр}} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_j)^2}{N_j}, \quad (14.6)$$

де j – номер групи, N_j – об'єм групи j .

Внутрішньогруповою дисперсією $D_{\text{вн\_гр}}$ називають середню арифметичну групових дисперсій, зважених за об'ємами груп:

$$D_{\text{вн\_гр}} = \frac{\sum N_j D_{j\text{гр}}}{n}, \quad (14.7)$$

де n – об'єм всієї сукупності.

Міжгруповою дисперсією $D_{\text{міжгр}}$ називають дисперсію групових середніх відносно загальної середньої $\bar{x}$:

$$D_{\text{міжгр}} = \frac{\sum N_j \cdot (\bar{x}_j - \bar{x})^2}{n}, \quad (14.8)$$

Загальною дисперсією називають дисперсію значень x_i ($x_1, x_2, \dots, x_k$) відносно загальної середньої $\bar{x}$:

$$D_{\text{заг}} = D_B = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x})^2}{n}. \quad (14.9)$$

Вибіркове стандартне відхилення – квадратний корінь з вибіркової дисперсії:

$$\sigma_B = \sqrt{D_B}. \quad (14.10)$$

Вибіркове стандартне відхилення є також характеристикою розсіювання, але ця величина має розмірність випадкової величини.

Приклад 14.2. Система водоочищення складається з 10 однотипних паралельно працюючих мембранних установок. Внаслідок аварійного порушення режиму виявлено пошкодження в кожній з установок певної кількості мембранних елементів: в 5 установках пошкоджено 1 мембранний елемент, в трьох з установок пошкоджено чотири мембранні елементи, у двох установках пошкоджено вісім мембранних елементів. Результати дослідження наведені в таблиці:

x_i	1	4	8
n_i	5	3	2

Для заданої вибірки обчислити вибірккову середню, вибірккову дисперсію та стандартне відхилення.

Розв'язок: Об'єм вибірки $n = n_1 + n_2 + n_3 = 5 + 3 + 2 = 10$.

Обчислимо вибірккову середню за формулою (14.2):

$$\bar{x}_B = \frac{x_1 \cdot n_1 + x_2 \cdot n_2 + x_3 \cdot n_3}{n} = \frac{1 \cdot 5 + 4 \cdot 3 + 8 \cdot 2}{10} = 3,3.$$

Дисперсію розрахуємо за формулою (14.4), для чого обчислимо $\bar{x}_B^2$ – середнє квадратів значень x_i :

$$\begin{aligned} \bar{x}_B^2 &= \frac{x_1^2 \cdot n_1 + x_2^2 \cdot n_2 + x_3^2 \cdot n_3}{n} = \frac{1^2 \cdot 5 + 4^2 \cdot 3 + 8^2 \cdot 2}{10} = \\ &= \frac{5 + 48 + 128}{10} = 18,1. \end{aligned}$$

Тоді

$$D_B = 18,1 - (3,3)^2 = 7,21.$$

Обчислимо стандартне відхилення σ_B за формулою (14.10):

$$\sigma_B = \sqrt{7,21} = 2,69.$$

Приклад 14.3. На заводі з опріснення морської води працюють паралельно 12 мембранних установок різної продуктивності x_i , розподілені по двох цехах (5 установок у першому цеху й 7 установок в другому цеху). Внаслідок аварійного порушення режиму виявлено пошкодження в кожній з установок певної кількості мембранних елементів. Знайти групові та загальну середні, а також внутрішньогрупову, міжгрупову та загальну дисперсії сукупності, яка складається з двох груп:

	група 1		група 2	
x_i	10	20	10	30
n_i	2	3	4	3

Розв'язок: розрахуємо об'єм груп:

$$N_1 = 2 + 3 = 5,$$

$$N_2 = 4 + 3 = 7.$$

Знайдемо групові середні:

$$\bar{x}_1 = \frac{10 \cdot 2 + 20 \cdot 3}{5} = 16; \quad \bar{x}_2 = \frac{10 \cdot 4 + 30 \cdot 3}{7} \approx 18,57.$$

Загальна середня:

$$\bar{x} = \frac{10 \cdot 2 + 20 \cdot 3 + 10 \cdot 4 + 30 \cdot 3}{12} = 17,5.$$

Загальну середню можна також знайти як середнє арифметичне групових середніх, зважених за об'ємами груп:

$$\bar{x} = \frac{16 \cdot 5 + 18,57 \cdot 7}{5 + 7} \approx 17,5.$$

Розрахуємо групові дисперсії за формулою (14.6):

$$D_{1\text{гр}} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_1)^2}{N_1} = \frac{2 \cdot (10 - 16)^2 + 3 \cdot (20 - 16)^2}{5} = 7,7.$$

$$D_{2\text{гр}} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_2)^2}{N_2} = \frac{4 \cdot (10 - 18,57)^2 + 3 \cdot (30 - 18,57)^2}{7} = 36,92.$$

Внутрішньогрупова дисперсія:

$$D_{\text{вн.гр}} = \frac{\sum N_j D_{j\text{гр}}}{n} = \frac{N_1 D_{1\text{гр}} + N_2 D_{2\text{гр}}}{n} = \frac{5 \cdot 7,5 + 7 \cdot 36,92}{12} \approx 24,66.$$

Міжгрупова дисперсія:

$$\begin{aligned} D_{\text{міжгр}} &= \frac{\sum N_j \cdot (\bar{x}_j - \bar{x})^2}{n} = \frac{N_1 \cdot (\bar{x}_1 - \bar{x})^2 + N_2 \cdot (\bar{x}_2 - \bar{x})^2}{n} \\ &= \frac{5 \cdot (16 - 17,5)^2 + 7 \cdot (18,75 - 17,5)^2}{12} \approx 1,61. \end{aligned}$$

Загальна дисперсія:

$$\begin{aligned} D_B &= \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x})^2}{n} = \\ &= \frac{n_1 \cdot (x_1 - \bar{x})^2 + n_2 \cdot (x_2 - \bar{x})^2 + n_3 \cdot (x_3 - \bar{x})^2 + n_4 \cdot (x_4 - \bar{x})^2}{n} = \\ &= \frac{2 \cdot (10 - 17,5)^2 + 3 \cdot (20 - 17,5)^2 + 4 \cdot (10 - 17,5)^2 + 3 \cdot (30 - 17,5)^2}{12} \approx \\ &\approx 68,75. \end{aligned}$$

До основних числових характеристик статистичного ряду відносять також моду, медіану, вибірковий коефіцієнт варіації, розмах варіювання, середнє абсолютне відхилення [1, 17-19, 24, 25].

Вибірковою модою M_o називають варіанту, яка має найбільшу частоту. Вибірковою медіаною m_e називають варіанту, яка ділить варіаційний ряд на дві частини, рівні за числом варіант. Якщо кількість варіант парна, то

$$m_e = \frac{x_m + x_{m+1}}{2},$$

де (x_m, x_{m+1}) – інтервал, для якого $F^*(x_m) < 0,5$ та $F^*(x_{m+1}) \geq 0,5$; $F^*(x)$ – емпірична функція розподілу.

Вибірковий коефіцієнт варіації V :

$$V = \frac{\sigma_B}{\bar{x}_B} \cdot 100 \%. \quad (14.11)$$

Розмах варіювання R – різниця між максимальним та мінімальним значенням варіант:

$$R = x_{\max} - x_{\min}. \quad (14.12)$$

Середнє абсолютне відхилення Θ :

$$\Theta = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot |x_i - \bar{x}_B|}{n}. \quad (14.13)$$

Приклад 14.4. Для заданої вибірки обчислити моду, медіану, вибірковий коефіцієнт варіації, розмах варіювання, середнє абсолютне відхилення:

x_i	1	4	8
n_i	5	3	2

Розв'язок: найбільшу частоту ($n_1=5$) має варіанта $x_1=1$; отже, $M_o=1$.

Варіанта, яка ділить варіаційний ряд на дві частини, рівні за числом варіант – $x_2 = 4$, тому $m_e=4$.

Вибірковий коефіцієнт варіації V розрахуємо за формулою (14.11)¹:

$$V = \frac{2,69}{3,3} \cdot 100 \% = 81,52 \%.$$

Розмах варіювання: $R = 8 - 1 = 7$.

Середнє абсолютне відхилення:

$$\begin{aligned} \Theta &= \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot |x_i - \bar{x}_B|}{n} = \frac{n_1 \cdot |x_1 - \bar{x}_B| + n_2 \cdot |x_2 - \bar{x}_B| + n_3 \cdot |x_3 - \bar{x}_B|}{n} = \\ &= \frac{5 \cdot |1 - 3,3| + 3 \cdot |4 - 3,3| + 2 \cdot |8 - 3,3|}{10} = 2,3. \end{aligned}$$

¹ Вибіркова середня та стандартне відхилення розраховані вище (приклад 14.2): $\bar{x}_B=3,3$; $\sigma_B=2,69$.

14.4 СТАТИСТИЧНІ ОЦІНКИ ПАРАМЕТРІВ РОЗПОДІЛУ

Статистичною оцінкою θ^* невідомого параметру θ теоретичного розподілу називають функцію від випадкової величини, що спостерігається [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46].

Незміщеною називають статистичну оцінку θ^* , математичне сподівання якої дорівнює параметру θ , що оцінюється, при будь-якому об'ємі вибірки:

$$M(\theta^*) = \theta.$$

Зміщеною називають оцінку, математичне сподівання якої не дорівнює параметру θ , що оцінюється [1, 2, 20, 24, 25].

Ефективною називають статистичну оцінку, яка при заданому об'ємі вибірки n має найменшу можливу дисперсію.

Конзистентною називають статистичну оцінку, яка при $n \rightarrow \infty$ наближається до оцінюваного параметра з імовірністю, близькою до 1. Вимогу конзистентності висувають до вибірок великих об'ємів [1, 2, 20].

На практиці користуються як *точковими*, так й *інтервальними* оцінками параметрів розподілу [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]. *Точкова оцінка* передбачає використання вибірових даних для обчислення єдиного значення, яке є «найкращою оцінкою» невідомого параметру генеральної сукупності.

Точковою незміщеною статистичною оцінкою генеральної середньої x_{Γ} є вибіркова середня $\bar{x}_B$ [1, 17-19, 24, 25].

Виправлена вибіркова дисперсія s^2 є точковою статистичною оцінкою дисперсії генеральної сукупності D_{Γ} , *виправлене стандартне відхилення* s є точковою оцінкою стандартного відхилення генеральної сукупності σ_{Γ} :

$$s^2 = \frac{n}{n-1} \cdot D_B; \quad (14.14)$$

$$s = \sqrt{\frac{n}{n-1} \cdot D_B}. \quad (14.15)$$

Приклад 14.5. Для вибірки, розглянутої у прикладі 14.2, обчислити виправлену вибірку дисперсію та виправлене стандартне відхилення.

Розв'язок: виправлена вибірку дисперсія s^2 :

$$s^2 = \frac{n}{n-1} \cdot D_B = \frac{10}{10-1} \cdot 7,21 = 8,01.$$

Виправлене стандартне відхилення s :

$$s = \sqrt{\frac{n}{n-1} D_B} = \sqrt{\frac{10}{10-1} \cdot 7,21} = 2,83.$$

Зауваження. Якщо об'єм вибірки невеликий ($n < 30$), то для оцінювання генеральної дисперсії рекомендовано використовувати виправлену вибірку дисперсію, в інших випадках значення виправленої вибіркової дисперсії та вибіркової дисперсії відрізняються несуттєво.

Якщо об'єм вибірки невеликий, точкова оцінка може і призводити до грубих помилок, тому при малих n користуються інтервальними оцінками. На відміну від точкових оцінок, які надають лише одне значення, *інтервальні оцінки* являють собою інтервали ймовірних значень оцінюваного параметра. Прикладами інтервальних оцінок є довірчі інтервали, достовірні інтервали, інтервали імовірності тощо.

Надійністю або довірчою імовірністю оцінки θ за θ^* називають імовірність γ , для якої виконується нерівність:

$$|\theta - \theta^*| < \delta. \quad (14.16)$$

Зазвичай надійність оцінки задають наперед; найчастіше беруть число, близьке до одиниці: 0,95; 0,99 або 0,999.

Розглянемо застосування надійності. Нехай імовірність того, що $|\theta - \theta^*| < \delta$ дорівнює γ :

$$P(|\theta - \theta^*| < \delta) = \gamma.$$

Замінивши нерівність (14.16) рівносильною їй подвійною нерівністю

$$\theta^* - \delta < \theta < \theta^* + \delta,$$

отримаємо

$$P(\theta^* - \delta < \theta < \theta^* + \delta) = \gamma. \quad (14.17)$$

Співвідношення (14.17) інтерпретують так: імовірність того, що інтервал $(\theta^* - \delta, \theta^* + \delta)$ містить невідомий параметр θ , дорівнює γ .

Довірчим називають інтервал $(\theta^* - \delta, \theta^* + \delta)$, який покриває невідомий параметр із заданою надійністю γ [1, 25].

Розглянемо застосування довірчих інтервалів для оцінювання математичного сподівання та стандартного відхилення нормального розподілення.

Нехай потрібно оцінити невідоме математичне сподівання a за вибірковою середньою $\bar{x}_B$ для нормального розподілення (стандартне відхилення σ_B відомо). Довірчий інтервал, який покриває параметр a з надійністю γ :

$$P\left(\bar{x}_B - t \frac{\sigma_B}{\sqrt{n}} < a < \bar{x}_B + t \frac{\sigma_B}{\sqrt{n}}\right) = 2\Phi(t) = \gamma, \quad (14.18)$$

де $\left(\bar{x}_B - t \frac{\sigma_B}{\sqrt{n}}, \bar{x}_B + t \frac{\sigma_B}{\sqrt{n}}\right)$ – шуканий інтервал, $\delta = t \frac{\sigma_B}{\sqrt{n}}$ – точність оцінки, t – аргумент функції Лапласа, якому відповідає значення, що дорівнює $\frac{\gamma}{2}$.

Якщо стандартне відхилення σ_B невідомо, то застосовують формулу:

$$P\left(\bar{x}_B - t_\gamma \frac{s}{\sqrt{n}} < a < \bar{x}_B + t_\gamma \frac{s}{\sqrt{n}}\right) = \gamma, \quad (14.19)$$

де t_γ знаходять, користуючись розподілом Стюдента¹.

¹ Значення t_γ можна також знайти, користуючись функцією Лапласа, однак довірчий інтервал у такому випадку буде вужчим, що може призвести до грубих помилок. Тому формулу (14.19) доцільно застосовувати до малих вибірок ($n < 30$).

Оцінити невідоме стандартне відхилення σ_B нормального розподілення можна за формулою:

$$s(1 - q) < \sigma_B < s(1 + q), \quad (14.20)$$

де q знаходять за відповідними таблицями або за допомогою електронних таблиць MS Excel [6-8, 14, 15] чи однією з систем комп'ютерної алгебри, наприклад, [31, 38, 40-43, 47].

Приклад 14.6. За результатами вимірювань випадкової величини X , які наведені в таблиці:

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
0,31	0,33	0,32	0,34	0,30	0,29	0,28	0,32	0,34

оцінити з надійністю $\gamma=0,95$ за допомогою довірчого інтервалу математичне сподівання і стандартне відхилення випадкової величини X , вважаючи, що вона розподілена за нормальним законом.

Розв'язок: знаходимо вибірку середню за вихідними даними:

$$\bar{x}_B = \frac{1}{9} \sum_{i=1}^9 x_i = \frac{2,83}{9} \approx 0,31.$$

Знаходимо виправлене стандартне відхилення s :

$$\begin{aligned}
 S &= \sqrt{\frac{\sum n_i (x_i - \bar{x}_B)^2}{n - 1}} = \sqrt{\frac{(0,31 - 0,31)^2 + (0,33 - 0,31)^2 + 2(0,32 - 0,31)^2 +}{9 - 1}} \\
 &\quad \frac{+ 2(0,34 - 0,31)^2 + (0,30 - 0,31)^2 + (0,29 - 0,31)^2 + (0,28 - 0,31)^2}{9 - 1}} \\
 &= \sqrt{\frac{0,0038}{8}} \approx 0,022.
 \end{aligned}$$

За довідковими таблицями за заданими значеннями $n=9$ і $\gamma=0,95$ знаходимо $t_\gamma = 2,31$.

Знайдемо довірчі межі:

$$\bar{x}_B - t_\gamma \frac{S}{\sqrt{n}} = 0,31 - 2,31 \frac{0,022}{\sqrt{9}} = 0,31 - 0,017 \approx 0,293.$$

$$\bar{x}_B + t_\gamma \frac{S}{\sqrt{n}} = 0,31 + 2,31 \frac{0,022}{3} = 0,327.$$

Отже, з надійністю $\gamma=0,95$ математичне сподівання a міститься в довірчому інтервалі $0,293 < a < 0,327$.

За заданими $n=9$ і $\gamma=0,95$ знаходимо $q = 0,71$ за відповідними таблицями.

Шуканий довірчий інтервал для стандартного відхилення такий:

$$\begin{aligned} S(1 - q) &< \sigma_B < S(1 + q), \\ 0,022(1 - 0,71) &< \sigma_B < 0,022(1 + 0,71), \\ 0,006 &< \sigma_B < 0,038. \end{aligned}$$

Отже, з надійністю $\gamma=0,95$ стандартне відхилення міститься в довірчому інтервалі $0,006 < \sigma < 0,038$.

14.5 ЗАСТОСУВАННЯ СТАТИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ ДО ІНТЕРПРЕТАЦІЇ ДАНИХ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Одним із способів обробки статистичних даних є побудова емпіричної функції розподілу випадкової величини [1, 18, 19, 24, 25].

Емпіричною функцією розподілу (функцією розподілу вибірки) називають функцію $F^*(x)$, яка визначає для кожного значення x відносну частоту події $X < x$ [1, 18, 19, 24, 25]. Отже,

$$F^*(x) = \frac{n_x}{n},$$

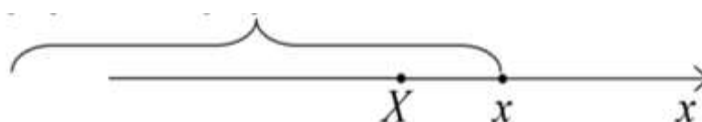
де n – об'єм вибірки; n_x – кількість варіант x_i , менших за x .

Емпірична функція розподілу має такі самі *властивості*, що й теоретична [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]:

1. Значення функції розподілу належать відріzkу $[0;1]$: $0 \leq F^*(x) \leq 1$.

2. $F^*(x)$ – неспадаюча функція, тобто при $x_2 > x_1$ $F^*(x_2) \geq F^*(x_1)$.
3. Якщо всі можливі значення випадкової величини X належать інтервалу (a, b) , то $F^*(x) = 0$ при $x \leq a$, $F^*(x) = 1$ при $x > b$.

Як було показано вище, функція $F^*(x)$ є ймовірністю того, що точка x_i в результаті випробування опиниться зліва від точки x :



Запишемо аналітично функцію $F^*(x)$:

$$F^*(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq x_i, \\ F_i^* & \text{при } x_i < x \leq x_{i+1}, \\ 1 & \text{при } x > x_k. \end{cases}$$

або

$$F^*(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq x_1, \\ w_1 & \text{при } x_1 < x \leq x_2, \\ w_1 + w_2 & \text{при } x_2 < x \leq x_3, \\ \dots & \\ w_1 + w_2 + \dots + w_{k-1} & \text{при } x_{k-1} < x \leq x_k, \\ 1 & \text{при } x > x_k. \end{cases}$$

де $F_i^* = \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{n} = \sum_{i=1}^k w_i$ – накопичені (кумулятивні) відносні частоти.

Графік емпіричної функції $F^*(x)$ зображений на рис. 14.3.

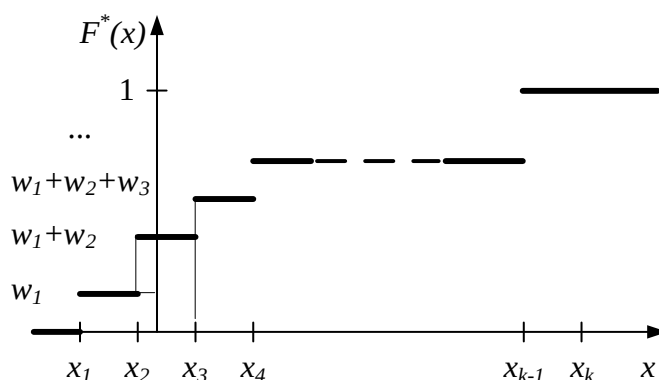


Рис. 14.3. Графік емпіричної функції

Приклад 14.7. Задано статистичний ряд:

x_i	3	5	6	9	12
n_i	2	4	5	10	3

Побудуйте емпіричну функцію розподілу (аналітично і графічно).

Розв'язання: результати обчислень зручно заносити в таблицю:

x_i	3	5	6	9	12	Σ
n_i	2	4	5	10	3	24
$w_i = \frac{n_i}{n}$	1/12	1/6	5/24	5/12	1/8	1
F_i^*	1/12	1/4	11/24	21/24	1	

Побудуємо емпіричну функцію $F^*(x)$:

Найменша варіанта $x_1 = 3$. Отже, при $x \leq 3$ $F^*(x) = 0$. Значення $x_1 = 3$ спостерігається 2 рази, тому при $3 < x \leq 5$ $F^*(x) = \frac{2}{24} = \frac{1}{12}$.

Аналогічно, якщо $5 < x \leq 6$, то $F^*(x) = \frac{2}{24} + \frac{4}{24} = \frac{6}{24} = \frac{1}{4}$;

якщо $6 < x \leq 9$, то $F^*(x) = \frac{2}{24} + \frac{4}{24} + \frac{5}{24} = \frac{11}{24}$;

якщо $9 < x \leq 12$, то $F^*(x) = \frac{2}{24} + \frac{4}{24} + \frac{5}{24} + \frac{10}{24} = \frac{21}{24}$;

якщо $x > 12$, то $F^*(x) = \frac{2}{24} + \frac{4}{24} + \frac{5}{24} + \frac{10}{24} + \frac{3}{24} = \frac{24}{24} = 1$.

Отже, шукана емпірична функція матиме вигляд:

$$F^*(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \leq 3 \\ 1/12 & \text{при } 3 < x \leq 5 \\ 1/4 & \text{при } 5 < x \leq 6 \\ 11/24 & \text{при } 6 < x \leq 9 \\ 21/24 & \text{при } 9 < x \leq 12 \\ 1 & \text{при } x > 12 \end{cases}$$

Графік $F^*(x)$ зображений на рис. 14.4.

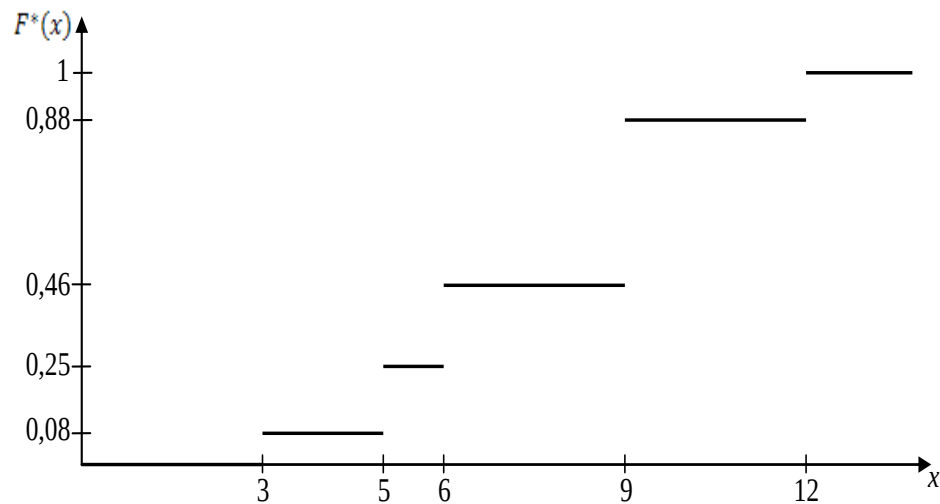


Рис. 14.4. Графік емпіричної функції для прикладу 14.4

Гістограми значно спрощують процес аналізу та інтерпретації зібраних даних. Наприклад, дозволяють визначити тип розподілу та проаналізувати, чи відповідає те чи інше значення встановленим межам.

Нижче показано п'ять типових випадків, коли метою аналізу є відповідність встановленим розмірам S деякого виробу [1, 18, 19, 24, 25].

Рис. 14.5, а-б ілюструє випадки, в яких розмір виробу S задовольняє допуску (S_L – нижня межа, S_U – верхня межа).

Рис. 14.5, в-д ілюструє випадки, в яких гістограма не задовольняє допуску.

Інші види типових гістограм подано у [Додатку Е](#).

У випадках, коли ставиться задача зрозуміти, хто з декількох працівників виробляє неякісну продукцію, то доцільно провести розшарування (стратифікацію), тобто вибирати такі дані, щоб можна було порівняти роботу кожного з працівників. Часто розшарування проводять, використовуючи мнемонічне *правило 4М*:

Man (Manpower) – персонал;

Machine – обладнання;

Material – матеріали та комплектуючі; **Method** – технології виробництва.

Останнім часом враховують також ще одну або дві складові (відповідно **5М** або **6М**) [1, 18, 19]:

Measurement – засоби вимірювання та методи контролю.

Media – виробниче та навколишнє середовище.

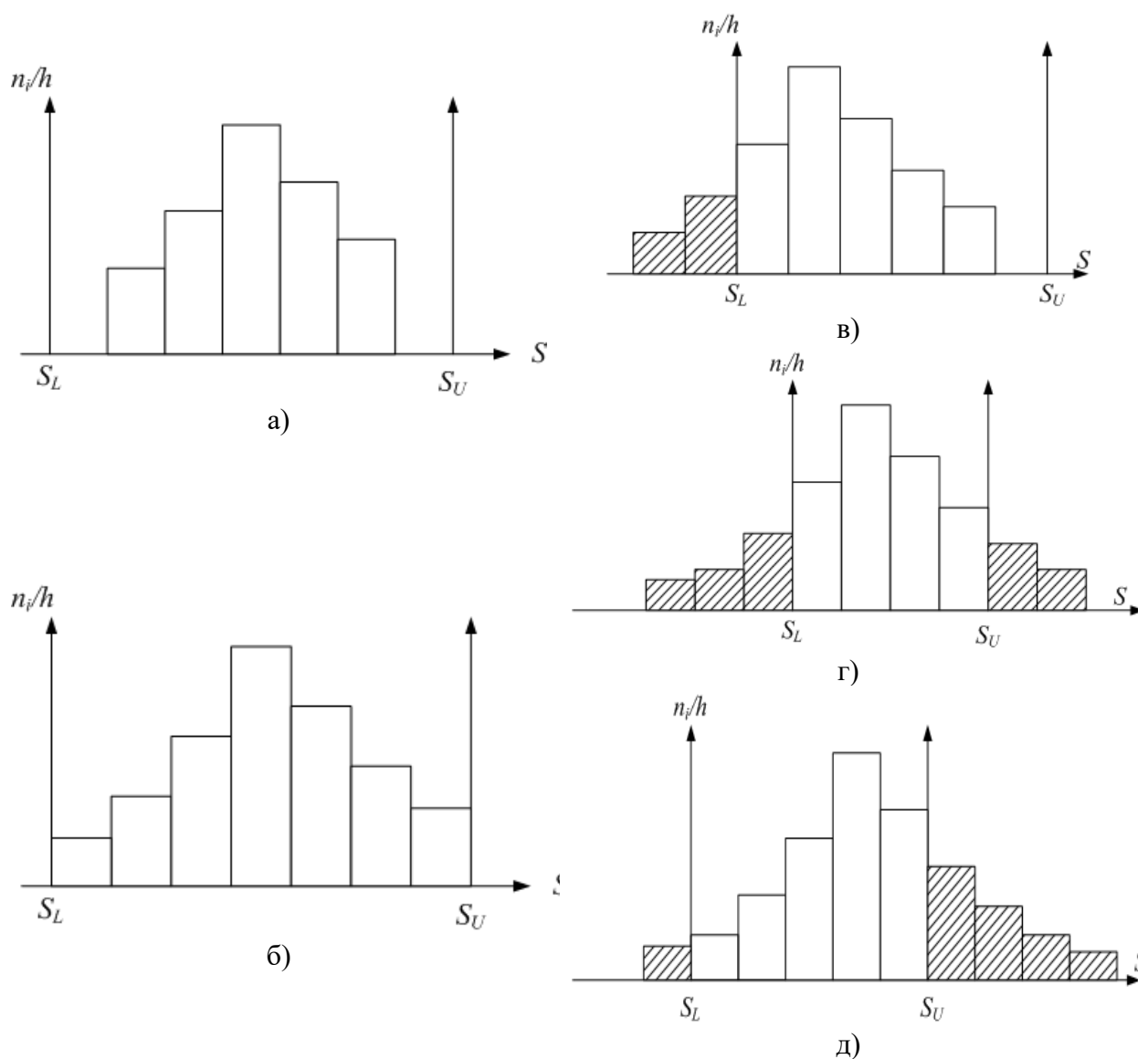


Рис. 14.5. Приклади гістограм: а, б – розмір виробу задовольняє встановленим межам; в, г, д – розмір виробу не задовольняє встановленим межам

Приклад 14.8. На підприємстві X потрібно виготовляти вироби заданого розміру 14,25 мм. За умовами технологічного регламенту допускається знаходження розміру виробу в межах 14 – 14,5 мм. Перевірка геометричних розмірів деталей показала, що значна кількість виробів не відповідає заданому розміру, але знаходиться у допустимих межах. Необхідно з'ясувати причину проблеми. З метою аналізу якості виробів зібрані дані згрупували за партією сировини ($P1$ та $P2$), видом обладнання (*нове* та *старе*) та працівниками (A та B).

Праців- ник	Облад- нання	Партія сировини	Розмір виробу, мм				
			14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5
А	Нове	P1	1	4	7	4	1
		P2	2	4	8	3	2
	Старе	P1	3	5	11	3	2
		P2	2	3	3	6	3
Б	Нове	P1	–	1	–	3	1
		P2	–	–	2	–	1
	Старе	P1	–	1	–	3	1
		P2	–	–	1	–	2

Розв'язок: обчислимо, скільки виробів зробив кожний з працівників у вказаних інтервалах. Результати представимо у таблиці:

Розмір виробу, мм Працівник	14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5
А	8	16	29	16	8
Б	0	2	3	6	5

Побудуємо гістограми за таблицею:

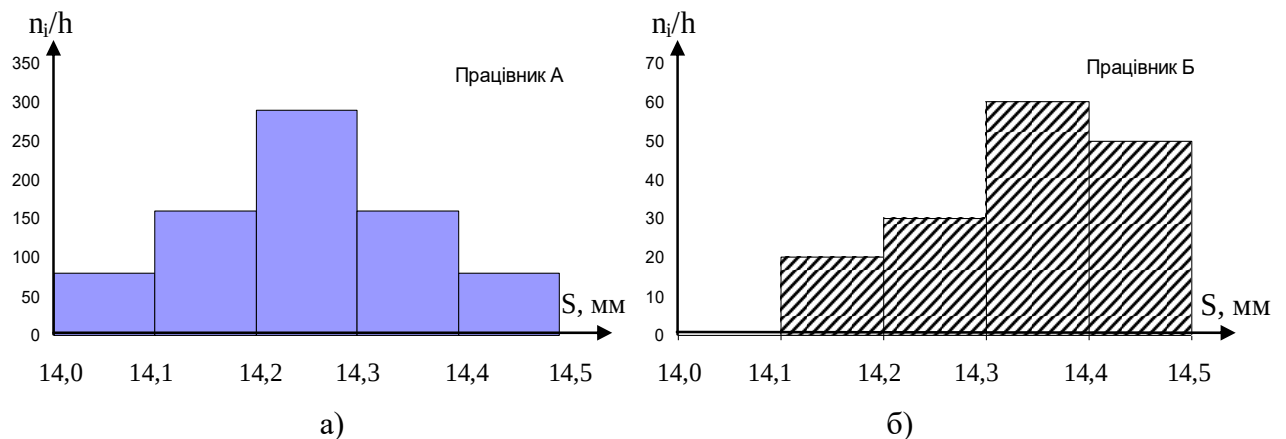


Рис. 14.6. Гістограми за результатами діяльності працівників А (а) та Б (б)

Складемо аналогічні таблиці за видом обладнання:

Розмір виробу, мм	14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5
Обладнання					
Нове	3	9	17	10	5
Старе	5	9	15	12	8

та за партією сировини:

Розмір виробу, мм \ Партія	14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5
P1	4	11	18	13	5
P2	4	7	14	9	8

Побудуємо гістограми за отриманими таблицями:

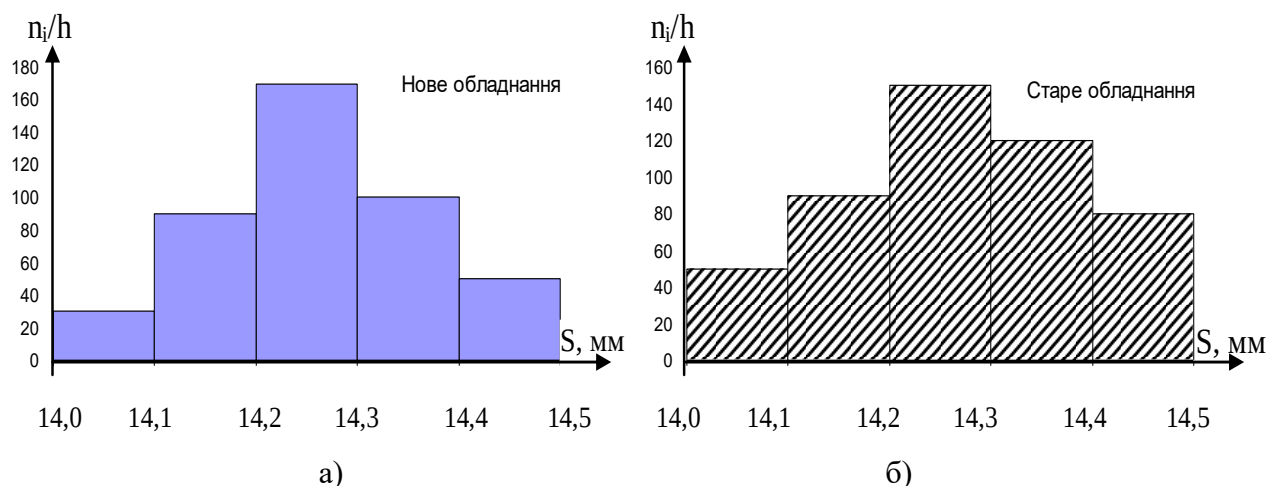


Рис. 14.7. Гістограми за результатами роботи працівників на різних видах обладнання:
а – на новому, б - на старому

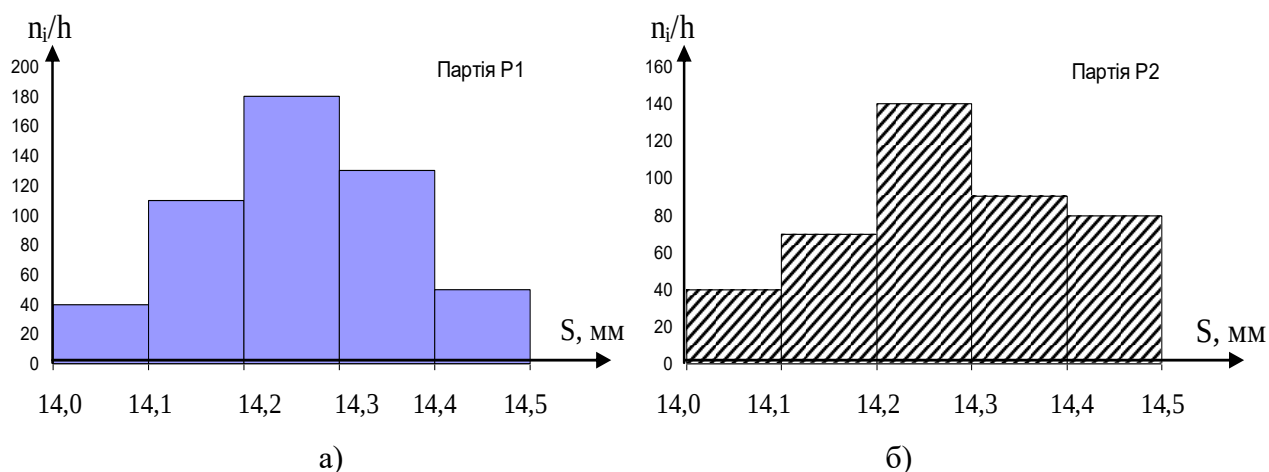


Рис. 14.8. Гістограми за партією сировини

Як видно, гістограма на рис. 14.6, б, відрізняється від звичайного типу гістограм (див. [Додаток Е](#)), що свідчить про те, що проблему створює працівник Б.

Приклад 14.9. У таблиці подані результати виміру геометричного розміру одного й того ж виробу:

Розмір виробу, мм	14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5	14,5-14,6	14,6-14,7	14,7-14,8	14,8-14,9	14,9-15,0	15,0-15,1
Кількість виробів, шт.	17	19	15	8	7	5	4	5	3	4	1

Розрахуйте вибіркове середнє $\bar{x}_B$, дисперсію D_B та стандартне відхилення σ_B . Порівняйте отриману гістограму із типовими формами, поданими у [Додатку Е](#) та з'ясуйте, до якого типу належить дане розподілення результатів.

Розв'язок: необхідні для обчислення розрахунки представимо у таблиці:

I_i	14,0-14,1	14,1-14,2	14,2-14,3	14,3-14,4	14,4-14,5	14,5-14,6	14,6-14,7	14,7-14,8	14,8-14,9	14,9-15,0	15,0-15,1
x_i	14,05	14,15	14,25	14,35	14,45	14,55	14,65	14,75	14,85	14,95	15,05
n_i	17	19	15	8	7	5	4	5	3	4	1
$x_i \cdot n_i$	238,85	268,85	213,75	114,8	101,15	72,75	58,6	73,75	44,55	59,8	15,05
$n_i \cdot (x_i - \bar{x}_B)^2$	1,427	0,684	0,121	0,001	0,085	0,221	0,385	0,841	0,781	1,490	0,504

де x_i – середини інтервалів. Об'єм вибірки: $n = 17 + 19 + \dots + 1 = 88$.

Вибіркове середнє:

$$\bar{x}_B = \frac{14,05 \cdot 17 + 14,15 \cdot 19 + \dots + 15,05 \cdot 1}{88} = 14,34.$$

Вибіркова дисперсія:

$$D_B = \frac{17 \cdot (14,05 - 14,34)^2 + 19 \cdot (14,15 - 14,34)^2}{88} + \frac{1 \cdot (15,05 - 14,34)^2}{88} = 0,074.$$

Стандартне відхилення:

$$\sigma_B = \sqrt{0,07} = 0,27.$$

Побудуємо гістограму:

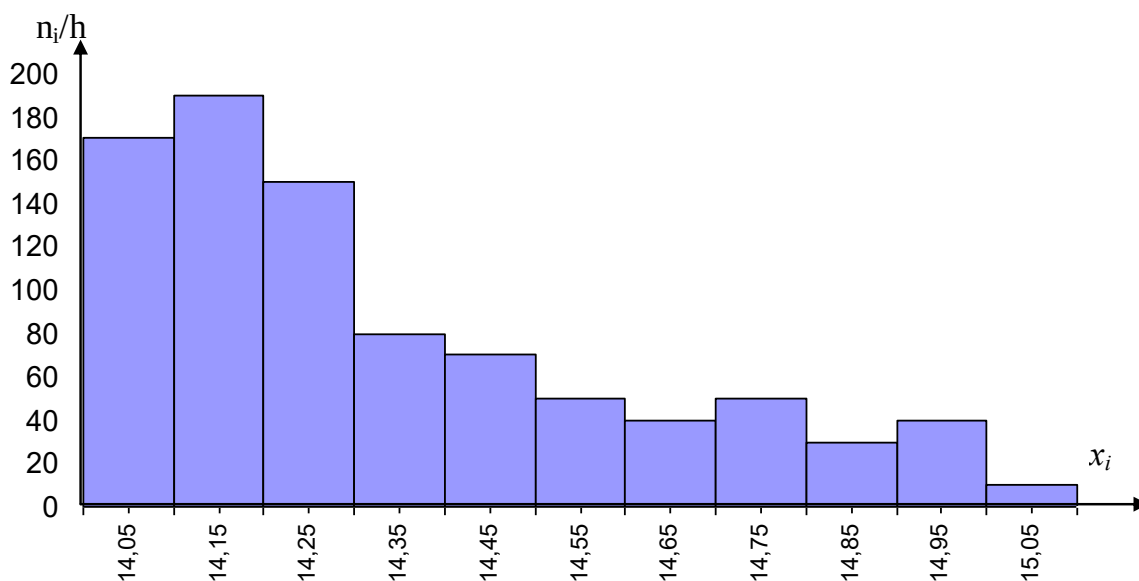


Рис. 14.9. Результати виміру геометричного розміру виробу

Відповідно до [Додатку Е](#), тип гістограми – з обривом зліва. Середнє арифметичне локалізується далеко зліва. Така форма часто зустрічається при 100 %-му контролі виробів внаслідок поганої відтворюваності процесу.

14.6 ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРІЇ КОРЕЛЯЦІЇ

Багато завдань хімічної технології мають на меті вивчити та оцінити залежність випадкової величини від однієї або декількох інших величин [1, 2, 18-20, 24, 25, 44, 46].

Досліджувані випадкові величини можуть бути незалежними, або пов'язані *функціональною* чи *статистичною* залежністю.

Дві випадкові величини називають *незалежними*, якщо закон розподілу однієї з них не залежить від того, які можливі значення прийняла інша величина. Якщо кожному можливому значенню випадкової величини X відповідає одне можливе значення випадкової величини Y , то Y називають функцією випадкового аргументу X :

$$Y = \varphi(X), \quad (14.21)$$

а залежність (14.21) – *функціональною*.

Статистичною називають залежність, за якої кожному значенню однієї

з величин відповідає ряд розподілу іншої, а зі зміною однієї величини закономірно змінюються статистичні характеристики рядів розподілення іншої величини: положення рядів розподілу, розсіювання, міра асиметрії тощо [1, 18, 19, 24, 25].

Статистичну залежність називають *кореляційною*, якщо у разі зміни однієї з величин змінюється середнє значення іншої [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]. Кореляційну залежність Y від X можна визначити як функціональну залежність умовної середньої $\bar{y}_x$ від x :

$$\bar{y}_x = f(x), \quad (14.22)$$

де $\bar{y}_x$ – умовне середнє.

Умовною середньою $\bar{y}_x$ називають середнє арифметичне значень Y , які відповідають значенню $X = x$ [1, 17-19, 25]. Наприклад, при $x_1=3$ величина прийняла значення $y_1=10$, $y_2=20$, $y_3=30$. Знайдемо середнє арифметичне цих значень:

$$\bar{y}_3 = \frac{10 + 20 + 30}{3} = 20.$$

Число $\bar{y}_3$ називають умовною середньою, а число 3 вказує, що розглядаються ті значення, які відповідають $x_1=3$.

Рівняння (14.22) називають *рівнянням регресії Y на X* , функцію $f(x)$ – *регресією Y на X* , а її графік – *лінією регресії Y на X* [1, 18, 19, 24, 25].

Аналогічно визначають умовну середню $\bar{x}_y$ і кореляційну залежність X від Y : умовною середньою $\bar{x}_y$ називають середнє арифметичне значень X , які відповідають $Y = y$. Кореляційною залежністю X від Y називають функціональну залежність умовної середньої $\bar{x}_y$ від y

$$\bar{x}_y = \psi(y). \quad (14.23)$$

Рівняння (14.23) називають *рівнянням регресії X на Y* , функцію $\psi(y)$ – *регресією X на Y* , а її графік – *лінією регресії X на Y* [1, 18, 19, 24, 25].

Кореляційна залежність є окремим випадком залежності статистичної.

Будь-яка кореляційна залежність є статистичною, але не кожна статистична залежність буде кореляційною.

Наявність (чи відсутність) зв'язку між випадковими величинами X та Y , а також силу (тісноту) зв'язку характеризують *коефіцієнтом кореляції*, що являє собою відношення кореляційного моменту до добутку стандартних відхилень цих величин [1, 17-19, 25]:

$$r_{xy} = \frac{K_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (14.24)$$

де K_{xy} – кореляційний момент.

Кореляційним моментом K_{xy} чи *коваріацією* $\text{cov}\{X, Y\}$, (cov_{xy}) випадкових величин X та Y називають математичне сподівання добутку центрованих величин [1, 17-19, 25]:

$$K_{xy} = M[\overset{\circ}{X}\overset{\circ}{Y}] = M[(X - m_x)(Y - m_y)]. \quad (14.25)$$

Для незалежних випадкових величин кореляційний момент, і, відповідно, коефіцієнт кореляції, дорівнює нулю. Такі випадкові величини називають *некорельованими*.

Корельованими називаються випадкові величини, кореляційний момент яких відмінний від нуля [1, 25].

Чим ближче абсолютна величина коефіцієнта кореляції $|r_{xy}|$ до одиниці, тим зв'язок сильніше; а чим ближче до нуля, тим зв'язок слабкіше. Коефіцієнт кореляції застосовують для оцінки тісноти тільки лінійного зв'язку між величинами X та Y , тобто у випадку, коли величини X і Y зв'язані точною лінійною функціональною залежністю:

$$Y = a + b \cdot X, \quad (14.26)$$

де $r_{xy} = b$, причому знак "+" чи "-" береться в залежності від того, $b > 0$ чи $b < 0$.

Якщо $r_{xy} > 0$, говорять про *додатню кореляцію* між X та Y , тобто у разі

зростання однієї з величин інша має тенденцію у середньому до зростання; якщо $r_{xy} < 0$ – про *від’ємну кореляцію*, тобто за зростання однієї з величин інша має тенденцію у середньому до спадання.

У практичних задачах при визначенні тісноти кореляційного зв’язку керуються такими міркуваннями:

Величина коефіцієнта кореляції	Характеристика сили зв’язку
до 0,3	практично відсутня
0,3-0,5	слабка
0,5-0,7	помітна
0,7-0,9	сильна
0,9-0,99	дуже сильна

Про наявність або відсутність кореляції між величинами X та Y можна судити в першому наближенні по вигляду *поля кореляції* – зображення у вигляді точок усіх отриманих з дослідів пар значень випадкових величин (рис. 14.10). Поле кореляції зручно будувати у вигляді *діаграм розсіювання* (точкових діаграм) – це тип графіка або математичної діаграми, що використовує декартові координати для відображення значень зазвичай двох змінних з набору даних.

На одній діаграмі можна розмістити одну¹ або декілька додаткових змінних, якщо точки інших змінних закодовані² (рис. 14.10, б).

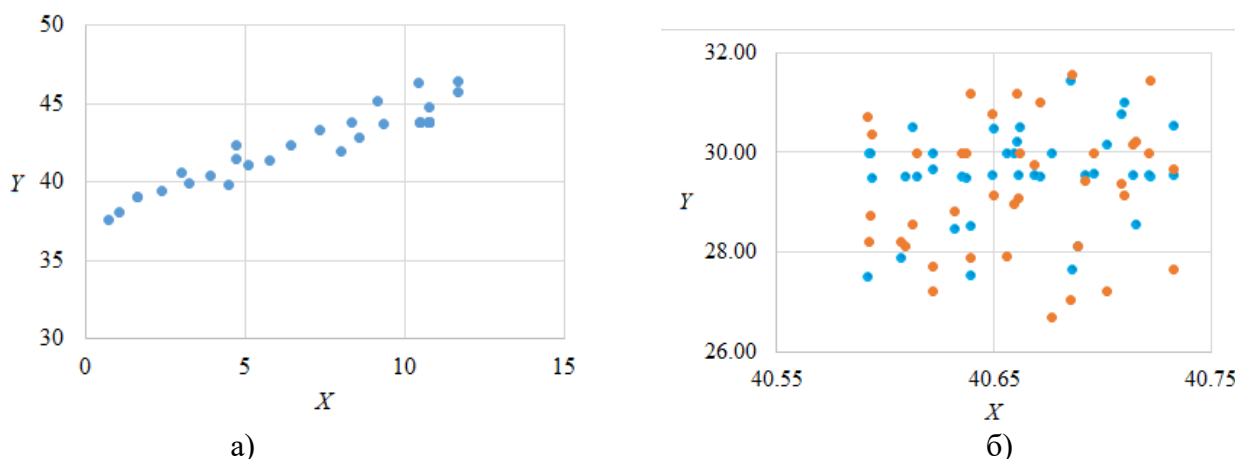


Рис. 14.10. Діаграми розсіювання: а – некодовані; б – кодовані

Досліджувані змінні можуть відноситися до [18, 19, 24, 25]:

¹ Рекомендується розміщувати не більше однієї додаткової змінної.

² тобто мають інший колір/форму/розмір

- характеристики якості і фактору, який впливає на характеристику; наприклад, швидкість фільтрування та степінь очищення води;
- двом різним характеристикам якості; наприклад, прозорість та каламутність води;
- двом факторам, що впливають на одну характеристику якості; наприклад, значення рН та температура.

Наприклад, характер розташування точок на рис. 14.11, а, б свідчить про наявність додатньої кореляції між величинами X та Y , причому на рис. 14.11, а – про сильну додатню лінійну кореляцію, близьку до лінійної функціональної залежності. На рис. 14.11, в показаний випадок слабкої від’ємної кореляції; на рис. 14.11, г - практично некорельовані випадкові величини.

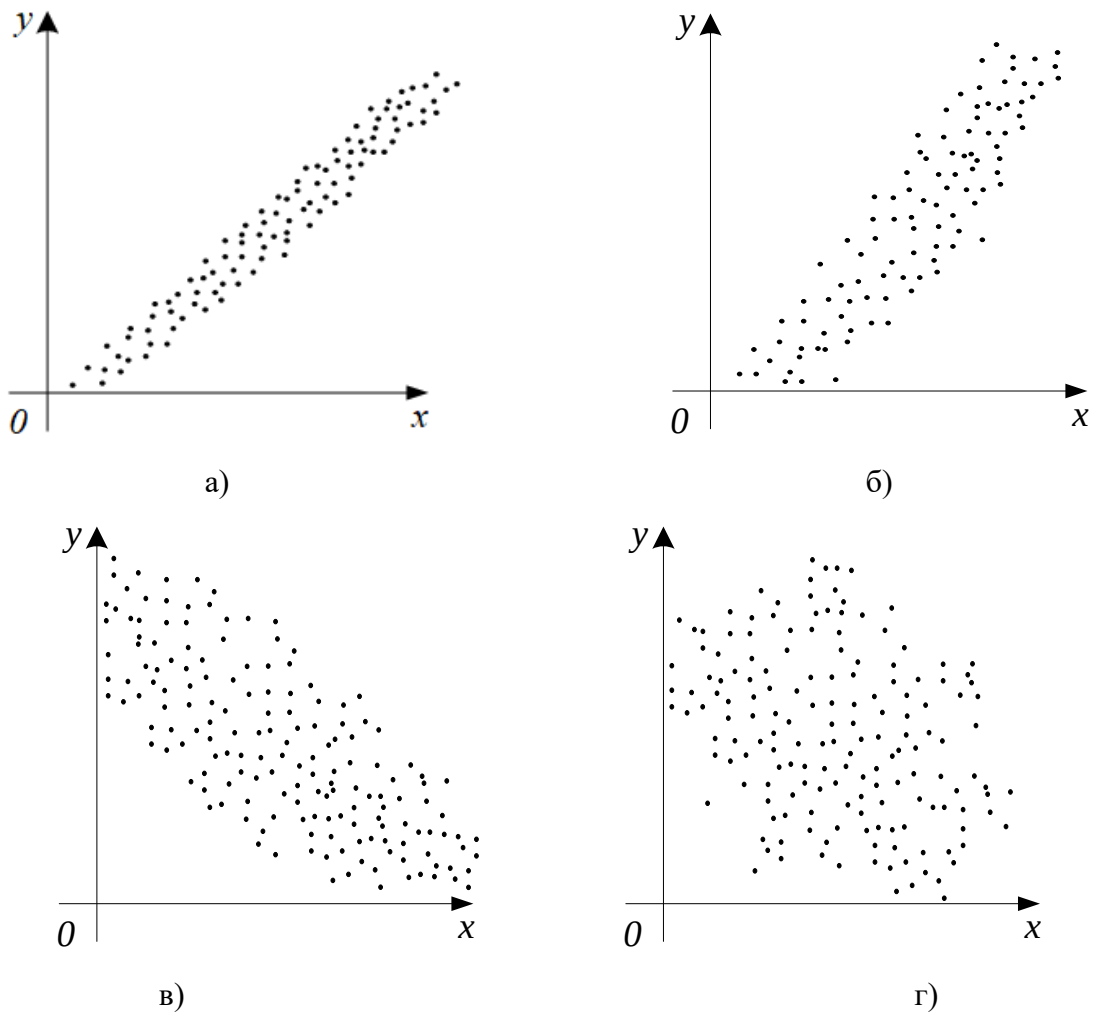


Рис. 14.11. Приклади поля кореляції

Якщо обидві функції регресії $f(x)$ та $\psi(y)$ лінійні, то кореляцію

називають *лінійною*¹, у інших випадках – *нелінійною* [1, 17-19, 25].

Метод, який дає можливість установити форму кореляційного зв'язку, тобто вигляд функції регресії (лінійна, квадратична тощо), приймати рішення щодо існування кореляції між двома змінними шляхом побудови діаграм розсіювання і розрахунку коефіцієнта кореляції, а також аналізувати силу зв'язку між величинами X та Y , має назву *кореляційний аналіз* [18, 19, 24, 25].

Відшукування зв'язку між Y на X у вигляді лінії регресії (14.26) називається *регресійним аналізом* [18, 19, 24, 25].

Звідси витікають *дві основні задачі кореляції* [1, 2, 20, 24, 25, 44, 46]:

1. Встановити форму кореляційного зв'язку, тобто вид функції регресії, наприклад, лінійна, показникова тощо.
2. Оцінити силу (тісноту) кореляційного зв'язку.

14.6.1 Лінійна кореляція

Нехай випадкові величини X та Y зв'язані лінійною кореляційною залежністю, тобто обидві лінії регресії прямі. Потрібно за даними спостережень знайти рівняння прямих ліній регресії Y на X та X на Y й оцінити силу лінійного кореляційного зв'язку.

Розглянемо найпростіший випадок, коли в результаті незалежних дослідів була отримана сукупність n пар чисел: $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_n, y_n)$, тобто кожна пара чисел спостерігалася лише один раз. Шукане рівняння прямої лінії регресії Y на X матиме вигляд:

$$Y = \rho_{yx} \cdot x + a, \quad (14.27)$$

де ρ_{yx} – вибіркового коефіцієнт регресії Y на X .

Рівняння (14.27) називають *вибірковим рівнянням прямої лінії регресії Y на X* [1, 2, 18-20, 24, 25, 44, 46]. Скористаємось *методом найменших квадратів (МНК)*, який розглянуто у розділі 7, для відшукування параметрів ρ_{yx} і a рівняння (14.27).

Відповідно до МНК, за міру відхилення дослідних значень y_i від значень

¹ При цьому обидві лінії регресії є прямими лініями.

випадкової величини Y_i ($i = 1, 2, \dots, n$) приймають величину

$$S = \sum_{i=1}^n (Y_i - y_i)^2,$$

яка називається *квадратичним відхиленням*.

Параметри ρ_{yx} і a мають бути такими, щоб величина S була найменшою:

$$S \rightarrow \min.$$

Використовуючи необхідні умови екстремуму функції декількох змінних, отримуємо *нормальну систему* для визначення параметрів ρ_{yx} і a :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial \rho_{yx}} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a} = 0 \end{cases}.$$

Запишемо:

$$\begin{aligned} 2 \sum_{i=1}^n (\rho_{yx} \cdot x_i + a - y_i) \cdot x_i &= 0, \\ 2 \sum_{i=1}^n (\rho_{yx} \cdot x_i + a - y_i) \cdot 1 &= 0. \end{aligned}$$

Візьмемо похідні за ρ_{yx} і a та після простих перетворень отримаємо систему нормальних рівнянь такого виду:

$$\begin{cases} \rho_{yx} \sum_{i=1}^n x_i^2 + a \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \\ \rho_{yx} \sum_{i=1}^n x_i + a \cdot n = \sum_{i=1}^n y_i \end{cases}. \quad (14.28)$$

Розв'язавши цю систему в загальному вигляді, знайдемо шукані

параметри:

$$\rho_{yx} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}, \quad (14.29)$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}. \quad (14.30)$$

Аналогічно можна знайти вибіркве рівняння прямої лінії регресії X на Y :

$$X = \rho_{yx} \cdot y + a, \quad (14.31)$$

де ρ_{yx} – вибірквий коефіцієнт регресії X на Y .

Для характеристики сили лінійного кореляційного зв'язку між величинами X і Y за дослідними даними знаходимо вибірквий коефіцієнт кореляції [19]:

$$r_b = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_x S_y}}, \quad (14.32)$$

де

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y}), \quad (14.33)$$

$$S_x = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (14.34)$$

$$S_y = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2. \quad (14.35)$$

Приклад 14.10. На одному з підприємств хімічної галузі проводили аналіз взаємозв'язку між рентабельністю виробництва (X , %) та преміями на 1 працівника (Y , тис. грн.). Результати досліджень наведені у таблиці:

Місяць	січень	лютий	березень	квітень	травень	червень	липень	серпень	вересень	жовтень	листопад	грудень
X	16	15	10	11	10	15	17	10	10	15,5	17	18
Y	2,5	2,4	1,8	1,9	1,7	2,1	2,7	1,6	1,75	2,2	2,8	2,9

Розрахуйте коефіцієнт кореляції та оцініть тісноту зв'язку між X та Y . Побудуйте діаграму розсіювання та розрахуйте коефіцієнти лінії регресії Y на X .

Розв'язок: розрахуємо середні значення X та Y а:

$$\bar{x} = \frac{16 + 15 + \dots + 18}{12} = 13,71;$$

$$\bar{y} = \frac{2,5 + 2,4 + \dots + 2,9}{12} = 2,20.$$

Далі розрахуємо S_{xx} , S_{yy} та S_{xy} :

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (16 - 13,71)^2 + (15 - 13,71)^2 + \dots + (18 - 13,71)^2 = 9,52;$$

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = (2,5 - 2,2)^2 + (2,4 - 2,2)^2 + \dots + (2,9 - 2,2)^2 = 0,19;$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y}) = (16 - 13,71) \cdot (2,5 - 2,2) + (15 - 13,71) \cdot (2,4 - 2,2) + \dots + (18 - 13,71) \cdot (2,9 - 2,2) = 1,29.$$

тоді коефіцієнт кореляції:

$$r_{xy} = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx} \cdot S_{yy}}} = \frac{1,29}{\sqrt{9,52 \cdot 0,19}} = 0,95.$$

Значення $r_{xy} > 0$, тобто зі зростанням премії рентабельність теж зростає;

також отримане значення досить близько до одиниці; отже, зв'язок між рентабельністю виробництва та преміями досить тісний.

Побудуємо діаграму розсіювання та розрахуємо коефіцієнти лінії регресії Y на X за формулами (14.29)-(14.30):

$$\rho_{yx} = \frac{12 \cdot 376,7 - 164,5 \cdot 26,35}{12 \cdot 2369,25 - (164,5)^2} = 0,1356;$$

$$a = \frac{2369,25 \cdot 26,35 - 164,5 \cdot 376,7}{12 \cdot 2369,25 - (164,5)^2} = 0,3375.$$

Тоді рівняння прямої лінії регресії матиме вигляд:

$$\bar{y} = 0,3375 + 0,1356 \cdot x.$$

Діаграма розсіювання показана на рис. 14.12.

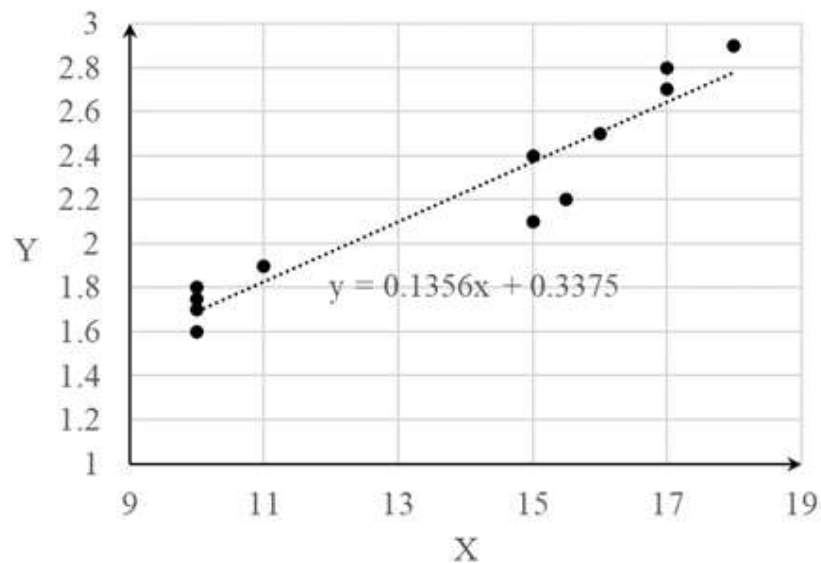


Рис. 14.12. Діаграма розсіювання та лінія регресії

У реальних задачах одне й те ж значення x може зустрітись n_x раз, а значення y – n_y разів; одна й та сама пара чисел (x, y) може спостерігатись n_{xy} разів. Тому дані спостережень групують, тобто підраховують частоти n_x , n_y , n_{xy} . Всі згруповані дані записують у вигляді таблиці, яку називають *кореляційною* [1, 17-19, 25]. Розглянемо складання такої таблиці на прикладі.

Приклад 14.11. У n ($n = 16$) незалежних дослідах були отримані такі дані, що виражають залежність густини водяних розчинів бромистоводневої кислоти HBr від її концентрації при $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ [1]:

Концентрація HBr , % (мас.)	15	15	15	15	16	16	16	16
Густина, г/см ³	1,11	1,12	1,11	1,11	1,12	1,12	1,13	1,12

Концентрація HBr , % (мас.)	17	17	17	17	18	18	18	18
Густина, г/см ³	1,13	1,12	1,13	1,13	1,14	1,13	1,13	1,14

Представити ці дані у вигляді кореляційної таблиці.

Розв'язок: Позначимо концентрацію HBr через x_i , густину – через y_i та згрупуємо дані:

Значення y_i (густина, г/см ³)	Значення x_i (концентрація HBr , % мас.)				
	15	16	17	18	n_y
1,11	3				3
1,12	1	3	1		5
1,13		1	3	2	6
1,14				2	2
n_x	4	4	4	4	$n = 16$

На перетині рядків і стовпців таблиці знаходяться частоти n_{xy} . Наприклад, частота 3, що знаходиться на перетині першого рядка і першого стовпця, вказує, що пара чисел (15; 1,11) спостерігалася три рази у 16 дослідах. Сума n_x , а також сума n_y збігаються і дорівнюють кількості дослідів, тобто 16. Сума частот n_{xy} також дорівнює 16.

Розглянемо відшукування параметрів вибіркового рівняння прямої лінії регресії та розрахунок вибіркового коефіцієнта кореляції за згрупованими даними.

Вище для визначення параметрів вибіркового рівняння прямої лінії регресії була отримана система рівнянь (14.28); при цьому передбачалося, що значення X та відповідні їм значення Y спостерігалися по одному разу. Для згрупованих даних скористаємося тотожностями:

$$\sum_{i=1}^n x_i = n\bar{x}, \quad \sum_{i=1}^n y_i = n\bar{y},$$

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 = n\bar{x}^2, \quad \sum_{i=1}^n x_i y_i = \sum_{i=1}^n n_{xy} x \cdot y.$$

(ці тотожності отримано з виразів $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$ та

$$\bar{x}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} \text{ відповідно}).$$

Далі підставимо праві частини тотожностей у (14.28):

$$\begin{cases} \rho_{yx} n \bar{x}^2 + a n \bar{x} = \sum_{i=1}^n n_{xy} x_i \cdot y_i, \\ \rho_{yx} n \bar{x} + a \cdot n = n \bar{y} \end{cases}$$

або

$$\begin{cases} \rho_{yx} n \bar{x}^2 + a n \bar{x} = \sum_{i=1}^n n_{xy} x_i \cdot y_i, \\ \rho_{yx} \bar{x} + a = \bar{y} \end{cases} \quad (14.36)$$

Знайдемо a з другого рівняння (14.36):

$$a = \bar{y} - \rho_{yx} \bar{x}.$$

Підставимо праву частину цього рівняння у перше рівняння системи (14.36) та отримаємо за МНК

$$\rho_{yx} = \frac{\sum n_{xy} xy - n \bar{x} \bar{y}}{n(\overline{x^2} - \bar{x}^2)}.$$

Тоді

$$a = \frac{n \overline{x^2} \bar{y} - \bar{x} \sum n_{xy} xy}{n(\overline{x^2} - \bar{x}^2)}.$$

Оскільки $\overline{x^2} - \bar{x}^2 = \sigma_x^2$, то

$$\rho_{yx} = \frac{\sum n_{xy} xy - n \bar{x} \bar{y}}{n \sigma_x^2} \quad a = \frac{n \overline{x^2} \bar{y} - \bar{x} \sum n_{xy} xy}{n \sigma_x^2}.$$

Вибірковий коефіцієнт кореляції можна розрахувати за формулою:

$$r_B = \frac{\sum n_{xy}xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\sigma_x\sigma_y}, \quad (14.37)$$

де σ_x та σ_y – стандартне відхилення X та Y відповідно.

Зв'язок між ρ_{yx} та r_B такий: помноживши ρ_{yx} на $\frac{\sigma_x}{\sigma_y}$, отримаємо вираз для рівняння регресії Y на X , яке будемо шукати у вигляді [1, 4]:

$$\bar{y}_x - \bar{y} = r_B \frac{\sigma_y}{\sigma_x} (x - \bar{x}). \quad (14.38)$$

Рівняння регресії X на Y :

$$\bar{x}_y - \bar{x} = r_B \frac{\sigma_x}{\sigma_y} (y - \bar{y}). \quad (14.39)$$

Приклад 14.12. За дослідними даними знайти рівняння прямих ліній регресії Y на X та оцінити силу лінійного кореляційного зв'язку.

y_i	x_i			
	15	16	17	18
1,11	3			
1,12	1	3	1	
1,13		1	3	2
1,14				2

Розв'язок: шукатимемо рівняння регресії у вигляді (14.38). Спочатку обчислимо вибірковий коефіцієнт кореляції r_B .

Розрахунки наведені на рис. 14.3; результати обчислень зручно записувати в дві допоміжні таблиці, що розташовані справа і знизу від заданої кореляційної таблиці.

$\begin{matrix} X \\ Y \end{matrix}$	15	16	17	18	n_y	v	$n_y \cdot v$	$n_y \cdot v^2$	q	$q \cdot v$
1.11	3				3	-2	-6	12	-3	6
1.12	1	3	1		5	-1	-5	5	0	0
1.13		1	3	2	6	0	0	0	7	0
1.14				2	2	1	2	2	4	4
n_x	4	4	4	4	16		-9	19		10
u	-1	0	1	2						
$n_x \cdot u$	-4	0	4	8	8					
$n_x \cdot u^2$	4	0	4	16	24					
t	-7	-3	-1	2						
$t \cdot u$	7	0	-1	4	10					

Рис. 14.13. Проміжні розрахунки до прикладу 14.12

Щоб спростити обчислення, перейдемо від початкових варіант x_i та y_i до умовних варіант u і v :

$$u_i = \frac{x_i - C_1}{h_1}, \quad v_j = \frac{y_j - C_2}{h_2},$$

де h_1, h_2 – інтервали: $h_1=1$ ($h_1 = x_{i+1} - x_i$, наприклад, $h_1=16-15=1$), $h_2 = 0,01$ ($h_2 = y_{i+1} - y_i$, наприклад, $h_2=1,12-1,11=0,01$). У якості C_1 та C_2 беруть варіанти при найбільших частотах. Однак оскільки варіанти x_i мають однакову частоту ($n_x = 4$), то як C_1 візьмемо 16, тобто $C_1=16$); а як C_2 візьмемо варіанту $y=1,13$, що є значенням y при найбільшій частоті – $n_y = 6$ (тобто $C_2=1,13$). Знайдені у такий спосіб умовні варіанти u_i і v_j запишемо відповідно в рядок u нижньої таблиці й у стовпець v лівої таблиці.

Елементи рядку $n_x u$ дорівнюють добуткам відповідних елементів рядків n_x і u ; елементи стовпця $n_y v$ дорівнюють добуткам відповідних елементів стовпців n_y і v ; аналогічно знаходяться усі елементи $n_x u^2 n_y v^2$.

Кожний елемент стовпця q дорівнює сумі добутків частот n_{uv} (n_{xy}), котрі знаходяться у відповідному рядку кореляційної таблиці, на відповідні елементи рядка u . Наприклад, перше значення стовпця q дорівнює -3,0, тобто $3 \cdot (-1) = -3,0$; друге значення стовпця q дорівнює 0, а саме $1 \cdot (-1) + 3 \cdot (0) + 1 \cdot 1 = 0$ і т.д.

У рядку t кожний елемент дорівнює сумі добутків частот n_{uv} (n_{xy}), які знаходяться у відповідному стовпці кореляційної таблиці, на відповідні

елементи стовпця v . Наприклад, перше значення рядка t дорівнює -7 , тобто $3 \cdot (-2) + 1 \cdot (-1) = -7$; друге значення: $3 \cdot (-1) + 1 \cdot 0 = -3$ і т.д.

В останньому стовпці qv кожний елемент дорівнює добутку відповідних елементів стовбців q і v , а в останньому рядку tu кожний елемент дорівнює добутку відповідних елементів рядків t і u . Рівність сум $\sum qv = \sum tu = 10$ використовують для контролю правильності обчислень.

Далі послідовно знаходимо:

$$\bar{u} = \frac{\sum n_x u}{n} = \frac{8}{16} = 0,5; \quad \bar{v} = \frac{\sum n_y v}{n} = \frac{-9}{16} = -0,56.$$

де $\bar{u}$, $\bar{v}$ – середні умовних варіант.

Середні квадратичні відхилення умовних варіант:

$$\sigma_u = \sqrt{\frac{\sum n_x u^2}{\sum n_x} - (\bar{u})^2} = \sqrt{\frac{24}{16} - (0,5)^2} = 1,11;$$

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{\sum n_y v^2}{\sum n_y} - (\bar{v})^2} = \sqrt{\frac{19}{16} - (-0,56)^2} = 0,93.$$

Далі знаходимо вибіркового коефіцієнт кореляції (з урахуванням того, що $\sum qv = \sum tu = \sum n_{uv} uv = 10$):

$$r_b = \frac{\sum n_{uv} uv - n \bar{u} \bar{v}}{n \sigma_u \sigma_v} = \frac{10 - 16 \cdot 0,5 \cdot (-0,56)}{16 \cdot 1,11 \cdot 0,93} = 0,87.$$

Значення вибіркового коефіцієнту $r_b = 0,87$ вказує, що зв'язок між випадковими величинами досить сильний.

Далі знаходимо такі величини:

– середні значення:

$$\bar{x} = \bar{u} h_1 + C_1 = 0,5 \cdot 1 + 16 = 16,5;$$

$$\bar{y} = \bar{v} h_2 + C_2 = -0,56 \cdot 0,01 + 1,13 = 1,12.$$

– стандартні відхилення:

$$\sigma_x = \sigma_u h_1 = 1,11 \cdot 1 = 1,11;$$

$$\sigma_y = \sigma_v h_2 = 0,93 \cdot 0,01 = 0,93 \cdot 10^{-2}.$$

Підставивши знайдені величини в рівняння (14.38):

$$\bar{y}_x - 1,12 = 0,87 \frac{0,93 \cdot 10^{-2}}{1,11} (x - 16.,5), \quad (14.40)$$

знайдемо рівняння лінії регресії Y на X :

$$y_x = 0,0072x + 1,0048.$$

Порівняємо умовні середні, розраховані за рівнянням регресії з даними кореляційної таблиці з прикладу 14.12; графічна інтерпретація показана на рис. 14.1.

Аналізуючи дані, що наведені в таблиці 14.6, можна побачити, що умовні середні відрізняються незначно. Різниця розрахункових і табличних даних вказує на достатню точність розрахунків за знайденим рівнянням регресії Y на X .

Таблиця 14.6. Порівняння експериментальних та розрахункових значень

Значення x_i	Розрахунок за рівнянням (14.40)	Значення з кореляційної таблиці	Різниця розрахункових і табличних даних
15	1,1128	$\bar{y}_{15} = \frac{1,11 \cdot 3 + 1,12 \cdot 1}{3 + 1} = 1,1125$	0,0003
16	1,1200	$\bar{y}_{16} = \frac{1,12 \cdot 3 + 1,13 \cdot 1}{3 + 1} = 1,1225$	-0,0025
17	1,1272	$\bar{y}_{17} = \frac{1,12 \cdot 1 + 1,13 \cdot 3}{3 + 1} = 1,1275$	-0,0003
18	1,1344	$\bar{y}_{18} = \frac{1,13 \cdot 2 + 1,14 \cdot 2}{3 + 1} = 1,135$	-0,0006

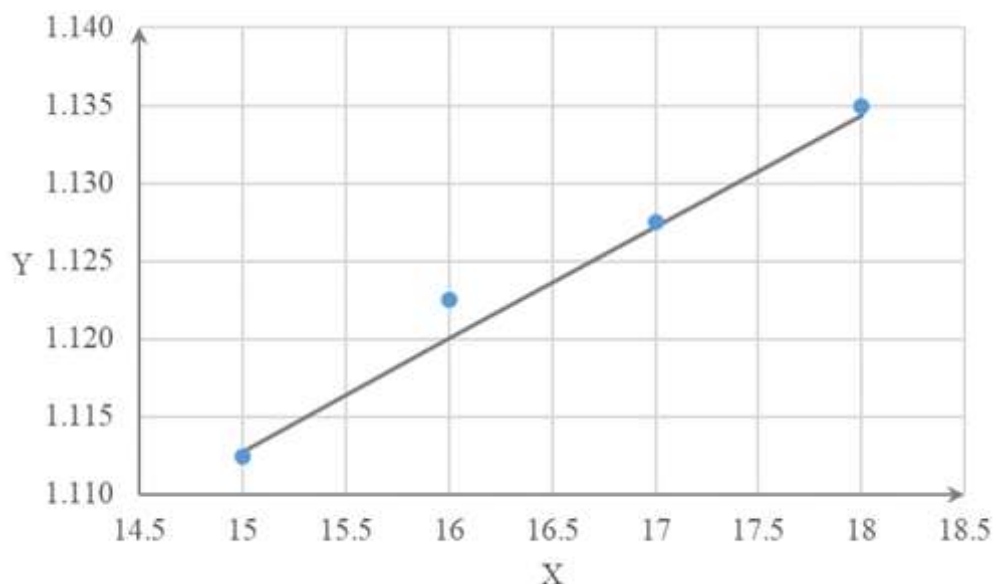


Рис. 14.14. Експериментальні та розрахункові значення

Аналогічно можна знайти рівняння лінії регресії X на Y , якщо скористатись рівнянням (14.39).

14.6.2 Нелінійна кореляція

Кореляцію називають *нелінійною* [2, 20, 44, 46], якщо графік регресії $\bar{y}_x = f(x)$ чи $\bar{x}_y = \varphi(y)$ зображується кривою лінією. Наприклад, функції регресії Y на X можуть мати вигляд:

$$\bar{y}_x = a_0 + \frac{a_1}{x}, \quad (14.41)$$

$$\bar{y}_x = a_0 + a_1x + a_2x^2, \quad (14.42)$$

$$\bar{y}_x = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3. \quad (14.43)$$

У випадку (14.41) кажуть про гіперболічну кореляцію, у випадку (14.42) – про параболічну кореляцію другого порядку, а якщо рівняння має вигляд (14.43) – про параболічну кореляцію третього порядку.

Для знаходження невідомих параметрів рівняння регресії, як і у випадку лінійної кореляції, використовують метод найменших квадратів. Нехай, наприклад, потрібно знайти вибіркове рівняння регресії Y на X вигляду (14.42):

$$\bar{y}_x = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

де a_0, a_1, a_2 – невідомі параметри.

Тоді система лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення a_0, a_1 та a_2 , отримана на основі методу найменших квадратів (див. розділ 7), матиме вигляд:

$$\begin{cases} a_2 \sum n_x x^4 + a_1 \sum n_x x^3 + a_0 \sum n_x x^2 = \sum n_x \bar{y}_x x^2 \\ a_2 \sum n_x x^3 + a_1 \sum n_x x^2 + a_0 \sum n_x x = \sum n_x \bar{y}_x x \\ a_2 \sum n_x x^2 + a_1 \sum n_x x + a_0 n = \sum n_x \bar{y}_x \end{cases} \quad (14.44)$$

Для оцінки тісноти нелінійної кореляції слугує *вибіркове кореляційне відношення* [2, 20, 44, 46]. Вибірковим кореляційним відношенням Y до X називають відношення міжгрупового стандартного відхилення до загального стандартного відхилення випадкової величини Y :

$$\eta_{yx} = \frac{\sigma_{\text{міжгр}}}{\sigma_{\text{заг}}} \text{ або } \eta_{yx} = \frac{\sigma_{\bar{y}_x}}{\sigma_y}. \quad (14.45)$$

Міжгрупове стандартне відхилення та загальне стандартне відхилення знайдемо за формулами:

$$\sigma_{\bar{y}_x} = \sqrt{D_{\text{міжгр}}} = \sqrt{\frac{\sum n_x (\bar{y}_x - \bar{y})^2}{n}}, \quad (14.46)$$

$$\sigma_y = \sqrt{D_{\text{заг}}} = \sqrt{\frac{\sum n_y (y - \bar{y})^2}{n}}, \quad (14.47)$$

де $\bar{y}$ – загальна середня величини Y ; $\bar{y}_x$ – умовна середня величини Y ; n_x – частота значень x величини X ; n_y – частота значень y величини Y ; n – об'єм вибірки.

Аналогічно можна визначити вибіркове кореляційне відношення X до Y :

$$\eta_{xy} = \frac{\sigma_{\bar{x}_y}}{\sigma_x}. \quad (14.48)$$

Вибіркове кореляційне відношення¹ має такі властивості² [2, 20, 44, 46]:

1. Значення η належать інтервалу $(0;1)$: $0 \leq \eta \leq 1$.
2. Якщо $\eta = 0$, то Y та X не зв'язані кореляційною залежністю.
3. Якщо $\eta = 1$, то величини Y та X зв'язані функціональною залежністю.
4. Вибіркове кореляційне відношення не менше абсолютної величини вибіркового коефіцієнта кореляції: $\eta \geq |r_B|$ (якщо $\eta = |r_B|$, то має місце лінійна кореляційна залежність).

Переважа вибіркового кореляційного відношення перед коефіцієнтом кореляції полягає в тому, що η служить мірою тісноти зв'язку будь-якої форми, у тому числі і лінійної, у той час як коефіцієнт кореляції r_B оцінює тісноту тільки лінійної залежності.

Приклад 14.13. Знайти вибірконе рівняння лінії регресії виду (14.42), а також вибірконе кореляційне відношення за даними кореляційної таблиці з прикладу 14.11.

Розв'язок: для знаходження невідомих параметрів рівняння регресії $\bar{y}_x = a_0 + a_1x + a_2x^2$, скористаємось методом найменших квадратів. Запишемо систему лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення a_0 , a_1 та a_2 :

$$\begin{cases} a_2 \sum n_x x^4 + a_1 \sum n_x x^3 + a_0 \sum n_x x^2 = \sum n_x \bar{y}_x x^2 \\ a_2 \sum n_x x^3 + a_1 \sum n_x x^2 + a_0 \sum n_x x = \sum n_x \bar{y}_x x \\ a_2 \sum n_x x^2 + a_1 \sum n_x x + a_0 n = \sum n_x \bar{y}_x \end{cases} .$$

Для визначення коефіцієнтів системи складемо таблицю 14.7.

Отже, система рівнянь матиме вигляд:

$$\begin{cases} 1218632a_2 + 72864a_1 + 4376a_0 = 4925,04 \\ 72864a_2 + 4376a_1 + 264a_0 = 296,98 \\ 4376a_2 + 264a_1 + 16a_0 = 17,99 \end{cases} .$$

¹ Для простоти запису позначимо його через η .

² Властивості наведені без доведення.

Таблиця 14.7. Проміжні розрахунки

Значення y_i (густина, г/см ³)	Значення x_i (концентрація HBr, % мас.)				Суми
	15	16	17	18	
1,11	3				
1,12	1	3	1		
1,13		1	3	2	
1,14				2	
n_x	4	4	4	4	16
$\bar{y}_x$	1,113	1,123	1,128	1,135	
$x \cdot n_x$	60	64	68	72	264
$x^2 \cdot n_x$	900	1024	1156	1296	4376
$x^3 \cdot n_x$	13500	16384	19652	23328	72864
$x^4 \cdot n_x$	202500	262144	334084	419904	1218632
$n_x \cdot \bar{y}_x$	4,45	4,49	4,51	4,54	17,99
$n_x \cdot \bar{y}_x \cdot x$	66,75	71,84	76,67	81,72	296,98
$n_x \cdot \bar{y}_x \cdot x^2$	1001,25	1149,44	1303,39	1470,96	4925,04

Шукані коефіцієнти: $a_0 = 0,836$; $a_1 = 2,7 \cdot 10^{-2}$; $a_2 = -0,62 \cdot 10^{-3}$.

Тоді рівняння лінії регресії Y на X :

$$\bar{y}_x = 0,836 + 2,7 \cdot 10^{-2}x - 0,62 \cdot 10^{-3}x^2. \quad (14.49)$$

Порівняємо умовні середні, розраховані за рівнянням регресії з даними кореляційної таблиці (таблиця 14.8, рис. 14.15):

Таблиця 14.8. Порівняння експериментальних даних та розрахункових значень

x_i	Розрахунок за рівнянням (14.49)	Умовні середні	Різниця
15	1,1128	$y_{15} = \frac{1,11 \cdot 3 + 1,12 \cdot 1}{4} = 1,113$	$-0,2 \cdot 10^{-3}$
16	1,1214	$y_{16} = \frac{1,12 \cdot 3 + 1,13 \cdot 1}{4} = 1,123$	$-0,16 \cdot 10^{-2}$
17	1,1286	$y_{17} = \frac{1,12 \cdot 1 + 1,13 \cdot 3}{4} = 1,128$	$0,6 \cdot 10^{-3}$
18	1,1346	$y_{18} = \frac{1,13 \cdot 2 + 1,14 \cdot 2}{4} = 1,135$	$0,4 \cdot 10^{-3}$

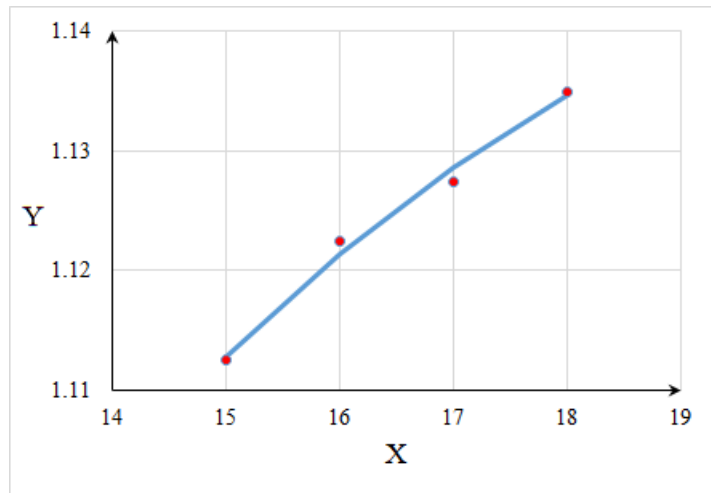


Рис. 14.15. Експериментальні та розрахункові значення

Аналізуючи дані, що наведені в таблиці 14.8, можна побачити, що умовні середні відрізняються незначно. Різниця розрахункових і табличних даних вказує на достатню точність розрахунків за знайденим рівнянням регресії Y на X . Далі знайдемо вибіркове кореляційне відношення.

Об'єм вибірки $n=16$, загальна середня величини Y :

$$\bar{y} = \frac{\sum y \cdot n_y}{n} = \frac{1,11 \cdot 3 + 1,12 \cdot 5 + 1,13 \cdot 6 + 1,14 \cdot 2}{16} = 1,124.$$

Визначимо загальне стандартне відхилення:

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{3 \cdot (1,11 - 1,124)^2 + \dots + 2 \cdot (1,14 - 1,124)^2}{16}} = 0,0167.$$

Для знаходження міжгрупового середнього квадратичного відхилення скористаємося формулою (14.46); умовні середні $\bar{y}_x$ при $x = 15; 16; 17; 18$ знайдені у попередньому прикладі:

$$\sigma_{\bar{y}_x} = \sqrt{\frac{4 \cdot (1,113 - 1,124)^2 + \dots + 4 \cdot (1,135 - 1,124)^2}{16}} = 0,0163.$$

Шукане вибіркове кореляційне відношення

$$\eta_{yx} = \frac{\sigma_{\bar{y}_x}}{\sigma_y} = \frac{0,163}{0,167} \approx 0,97.$$

Порівнюючи кореляційне відношення $\eta_{yx} = 0,97$ з коефіцієнтом кореляції $r_B = 0,97$ обчисленому у попередньому прикладі, бачимо, що вони рівні між собою, що підтверджує властивість 4 кореляційного відношення – наявність точної лінійної кореляційної залежності між величинами Y та X .

14.6.3 Поняття по множинну кореляцію

Кореляцію називають *множинною*, якщо досліджується зв'язок між декількома величинами [2, 20, 44, 46].

Нехай кількість досліджуваних величин дорівнює трьом, і зв'язок між ними лінійний, тобто рівняння регресії має вигляд:

$$Z = aX + bY + c. \quad (14.50)$$

У такому випадку можуть бути розглянуті такі задачі:

1. Знайти коефіцієнти рівняння (14.50) за даними спостережень.
2. Оцінити тісноту зв'язку між Z та двома ознаками X , Y за допомогою *вибіркового сукупного коефіцієнта кореляції*.

Оцінити тісноту зв'язку між Z та X (при $Y = \text{const}$), Z та Y (при $X = \text{const}$) можна за допомогою часткових вибірових коефіцієнтів кореляції.

14.7 СТАТИСТИЧНА ПЕРЕВІРКА СТАТИСТИЧНИХ ГІПОТЕЗ

Статистичною називають гіпотезу про вигляд невідомого розподілу генеральної сукупності або про значення параметрів відомих розподілів, наприклад [2, 20, 24, 25, 44, 46]:

- закон розподілу невідомий; тоді припущення про те, що генеральна сукупність має нормальний розподіл, є статистичною гіпотезою;
- закон розподілу відомий, але його параметри (математичне сподівання та стандартне відхилення) невідомі. Тоді припущення про те, що математичне сподівання $M(X)$ дорівнює певному значенню $M_0(X)$, є також статистичною гіпотезою.

Висунуту гіпотезу називають *нульовою (основною)* і позначають як H_0 . Поряд з основною гіпотезою розглядають гіпотезу, яка протирічить нульовій; її називають *конкуруючою (альтернативною)* і позначають як H_1 .

Якщо основна гіпотеза буде відкинута, то розглядатиметься конкуруюча. Альтернативних гіпотез може бути декілька.

Гіпотезу називають *простою*, якщо вона містить тільки одне припущення, і *складною*, якщо гіпотеза складається двох і більше простих гіпотез. Наприклад, гіпотеза $H_0: \lambda = 0,002$ (λ – параметр показникового розподілу) є простою, а гіпотеза $H_0: \lambda > 0,002$ є складною, оскільки складається з множини простих гіпотез $H_i: \lambda = b_i$, де b_i – будь-яке число, що більше за 0,002.

Перевірка висунутої гіпотези здійснюється статистичними методами, тому таку перевірку називають *статистичною*. При цьому може бути прийнято неправильне рішення, тобто допущені похибки першого та другого роду.

Похибка першого роду полягає в тому, що буде відкинута правильна гіпотеза, а *похибка другого роду* – що буде прийнята неправильна гіпотеза.

Імовірність зробити похибку першого роду прийнято позначати через α – рівень значущості. У практичних завданнях рівень значущості приймають рівним 0,05 або 0,01.

Статистичним критерієм (або просто *критерієм*) називають спеціально підібрану випадкову величину K , точний чи наближений розподіл якої відомий і яка служить для перевірки нульової гіпотези. Якщо випадкова величина, яка використовується в якості критерію, розподілена за нормальним законом, то її прийнято позначати як U або Z ; якщо за законом Фішера-Снедекора – як F ; якщо за законом Стюдента – як T тощо.

Після визначення статистичного критерію множину всіх його можливих значень розбивають на дві підмножини, які не перетинаються: одна з них містить значення критерію, при яких гіпотезу відкидають, а інша – при яких вона приймається.

Критичною областю називають сукупність значень критерію, при яких нульову гіпотезу відкидають. *Областю прийняття гіпотези (областю*

допустимих значень) називають сукупність значень критерію, при яких гіпотезу приймають.

Точки, які відокремлюють критичну область від області прийняття гіпотези, називаються *критичними* $k_{кр}$. Критична область може бути одnobічною (правобічною чи лівобічною) або двобічною (рис. 14.16).

Правобічною називають критичну область, для якої виконується нерівність $K > k_{кр}$, де $k_{кр} > 0$. *Лівобічною* називають критичну область, для якої виконується нерівність $K < k_{кр}$, де $k_{кр} < 0$. *Двобічною* називають критичну область, визначену нерівностями $K < k_1, K > k_2$, де $k_2 > k_1$.

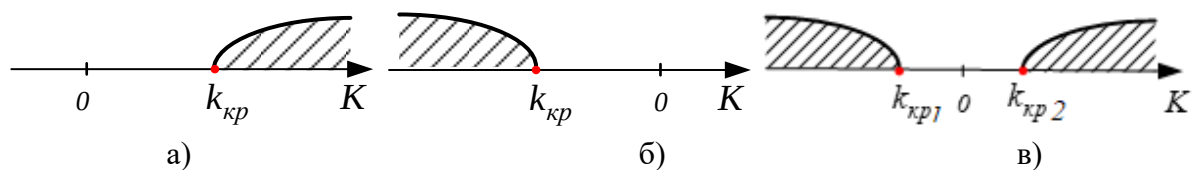


Рис. 14.16. Приклади області допустимих значень: а – правобічна, б – лівобічна, в – двобічна

Зокрема, якщо критичні точки симетричні відносно нуля, то двобічна критична область визначається нерівностями (припускаючи, що $k_{кр} > 0$):

$$K < -k_{кр}, \quad K > k_{кр},$$

чи рівносильною нерівністю

$$K > k_{кр}.$$

Загальна схема перевірки статистичних гіпотез полягає у такому: якщо обчислене за даними вибірки значення критерію K належить критичній області, то нульову гіпотезу відкидають; якщо K належить області прийняття гіпотези, то її приймають [2, 20, 24, 25, 44, 46].

Розглянемо процес знаходження критичної області на прикладі відшукування правобічної області, яка визначається нерівністю $K > k_{кр}$. Для відшукування цієї області достатньо знайти критичну точку. Спочатку задаються рівнем значущості α , а потім знаходять критичну точку $k_{кр}$, виходячи з вимоги:

$$P(K > k_{\text{кр}}) = \alpha. \quad (14.51)$$

Тобто за умови справедливості нульової гіпотези імовірність того, що критерій K прийме значення, більше за $k_{\text{кр}}$, має дорівнювати прийнятому рівню значущості.

Зазначимо, що для кожного критерію використовуються відповідні таблиці, за якими знаходять критичну точку, яка задовольняє вимогу (14.51).

Після знаходження критичної точки, за даними вибірки обчислюють спостереження результату $K_{\text{розр}}$, і якщо $K_{\text{розр}} > k_{\text{кр}}$, то нульову гіпотезу відкидають, а якщо $K_{\text{розр}} < k_{\text{кр}}$, то немає підстав, щоб відкинути нульову гіпотезу.

Аналогічним чином знаходять правобічну та двобічну критичні області.

14.7.1 Перевірка гіпотези відносно рівності двох дисперсій нормальних генеральних сукупностей

Нехай генеральні сукупності X та Y розподілені нормально, з них відібрані незалежні вибірки, об'єми яких відповідно n_1 та n_2 , і знайдені виправлені вибіркові дисперсії S_X^2 і S_Y^2 . Потрібно для заданого рівня значущості α перевірити нульову гіпотезу про рівність генеральних дисперсій між собою [24, 25]:

$$H_0: D(X)=D(Y)$$

при конкуруючій гіпотезі

$$H_1: D(X)>D(Y).$$

Для цього знаходимо розрахункове значення критерію F за формулою

$$F_{\text{розр}} = \frac{S_6^2}{S_{\text{м}}^2}.$$

де S_6^2 – більша виправлена дисперсія, $S_{\text{м}}^2$ – менша виправлена дисперсія. За таблицею критичних точок розподілу Фішера-Снедекора, для заданого рівня значущості α і чисел степенів свободи k_1 і k_2 (k_1 – число степенів свободи

більшої виправленої дисперсії) необхідно знайти критичну точку $F_{кр}(\alpha, k_1, k_2)$.

Якщо $F_{розр} < F_{кр}$, то немає підстав відхилити нульову гіпотезу; якщо $F_{розр} > F_{кр}$, то гіпотезу H_0 відхиляють.

Якщо конкуруюча гіпотеза має вигляд: $H_1: D(X) \neq D(Y)$, то $F_{кр}(\frac{\alpha}{2}, k_1, k_2)$, тобто значення рівня значущості зменшують в два рази.

На практиці така задача виникає, якщо потрібно порівняти точність приладів, методів вимірювань та інше. Якщо нульова гіпотеза справедлива, тобто генеральні дисперсії однакові, то відмінність виправлених дисперсій несуттєва і пояснюється випадковими причинами. Наприклад, якщо відмінність виправлених вибірових дисперсій результатів вимірів, виконаних двома приладами, виявилась несуттєвою, то прилади мають однакову точність.

Приклад 14.14. За результатами вимірювань однієї і тієї ж величини двома методами, які наведені в таблиці (x_i – результат i -ого вимірювання величини X першим методом; y_i – результат j -ого вимірювання величини X другим методом), встановити, чи забезпечують обидва методи однакову точність вимірювань, якщо рівень значущості $\alpha = 0,1$.

x_i	2,5	2,7	2,9	2,8	2,6	3,0	3,1
y_i	2,6	2,8	3,2	3,1	2,7		

Розв'язок: будемо розглядати результати вимірювань як дві незалежні вибірки (об'єми їх $n_1=7$ і $n_2=5$ відповідно) з нормально розподілених генеральних сукупностей X і Y . Для кожної вибірки обчислимо виправлені дисперсії S_X^2 і S_Y^2 за формулами:

$$S_X^2 = \frac{1}{n_1-1} \sum_{i=1}^{n_1} (x_i - \bar{x}_B)^2, \quad S_Y^2 = \frac{1}{n_2-1} \sum_{i=1}^{n_2} (y_i - \bar{y}_B)^2,$$

де $\bar{x}_B, \bar{y}_B$ – вибірові середні:

$$\bar{x}_B = \frac{1}{7} \sum_{i=1}^7 x_i \approx 2,8; \quad \bar{y}_B = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 y_i \approx 2,88.$$

Тоді

$$S_X^2 = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^7 (x_i - 2,8)^2 \approx 0,047; \quad S_Y^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^5 (y_i - 2,88)^2 \approx 0,067.$$

Задача полягає в тому, щоб за виправленими дисперсіями для заданого рівня значущості $\alpha = 0,1$, перевірити нульову гіпотезу H_0 відносно рівності дисперсій генеральних сукупностей X і Y , тобто $H_0: D(X)=D(Y)$, конкуруюча гіпотеза $H_1: D(X) \neq D(Y)$.

Для перевірки гіпотези H_0 приймаємо випадкову величину $F_{\text{розр}} = \frac{S_6^2}{S_M^2} \approx 1,4$ – розрахункове значення критерія F .

За таблицею критичних точок розподілу Фішера-Снедекора за рівнем значущості $\frac{\alpha}{2}$ і числам степенів свободи k_1 і k_2 ($k_1=n_1-1$; $k_2=n_2-1$; n_1 – об'єм вибірки, за якою знайдена більша виправлена дисперсія; n_2 – об'єм вибірки, за якою знайдена менша виправлена дисперсія) знаходимо критичну точку

$$F_{\text{кр}}\left(\frac{\alpha}{2}, n_1, n_2\right) = F_{\text{кр}}\left(\frac{0,1}{2}, 4, 6\right) = 4,53.$$

Оскільки $F_{\text{розр}} = 1,4 < F_{\text{кр}} = 4,53$, то нульова гіпотеза не відхиляється, тобто обидва методи забезпечують однакову точність. Генеральні дисперсії відрізняються несуттєво.

14.7.2 Перевірка гіпотези про рівність двох середніх нормальних генеральних сукупностей з невідомими дисперсіями

Нехай генеральні сукупності X і Y розподілені нормально, дисперсії їх невідомі. Потрібно при рівні значущості α перевірити нульову гіпотезу $H_0: a_X = a_Y$ про рівність генеральних середніх нормальних сукупностей з невідомими дисперсіями при конкуруючій гіпотезі $H_1: a_X \neq a_Y$, за двома залежними вибірками однакового об'єму n . Для цього необхідно обчислити розрахункове значення критерію [24, 25]

$$T_{\text{розр}} = \frac{\bar{d}\sqrt{n}}{S_d},$$

де $\bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i$; $d_i = x_i - y_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$); x_i та y_i – відповідні елементи залежних вибірок; S_d – вибіркове стандартне відхилення

$$S_d = \sqrt{\frac{\sum d_i^2 - \frac{(\sum d_i)^2}{n}}{n-1}}.$$

За таблицею критичних точок розподілу Стюдента для заданого рівня значущості α і числа ступенів свободи $k=n-1$ знаходимо критичну точку $t_{\text{кр}}(\alpha, k)$.

Якщо $|T_{\text{розр}}| < t_{\text{кр}}$, то немає підстав відхиляти нульову гіпотезу. Якщо $|T_{\text{розр}}| > t_{\text{кр}}$, то нульову гіпотезу відхиляємо.

Необхідність перевірити гіпотезу H_0 виникає тоді, коли потрібно порівняти два методи дослідження, які реалізовані однією лабораторією, або якщо дослідження виконано одним і тим же методом двома різними лабораторіями.

Приклад 14.15. Хімічна лабораторія виконала в одному й тому ж порядку аналіз 10 проб води двома методами. Отримані результати наведені в таблиці (x_i , y_i – вміст деякої речовини у відсотках в i пробі, визначений відповідно першим і другим методом). Потрібно при рівні значущості 0,05 встановити, суттєво чи ні відрізняються середні результати аналізів, вважаючи, що вони розподілені нормально.

x_i	5	10	14	15	18	22	17	20	19	6
y_i	8	12	17	20	21	19	14	23	16	9

Розв'язок: розрахуємо

$$d_1 = x_1 - y_1 = 5 - 8 = -3; d_2 = 10 - 12 = -2; \dots; d_{10} = 6 - 9 = -3,$$

$$\bar{d} = \frac{-3 - 2 + \dots - 3}{10} = -1,3;$$

$$\sum d_i^2 = 9 + 4 + \dots + 9 = 101; (\sum d_i)^2 = (-13)^2.$$

Обчислимо виправлене стандартне відхилення

$$S_d = \sqrt{\frac{\sum d_i^2 - \frac{(\sum d_i)^2}{n}}{n-1}} = \sqrt{\frac{101 - \frac{(-13)^2}{10}}{9}} = 3,06.$$

Знайдемо розрахункове значення критерію

$$T_{\text{розр}} = \frac{\bar{d}\sqrt{n}}{S_d} = \frac{-1,3\sqrt{10}}{3,06} = -1,345.$$

За таблицею критичних точок розподілу Стюдента, для рівня значущості $\alpha=0,05$, і числа ступенів свободи $k=n-1=10-1=9$ знаходимо критичну точку $t_{\text{кр}}(0,05; 9)=2,262$. Оскільки $|T_{\text{розр}}|=1,345 < t_{\text{кр}}=2,262$, то немає підстав відхиляти нульову гіпотезу, тобто середні результати аналізів відрізняються несуттєво.

14.7.3 Перевірка гіпотези про нормальний розподіл генеральної сукупності. Критерій узгодженості Пірсона

Нехай X - досліджувана випадкова величина, закон розподілу якої невідомий, але є підстави припустити, що X має нормальний розподіл.

Критерій перевірки гіпотези про передбачуваний закон невідомого розподілу називається *критерієм узгодженості*. Існує декілька критеріїв згоди: χ^2 ("хі квадрат") Пірсона, Колмогорова, Смірнова та інші [2, 20, 24, 25, 44, 46].

Критерій χ^2 Пірсона найчастіше застосовується на практиці. Розглянемо застосування цього критерію для перевірки гіпотези про нормальний розподіл генеральної сукупності. Отже, потрібно при заданому рівні значущості α перевірити нульову гіпотезу H_0 : генеральна сукупність розподілена нормально.

Алгоритм розв'язання цієї задачі такий:

1. За вибіркою об'ємом n , отриманої з генеральної сукупності,

побудувати емпіричний розподіл у вигляді послідовності рівновіддалених варіант і відповідних їм частот або у вигляді послідовності інтервалів $(x_i; x_{i+1})$ і відповідних їм частот n (n – сума частот, що потрапили в i інтервал):

Якщо емпіричний розподіл представлений у вигляді статистичного розподілу частот

Варіанти x_i	x_1	x_2	...	x_k
Частоти n_i	n_1	n_2	...	n_k

то потрібно обчислити:

- вибіркoву середню $\bar{x}_B$ і вибіркoве стандартне відхилення σ_B ;
- теоретичні частоти $n'_i = \frac{nh}{\sigma_B} \phi(u_i)$, де n – об'єм вибірки), h – крок (різниця між сусідніми варіантами); $u_i = \frac{(x_i - \bar{x}_B)}{\sigma}$; $\phi(u) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) e^{-\frac{u^2}{2}}$;
- перейти до п.2.

Якщо емпіричний розподіл представлений у вигляді інтервального статистичного розподілу частот

I_i	$(x_1 - x_2)$	$(x_2 - x_3)$	...	$(x_{k-1} - x_k)$
n_i	n_1	n_2	...	n_k

то необхідно:

- знайти середини часткових інтервалів $(x_i - x_{i+1})$: $x_i^* = \frac{(x_i + x_{i+1})}{2}$ і записати як статистичний розподіл частот:

x_i^*	x_1^*	x_2^*	...	x_k^*
n_i	n_1	n_2	...	n_k

- обчислити вибіркoві середню $\bar{x}^*$ і стандартне відхилення σ^* ;
- пронормувати X , тобто перейти до випадкової величини $Z = \frac{(X - \bar{x}^*)}{\sigma^*}$ і обчислити кінці інтервалів $z_i = \frac{(x_i - \bar{x}^*)}{\sigma^*}$; $z_{i+1} = \frac{(x_{i+1} - \bar{x}^*)}{\sigma^*}$, причому найменше значення z , тобто z_1 , приймають рівним $-\infty$, а найбільше, тобто z_k – рівним $+\infty$;

– обчислити теоретичні частоти

$$n'_i = n \cdot P_i,$$

де n – об'єм вибірки; $P_i = \Phi(z_{i+1}) - \Phi(z_i)$ – імовірність попадання n в інтервал $(x_i - x_{i+1})$; $\Phi(z)$ – функція Лапласа;

2. Порівняти емпіричні частоти n_i з теоретичними n'_i за допомогою критерію χ^2 Пірсона, для чого необхідно знайти розрахункове значення критерію $\chi^2_{\text{розр}}$:

$$\chi^2_{\text{розр}} = \sum \frac{(n_i - n'_i)^2}{n'_i},$$

а потім за таблицею критичних точок розподілу χ^2 за заданим рівнем значущості α і числом степенів свободи $k = s - 3$ (s – кількість різних варіант або число різних інтервалів вибірки) знайти критичну точку $\chi^2_{\text{кр}}(\alpha, k)$.

Якщо $\chi^2_{\text{розр}} < \chi^2_{\text{кр}}$, то немає підстав відкидати нульову гіпотезу; якщо $\chi^2_{\text{розр}} > \chi^2_{\text{кр}}$, то нульову гіпотезу відкидають.

Приклад 14.16. Використовуючи критерій Пірсона, перевірити, чи узгоджується гіпотеза про нормальний розподіл генеральної сукупності X з емпіричним розподілом вибірки обсягу $n=150$, приведеним у таблиці; рівень значущості прийняти рівним 0,05.

I_i	75,0-77,5	77,5-80,0	80,0-82,5	82,5-85,0	85,0-87,0
n_i	2	10	15	18	20

I_i	87,0-90,0	90,0-92,5	92,5-95,0	95,0-97,5	97,5-100,0
n_i	22	24	20	13	6

Розв'язок: знайдемо середини x_i^* часткових інтервалів $(x_i - x_{i+1})$ заданого інтервального емпіричного розподілу і запишемо розподіл рівновіддалених варіант:

x_i^*	76,25	78,75	81,25	83,75	86,25	88,75	91,25	93,75	96,25	98,75
n_i	2	10	15	18	20	22	24	20	13	6

Обчислимо вибірккову середню $\bar{x}^*$ і вибірккове стандартне відхилення σ^* :

$$\bar{x}^* = \frac{\sum_{i=1}^{10} n_i x_i^*}{n} = \frac{13252,5}{150} = 88,35;$$

$$\sigma^* \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{10} n_i (x_i^* - \bar{x}^*)^2}{n}} = \sqrt{\frac{4688,5}{150}} = 5,59.$$

Знайдемо інтервали $(z_i - z_{i+1})$. Результати обчислення інтервалів представлені у таблиці 14.9.

Таблиця 14.9. Обчислення інтервалів $(z_i - z_{i+1})$

<i>i</i>	Границі інтервалу		$x_i - \bar{x}^*$	$x_{i+1} - \bar{x}^*$	Границі інтервалу	
	x_i^*	x_{i+1}^*			$z_i = \frac{(x_i - \bar{x}^*)}{\sigma^*}$	$z_{i+1} = \frac{(x_{i+1} - \bar{x}^*)}{\sigma^*}$
1	75	77,5	-	-10,85	$-\infty$	-1,94
2	77,5	80,0	-10,85	-8,35	-1,94	-1,49
3	80,0	82,5	-8,35	-5,85	-1,49	-1,05
4	82,5	85,0	-5,85	-3,35	-1,05	-0,60
5	85,0	87,5	-3,35	-0,85	-0,60	-0,15
6	87,5	90,0	-0,85	1,65	-0,15	0,30
7	90,0	92,5	1,65	4,15	0,30	0,74
8	92,5	95,0	4,15	6,65	0,74	1,19
9	95,0	97,5	6,65	9,15	1,19	1,64
10	97,5	100,0	9,15	-	1,64	$+\infty$

Визначимо теоретичні імовірності P_i і теоретичні частоти $n'_i = n \cdot P_i == 150 \cdot P_i$. Значення функції Лапласа $\Phi(z)$ знаходимо за відповідними таблицями або розраховуємо в Excel. Результати обчислення теоретичних частот наведені у таблиці 14.10.

Таблиця 14.10. Обчислення теоретичних частот

<i>i</i>	Границі інтервалу		$\Phi(z_i)$	$\Phi(z_{i+1})$	$P_i = \Phi(z_{i+1}) - \Phi(z_i)$	$n'_i = n \cdot P_i$
	z_i	z_{i+1}				
1	$-\infty$	-1,94	-0,5000	-0,4738	0,0262	3,93
2	-1,94	-1,49	0,4738	-0,4319	0,0419	6,28
3	-1,49	-1,05	-0,4319	-0,3531	0,0788	11,82
4	-1,05	-0,60	-0,3531	-0,2257	0,1274	19,11
5	-0,60	-0,15	-0,2257	-0,0596	0,1661	24,92
6	-0,15	0,30	-0,0596	0,1179	0,1775	26,62
7	0,30	0,74	0,1179	0,2703	0,1524	22,86
8	0,74	1,19	0,2703	0,3830	0,1127	16,90
9	1,19	1,64	0,3830	0,4495	0,0665	9,98
10	1,64	$+\infty$	0,4495	0,5000	0,0505	7,58
Суми					1	150

Порівняємо емпіричні і теоретичні частоти з використанням критерію χ^2 Пірсона, для чого складемо таблицю 14.11.

Таблиця 14.11. Обчислення $\chi^2_{\text{розр}}$

i	n_i	n'_i	$n_i - n'_i$	$(n_i - n'_i)^2$	$\frac{(n_i - n'_i)^2}{n'_i}$	n_i^2	$\frac{n_i^2}{n'_i}$
1	2	3,93	-1,93	3,7249	0,9478	4	1,0178
2	10	6,28	3,72	13,8384	2,2036	100	15,9236
3	15	11,82	3,18	10,1124	0,8555	225	19,0355
4	18	19,11	-1,11	1,2321	0,0645	324	16,9545
5	20	24,92	-4,92	24,2064	0,9714	400	16,0514
6	22	26,62	-4,62	21,3444	0,8018	484	18,1818
7	24	22,86	1,14	1,2996	0,0568	576	25,1968
8	20	16,90	3,10	9,6100	0,5686	400	23,6686
9	13	9,98	3,02	9,1204	0,9139	169	16,9339
10	6	7,58	-1,58	2,4964	0,3293	36	4,7493
Сума	150	150	$\chi^2_{\text{розр}} = 7,7132$				157,7132

Розрахункове значення критерію Пірсона:

$$\chi^2_{\text{розр}} = \sum \frac{(n_i - n'_i)^2}{n'_i} = 157,7132 - 150 = 7,7132.$$

За таблицею критичних точок розподілу χ^2 для рівня значущості $\alpha=0,05$ і числу ступенів свободи $k = s - 3 = 10 - 3 = 7$ (де $s=10$ – число інтервалів), знаходимо критичну точку $\chi^2_{KP}(0,05; 7) = 14,1$.

Оскільки $\chi^2_{\text{розр}} < \chi^2_{KP}$, немає підстав відкидати нульову гіпотезу про нормальний розподіл генеральної сукупності. Іншими словами, емпіричні і теоретичні частоти розрізняються незначно.

КОНТРОЛЬНІ ЗАПИТАННЯ

ТА ЗАДАЧІ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ДО РОЗДІЛУ 14

1. Сформулюйте поняття вибірки і генеральної сукупності.
2. Сформулюйте поняття простого статистичного ряду.
3. Наведіть визначення статистичного розподілу частот і відносних частот, їх графічну інтерпретацію.

4. Наведіть визначення інтервального розподілу частот і відносних частот, їх графічну інтерпретацію.
5. Яким чином здійснюється аналіз статистичних даних за допомогою гістограм?
6. За допомогою яких числових оцінок оцінюють статистичний розподіл?
7. Які є способи графічного представлення статистичного розподілу частот? Інтервального статистичного розподілу частот?
8. Яким чином застосовують емпіричну функцію розподілу до практичних завдань.
9. Дайте визначення поняттям: вибірка середня, вибірка медіана, вибірка мода.
10. Дайте визначення поняттям: вибірка дисперсія, вибірконе стандартне відхилення, вибірковий коефіцієнт варіації та їх застосування до практичних завдань.
11. Вибірковий коефіцієнт асиметрії, вибірковий ексцес.
12. Вибіркова виправлена дисперсія та виправлене стандартне відхилення, їх застосування до практичних завдань.
13. Застосування довірчих інтервалів для оцінки математичного сподівання і стандартного відхилення нормального розподілу.
14. Які гіпотези називають статистичними?
15. Як сформулювати нульову та конкуруючу гіпотези?
16. Наведіть приклади простих та складних гіпотез.
17. Що таке похибка першого роду?
18. Що таке похибка другого роду?
19. До яких негативних наслідків можуть призвести похибки першого та другого роду?
20. Поняття статистичного критерію.
21. Дайте визначення критичній області та області прийняття гіпотези.
22. Поясніть загальну схему перевірки статистичних гіпотез.
23. Який критерій називають критерієм узгодженості?
24. Сформулюйте алгоритм перевірки гіпотези про нормальний розподіл генеральної сукупності.
25. Які критерії використовуються для перевірки гіпотези про нормальний

- розподіл генеральної сукупності?
26. Сформулюйте алгоритм перевірки гіпотези про рівність двох середніх нормальних генеральних сукупностей з невідомими дисперсіями.
 27. Які критерії використовуються для перевірки гіпотези про рівність двох середніх нормальних генеральних сукупностей?
 28. Сформулюйте алгоритм перевірки гіпотези про рівність двох дисперсій нормальних генеральних сукупностей.
 29. Які критерії використовуються для перевірки гіпотези про рівність двох дисперсій нормальних генеральних сукупностей?
 30. Яку залежність називають кореляційною?
 31. Сформулюйте визначення лінії регресії.
 32. Що характеризує коефіцієнт вибіркової кореляції і які значення може приймати?
 33. Кореляційна таблиця. Як вона створюється і як слід використовувати записані там дані?
 34. Від'ємна і додатна лінійна кореляція.
 35. Граничні значення коефіцієнта кореляції та їх сенс для оцінювання сили зв'язку між величинами.
 36. Сформулюйте визначення умовних середніх.
 37. Значення рН певного розчину було виміряно 10 разів (одним й тим же лаборантом за допомогою одного й того ж обладнання). В результаті вимірювань отримано варіаційний ряд 9,39; 9,35; 9,11; 9,00; 9,11; 9,26; 9,07; 8,96; 9,02; 9,31. Побудувати полігон частот та полігон відносних частот. Обчислити вибіркове середнє та стандартне середньоквадратичне відхилення.
 38. Досліджувалися¹ електроізоляційні властивості певного розчину, що знаходився в між електродами, різниця потенціалів між якими складала 34 кВ. Експериментально отримано значення моменту пробою між електродами – час від початку експерименту до моменту пробою, хв. Результати 19 вимірів – такі: 0,19; 0,78; 0,96; 1,31; 2,78; 3,16; 4,15; 4,67; 4,85; 6,50; 7,35; 8,01; 8,27; 12,06; 31,75; 32,52; 33,91; 36,71; 72,89. Побудувати варіаційний ряд вибірки. Побудувати полігон частот та полігон відносних частот. Обчислити вибіркове середнє та стандартне

¹ Wayne N. Applied life data analysis. NY: Wiley, 1982. 634 p. DOI:10.1002/0471725234

середньоквадратичне відхилення.

39. За результатами дослідження складу стічних вод підприємства внаслідок 36 визначень хімічного споживання кисню, $\text{мг}/\text{дм}^3$, отримано такі значення:

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9
ХСК, $\text{мг}/\text{дм}^3$	25,42	10,63	11,83	12,57	18,12	16,46	15,11	8,06	6,17
№	10	11	12	13	14	15	16	17	18
ХСК, $\text{мг}/\text{дм}^3$	21,24	13,06	14,46	14,62	2,24	25,31	14,44	7,29	15,78
№	19	20	21	22	23	24	25	26	27
ХСК, $\text{мг}/\text{дм}^3$	8,88	18,29	18,71	11,17	12,23	13,52	21,79	25,70	15,25
№	28	29	30	31	32	33	34	35	36
ХСК, $\text{мг}/\text{дм}^3$	16,82	1,81	24,44	28,30	27,89	17,93	14,48	19,66	26,14

Побудувати варіаційний ряд вибірки. Побудувати полігон частот та полігон відносних частот. Згрупувати результати дослідження по інтервалах, побудувати діаграми частот та відносних частот. Обчислити вибіркове середнє та стандартне середньоквадратичне відхилення.

40. Спеціаліст з технічної експлуатації досліджує залежність між тривалістю експлуатації хімічного обладнання X (години) і вартістю його щомісячного технічного обслуговування Y (грн.). Для виявлення характеру цього зв'язку було відібрано 50 одиниць обладнання:

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
X , год	515	519	517	519	519	520	521	521	522	523
Y , грн.	1161	1176	1153	1161	1168	1171	1171	1201	1175	1174
№	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
X , год	523	524	524	525	525	526	526	527	528	529
Y , грн.	1179	1206	1208	1187	1171	1217	1201	1221	1223	1208
№	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
X , год	529	530	530	531	532	533	533	534	535	536
Y , грн.	1202	1205	1191	1228	1232	1223	1212	1216	1220	1223
№	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
X , год	536	537	538	538	539	539	540	541	541	542
Y , грн.	1213	1207	1201	1229	1251	1232	1246	1234	1226	1217
№	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
X , год	543	543	544	545	546	547	547	548	549	550
Y , грн.	1244	1250	1222	1257	1243	1268	1246	1253	1273	1258

Розрахувати вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції. Знайти параметри лінії регресії Y по X і лінії регресії X по Y . Побудувати графіки згаданих ліній і порівняти з вихідними даними. Дати інтерпретацію отриманих результатів.

41. Двома дослідниками А та В незалежно отримано значення кількості оксиду сірки, адсорбованої силікагелем (% від маси адсорбенту). Обсяг вибірок, отриманих дослідниками А та В однаковий і рівний 81 – див. таблицю:

А	16,868	18,575	13,055	21,971	17,210	17,798	19,515	11,692	28,670
	14,777	17,117	22,799	5,240	21,416	13,080	17,691	16,398	5,067
	13,030	26,374	13,302	14,725	24,088	23,087	20,671	12,391	22,657
	12,114	18,573	9,709	11,596	18,182	26,314	0,147	22,408	11,248
	16,818	18,659	32,109	23,368	10,495	26,040	24,906	18,031	20,742
	16,445	15,197	16,292	5,992	14,389	15,551	20,488	12,419	12,327
	17,336	34,284	32,634	26,243	11,303	16,664	24,739	11,381	25,031
	16,772	15,213	21,936	22,401	18,661	14,523	17,851	10,905	6,099
	18,658	19,643	18,274	23,105	21,131	17,954	16,266	24,114	5,334
	23,199	9,235	15,532	17,566	24,054	22,662	5,116	8,704	17,956
	7,617	9,980	11,844	18,863	4,999	16,996	23,380	12,776	23,419
	28,875	14,745	14,176	23,636	21,293	19,728	13,279	25,923	20,968
	16,350	14,332	13,496	11,179	20,398	28,165	4,764	14,908	24,603
	6,177								
В	9,163	19,215	31,696	7,442	17,232	19,783	23,700	15,777	23,729
	-1,486	16,080	20,892	9,532	25,214	23,933	3,595	25,803	18,503
	13,004	31,612	13,174	28,790	10,726	16,302	14,251	17,048	12,813
	17,931	11,454	6,968	7,465	12,189	20,267	22,958	11,417	24,826
	21,505	12,590	11,602	23,838	25,102	14,904	16,704	17,530	16,285
	24,276	26,385	19,189	27,477	25,261	11,952	16,369	37,888	7,442
	26,523	25,363	21,508	14,294	11,616	17,912	11,127	14,474	30,316
	10,677	25,974	21,457	14,358	13,448	12,734	24,895	7,950	8,249
	21,857	15,270	30,906	12,802	13,238	23,326	13,162	15,782	24,856
	30,361	15,549	21,509	6,279	27,140	17,279	22,220	17,163	17,490
	8,325	18,853	16,030	20,583	20,969	10,610	17,837	19,053	13,572
	9,904	23,737	26,403	14,808	27,140	20,330	26,609	15,601	11,485
	23,249	7,506	19,328	7,973	27,567	18,407	6,893	20,036	14,789
	22,454								

Потрібно при рівні значущості 0,05 встановити, суттєво чи ні відрізняються середні результати експериментів, вважаючи, що вони розподілені нормально.

42. Результати 81 вимірювань значення тиску парів ацетатної кислоти (мольні частки) наведено у таблиці.

0,7328	0,7770	0,6670	0,7521	0,8123	0,8132	0,8290	0,7557	0,5732
0,8481	0,7728	0,6253	0,9033	0,6661	0,7999	0,7088	0,7678	0,6844
0,8531	0,6983	0,7092	0,7939	0,8870	0,8259	0,5481	0,6594	0,7050
0,8134	0,6312	0,7903	0,8407	0,7521	0,6966	0,7390	0,6918	0,8085
0,7927	0,8703	0,7454	0,8544	0,7736	0,6981	0,9544	0,6899	0,8007
0,9245	0,8712	0,7855	0,7804	0,8212	0,7135	0,8937	0,6369	0,8595
0,6790	0,8938	0,7662	0,8503	0,7386	0,7374	0,7854	0,7554	0,8165
0,6126	0,6298	0,7222	0,6860	0,6980	0,7288	0,8235	0,6627	0,5766
0,5613	0,6607	0,6146	0,8188	0,7210	0,5996	0,6838	0,7990	0,6999

Використовуючи критерій χ^2 Пірсона, перевірити, чи узгоджується гіпотеза про нормальний розподіл генеральної сукупності X з наведеною в таблиці вибіркою обсягу $n=81$; рівень значущості прийняти рівним 0,05.

15 РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО КОМП'ЮТЕРНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ

15.1 ВСТУПНІ ПОНЯТТЯ ДО РОЗДІЛУ 15

Перевагою чисельних методів є їх алгоритмічна зрозумілість. Це дозволяє виконати програмну реалізацію багатьох методів. Розрахунки за програмами зменшують трудомісткість розрахунків за обраним методом та суттєво зменшити час на отримання результату. Використання швидкодіючого комп'ютера та наявність готової програми надають можливість виконавцю не витратити час на обрання методу розрахунку, якщо це не пов'язано з іншими причинами. І навпаки, ручні розрахунки змушують виконавця віддавати перевагу методам з меншим числом обчислень.

Оскільки розв'язки, які отримані чисельними методами, є наближеними, то дуже важливо визначити похибку, з якою вони отримані. Також у багатьох випадках потрібно довести результат до заданої похибки, що зазвичай збільшує час і трудомісткість розрахунків. Такі завдання напряму пов'язані з обраним методом розрахунку, ресурсами комп'ютерної техніки та якістю алгоритмічного та програмного забезпечення.

Володіння навичками програмування і знання чисельних методів дозволить фахівцю розробити алгоритм обраного методу і виконати його програмну реалізацію.

Нижче наведено рекомендації щодо комп'ютерної реалізації деяких чисельних методів, розглянутих попередніх розділах цього підручника.

15.2 РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ

Рекомендації з програмної реалізації методу ітерацій у середовищі VBA

При розрахунку значення кореня рівняння за методом ітерацій вихідними даними є: ітераційна функція, початкове наближення x_0 (x_0) – значення з інтервалу $[a,b]$ відокремлення кореня, значення q (Q) і задана

точність ε (Eps). Шукаємо значення кореня x_1 та кількість ітерацій n .

Нехай ітераційна функція $\varphi(x) = 0,1 \cdot x^3 + 0,7 \cdot x + 0,3$; (див. приклад 2.6).

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: x_0 , q , Eps .

' перерахунок умови закінчення розрахунку

$Eps1 = (1-Q) / Q * Eps$

$n=0$ ' нульова ітерація

друк нульового наближення

Do

$x_1 = 0.1 * x_0^3 + 0.7 * x_0 + 0.3$

$z = \text{Abs}(x_1 - x_0)$

$n = n + 1$

друк наступного наближення

$x_0 = x_1$ 'переприсвоювання

Loop While $z > Eps1$

Блок виведення результату значення n та значення кореня x_1

Рекомендації з програмної реалізації методу половинного ділення в середовищі VBA

При розрахунку значення кореня рівняння за методом половинного ділення вихідними даними є: задана функція, значення границь a , b інтервалу $[a, b]$ відокремлення кореня, задана точність ε (Eps). Шукаємо значення кореня c .

Нехай задана функція $f(x) = x^3 + 3 \cdot x - 3$; (див. приклад 2.5).

Змінною c позначимо середину інтервалу.

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: a , b , Eps .

' Розрахунки

Do

$c = (a + b) / 2$ ' визначаємо середину інтервалу

$Fa = a^3 + 3 * a - 3$

$Fb = b^3 + 3 * b - 3$

$Fc = c^3 + 3 * c - 3$

$z = \text{Abs}(b - a)$ ' визначаємо довжину інтервалу

друк проміжних значень a, b, c, z

If $Fc = 0$ Then Exit Do

If $Fa * Fc \leq 0$ Then $b = c$

If $Fb * Fc \leq 0$ Then $a = c$

Loop While $z > \text{Eps}$

Блок виведення результату c (значення кореня).

Розрахунок функції можна організувати за допомогою підпрограми (наприклад, підпрограма функція Function).

Блок оголошення змінних

Блок введення: a, b, Eps.

' Розрахунки

Do

$c = (a + b) / 2$

If $f(c) = 0$ Then Exit Do

If $f(a) * f(c) \leq 0$ Then $b = c$

If $f(b) * f(c) \leq 0$ Then $a = c$

Loop While $\text{Abs}(b - a) > \text{Eps}$

Блок виведення результату c (значення кореня).

Підпрограма функція має вигляд:

Function $f(x)$

$f = x^3 + 3 * x - 3$

End Function

Зауваження. Підпрограма функція Function може буде використана і при програмуванні методу ітерацій.

15.3 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

Рекомендації з програмної реалізації методу ітерацій в середовищі VBA

При розрахунку значення коренів системи рівнянь за методом простої ітерації вихідними даними є: система ітераційних функцій (наприклад трьох рівнянь), початкові наближення змінних – x_{10} ($x10$), x_{20} ($x20$), x_{30} ($x30$) і задана точність ε (Eps). Шукаємо значення коренів x_{11} , x_{21} , x_{31} та кількість ітерацій n .

Нехай система ітераційних функцій має вигляд:

$$\begin{cases} x_1 = 3,25 + 0x_1 - 0,125x_2 - 0,125x_3 \\ x_2 = 1,4 - 0,2x_1 + 0x_2 + 0,2x_3 \\ x_3 = 1,4 - 0,2x_1 + 0,2x_2 + 0x_3 \end{cases}$$

$$\text{Нульове наближення: } X^{(0)} = \beta = \begin{bmatrix} 3,25 \\ 1,4 \\ 1,4 \end{bmatrix}$$

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: $x10$, $x20$, $x30$, Eps .

$n=0$ ' нульова ітерація

друк нульового наближення

Do

$x_{11} = 3.25 - 0.125 * x_{20} - 0.125 * x_{30}$

$x_{21} = 1.4 - 0.2 * x_{10} + 0.2 * x_{30}$

$x_{31} = 1.4 - 0.2 * x_{10} + 0.2 * x_{20}$

$z1 = \text{Abs}(x_{11} - x_{10})$

$z2 = \text{Abs}(x_{21} - x_{20})$

$z3 = \text{Abs}(x_{31} - x_{30})$

$n = n + 1$

Друк наступного наближення

x10 = x11: x20 = x21: x30 = x31

Loop While z1 > Eps And z2 > Eps And z3 > Eps

Блок виведення результатів: значення n та значень коренів x11, x21, x31.

15.4 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДУ ЛАГРАНЖА В СЕРЕДОВИЩІ VBA

Рекомендації з програмної реалізації методу Лагранжа

Компактний запис формули Лагранжа вказує на особливості її програмування:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right] y_i$$

При програмному розрахунку інтерполювання за методом Лагранжа вихідними даними є значення функції $f(x)$ та аргументу x у вузлових точках (масиви значень x та y), кількість вузлів інтерполяції n , значення аргументу, при якому слід розрахувати значення функції (позначимо змінною $z = x$).

Шукаємо значення функції $y=f(x)$ (ідентифікатор PN) при заданому значенні аргументу $z = x$.

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: масивів значень X та Y, z, n.

PN = 0

For i = 1 To n

PP = 1

For J = 1 To n

If i <> J Then

PP = PP * (z - X(J)) / (X(i) - X(J))

End If

Next J

$PP = PP * Y(i)$

$PN = PN + PP$

Next i

Блок виведення результатів (значення z та PN)

Програмна реалізація оберненого інтерполювання за першою інтерполяційною формулою Ньютона в середовищі VBA

Оскільки пошук значення q потребує здійснення ряду ітерацій, то програмний розрахунок суттєво полегшить процес обчислень.

При програмному розрахунку оберненого інтерполювання за першою формулою Ньютона вихідними даними є: значення аргументу x_0 у вузловій точці, що розташована найближче до заданого значення функції y , значення кроку h , початкове наближення q_0 , значення коефіцієнтів ітераційної формули $c_1 - c_0, c_1, \dots$, та задана точність ε . (див розділ 5).

Шукаємо значення аргументу x при заданому значенні функції y

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення значень: $x_0, h, q_0, c_0, c_1, \dots, Eps. y$

$n = 0$ ' нульова ітерація

Debug.Print "n", "q"

Debug.Print n, q_0

Do

$q_1 = c_0 - c_1 * q_0 * (q_0 - 1)$

$z = \text{Abs}(q_1 - q_0)$

$n = n + 1$

Debug.Print n, q_1

$q_0 = q_1$

Loop While $z > Eps$

Блок виведення значень останньої ітерації

$x = x_0 + q_1 * h$

Блок виведення результатів (значень x та y)

Програмна реалізація зворотного інтерполювання за другою інтерполяційною формулою Ньютона в середовищі VBA

Оскільки пошук значення q потребує здійснення ряду ітерацій, то програмний розрахунок суттєво полегшить процес обчислень.

При програмному розрахунку зворотного інтерполювання за другою формулою Ньютона вихідними даними є значення аргументу x_n у вузловій точці, що розташована найближче заданого значення функції y , значення кроку h , початкове наближення q_0 , значення коефіцієнтів ітераційної формули $c_i = c_0, c_1, \dots$, та задана точність ε . (див розділ 5).

Шукаємо значення аргументу x при заданому значенні функції y .

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення значень: $x_n, h, q_0, c_0, c_1 \dots, Eps. y$

$n = 0$ ' нульова ітерація

Debug.Print "n", "q"

Debug.Print n, q_0

Do

$q_1 = c_0 - c_1 * q_0 * (q_0 + 1) - c_2 * q_0 * (q_0 + 1) * (q_0 + 2)$

$z = \text{Abs}(q_1 - q_0)$

$n = n + 1$

Debug.Print n, q_1

$q_0 = q_1$

Loop While $z > Eps$

Блок виведення значення останньої ітерації

$x = x_n + q_1 * h$

Блок виведення результатів (значень x та y)

15.5 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ АПРОКСИМАЦІЇ ЗА МНК

Рекомендації з програмної реалізації МНК для лінійної апроксимації в середовищі VBA

При програмному розрахунку лінійної апроксимації за МНК вихідними даними значення функції $f(x)$ та аргументу x у вузлових точках (масиви значень x та y), кількість вузлів n . Результатом роботи програми є коефіцієнти апроксимуючої функції (її вигляд – $Q_1(x) = a_0 + a_1 \cdot x$) та значення середнього квадратичного відхилення. Для розв'язання системи використано правило Крамера. (див розділ 7).

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: масивів значень X та Y , n .

' визначення коефіцієнтів системи

$S_x = 0 : S_y = 0 : S_{2x} = 0 : S_{xy} = 0$

For $i = 1$ To n

$S_x = S_x + X(i)$

$S_y = S_y + Y(i)$

$S_{2x} = S_{2x} + X(i)^2$

$S_{xy} = S_{xy} + X(i) * Y(i)$

Next i

' розрахунок визначників системи

$D = n * S_{2x} - S_x * S_x$

$Da_0 = S_y * S_{2x} - S_{xy} * S_x$

$Da_1 = n * S_{xy} - S_x * S_y$

' визначення коефіцієнтів апроксимуючої функції

$a_0 = Da_0 / D$

$a_1 = Da_1 / D$

' визначення середнього квадратичного відхилення

$S = 0$

For $i = 0$ To n

$S = S + (Y(i) - (a_0 + a_1 \cdot X(i)))^2$

Next i

$Sigm = \text{Sqr}(S / (n - 1))$

Блок виведення результатів (Sigm, a0, a1)

Рекомендації з програмної реалізації МНК для квадратичної апроксимації в середовищі VBA

При програмному розрахунку квадратичної апроксимації за МНК вихідними даними значення функції $f(x)$ та аргументу x у вузлових точках (масиви значень x та y), кількість вузлів n . Результатом роботи програми є коефіцієнти апроксимуючої функції (її вигляд – $Q_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$) та значення середнє квадратичного відхилення. Для розв'язання системи використано правило Крамера. (див розділ 7).

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: масивів значень X та Y , n .

' визначення коефіцієнтів системи

$S_x = 0 : S_{2x} = 0 : S_{3x} = 0 : S_{4x} = 0 :$

$S_y = 0 : S_{xy} = 0 : S_{2xy} = 0$

For i = 1 To n

$S_x = S_x + X(i)$

$S_{2x} = S_{2x} + X(i)^2$

$S_{3x} = S_{3x} + X(i)^3$

$S_{4x} = S_{4x} + X(i)^4$

$S_y = S_y + Y(i)$

$S_{xy} = S_{xy} + X(i) \cdot Y(i)$

$S_{2xy} = S_{2xy} + X(i)^2 \cdot Y(i)$

Next i

' розрахунок визначників системи

$D = n \cdot S_{2x} \cdot S_{4x} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_{2x} + S_x \cdot S_{3x} \cdot S_{2x}$

$D = D - S_{2x} \cdot S_{2x} \cdot S_{2x} - S_x \cdot S_x \cdot S_{4x} - n \cdot S_{3x} \cdot S_{3x}$

```

Da0 = Sy * S2x* S4x + Sxy* S3x* S2x + Sx* S3x* S2xy
Da0 = Da0- S2x*S2x* S2xy - Sx* Sxy* S4x - S3x *S3x* Sy
Da1 = n* Sxy * S4x + Sx* S2xy* S2x + Sy* S3x* S2x
Da1 = Da1- S2x * Sxy *S2x - Sx* Sy* S4x - n* S2xy* S3x
Da2 = n* S2x *S2xy + Sx* S3x* Sy + Sx* Sxy* S2x
Da2 = Da2 - S2x * S2x* Sy - Sx* Sx*S2xy - n* Sx* Sxy
' визначення коефіцієнтів апроксимуючої функції
a0 = Da0 / D
a1 = Da1 / D
a2 = Da2 / D
' визначення середнє квадратичного відхилення.
S = 0
For i = 0 To n
S= S + (Y(i) – (a0+ a1*X (i)+ a1*X (i)^2))^2
Next i
Sigm = Sqr(S/( n-1))
Блок виведення результатів (Sigm, a0, a1, a2)

```

15.6 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ В СЕРЕДОВИЩІ VBA

Рекомендації з програмної реалізації методів лівих, правих та середніх прямокутників

Програмна реалізація методу прямокутників в середовищі VBA

При розрахунку значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ за методом прямокутників вихідними даними є підінтегральна функція $f(x)$, межі інтегрування a і b , кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a,b]$.

Нехай підінтегральна функція $f(x) = \sqrt{3x + 1}$; межі інтегрування $a=0,2$ і $b=1,2$; $n= 10$ (див. приклад 9.5, розділ 9).

Шукаємо значення інтеграла від заданої функції $f(x)$ на заданому відрізку інтегрування $[a, b]$.

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: a , b , n .

' визначення кроку

$h = (b - a) / n$

' табуляція функції (отримання значень $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$, ..., $y_n = f(x_n)$)

For $i = 0$ To n

$X = a + i * h$

$Y(i) = \text{SQR}(3 * X + 1)$

Next i

' Інтеграл за методом лівих прямокутників

$S = 0$

For $i = 0$ To $n - 1$

$S = S + Y(i)$

Next i

$IL = h * S$

Блок виведення результату IL

При визначенні інтеграла за методом правих прямокутників

' Інтеграл за методом правих прямокутників

$S = 0$

For $i = 1$ To n

$S = S + Y(i)$

Next i

$IP = h * S$

Блок виведення результату IP

При визначенні інтеграла за методом середніх прямокутників

(в методі табуляцію функції проводять в серединах відрізків розбиття)

' табуляція функції

' (отримання значень $y_1 = f(x_{1/2})$, $y_2 = f(x_{3/2})$, ..., $y_n = f(x_{n-1/2})$)

$X = a + h / 2$

```

For i = 0 To n-1
Y(i)= SQR(3*x+1)
X = X + h
Next i
' Інтеграл за методом середніх прямокутників
S=0
For i = 0 To n-1
S = S + Y(i)
Next i
ISR=h*S
Блок виведення результату ISR

```

Визначення інтеграла при таблично заданій функції

У цьому випадку вихідними даними є масив значень підінтегральної функції, кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a, b]$, крок h .

Структура програми

При визначенні інтеграла за методом лівих прямокутників

Блок оголошення змінних

Блок введення: n , масив значень підінтегральної функції $Y(i)$, h .

```

' Інтеграл за методом лівих прямокутників
S=0
For i = 0 To n-1
S = S + Y(i)
Next i
IL=h*S

```

Блок виведення результату IL

При визначенні інтеграла за методом правих прямокутників

```

' Інтеграл за методом правих прямокутників
S=0
For i = 1 To n
S = S + Y(i)
Next i

```

$$IP=h*S$$

Блок виведення результату IP

Програмна реалізація методу трапецій в середовищі VBA

Рекомендації з програмної реалізації методу трапецій

При розрахунку значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ за методом трапецій вихідними даними є підінтегральна функція $f(x)$, межі інтегрування a і b , кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a, b]$.

Нехай підінтегральна функція $f(x) = \sqrt{3x+1}$; межі інтегрування $a=0,2$ і $b=1,2$; $n=10$ (див. приклад 9.5, розділ 9).

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: a , b , n .

' визначення кроку

$$h=(b-a)/n$$

' табуляція функції (отримання значень $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$, ..., $y_n = f(x_n)$)

For i = 0 To n

$$X = a + i * h$$

$$Y(i) = \text{SQR}(3*X+1)$$

Next i

' Інтеграл за методом трапецій

$$S=0$$

For i = 1 To n-1

$$S = S + Y(i)$$

Next i

$$ITR = h*(Y(0) + Y(n)/2 + S)$$

Блок виведення результату ITR

Визначення інтеграла у випадку таблично заданій функції

У цьому випадку вихідними даними є масив значень підінтегральної функції, кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування, крок h .

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: n, масив значень підінтегральної функції Y(i), h.

' Інтеграл за методом трапецій

S=0

For i = 1 To n-1

S = S + Y(i)

Next i

ITR = h*((Y(0) + Y(n)/2 + S)

Блок виведення результату ITR

Програмна реалізація методу Сімпсона в середовищі VBA

Рекомендації з програмної реалізації методу Сімпсона

При розрахунку значення інтеграла $\int_a^b f(x)dx$ за методом Сімпсона вихідними даними є підінтегральна функція $f(x)$, межі інтегрування a і b , кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a,b]$.

Нехай підінтегральна функція $f(x) = \sqrt{3x+1}$; межі інтегрування $a=0,2$ і $b=1,2$; $n= 10$ (див. приклад 9.5, розділ 9).

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: a , b, n.

' визначення кроку

$h=(b-a)/n$

' табуляція функції (отримання значень $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$,..., $y_n = f(x_n)$)

For i = 0 To n

$X = a + i * h$

$Y(i)= \text{SQR}(3*X+1)$

Next i

' Інтеграл за методом Сімпсона

S1=0

```

For i = 1 To N-1 Step 2
S1=S1 + Y(I)
Next i
S2=0
For i = 2 To N-2 Step 2
S2=S2 + Y(I)
Next i
Ipar=h/3*(Y(0)+ Y(N)+4*S1+2*S2)
Блок виведення результату Ipar

```

Визначення інтеграла у випадку таблично заданій функції

У цьому випадку вихідними даними є масив значень підінтегральної функції, кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування, крок h .

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: n , масив значень підінтегральної функції $Y(i)$, h .

' Інтеграл за методом Сімпсона

```

S1=0
For i = 1 To N-1 Step 2
S1=S1 + Y(I)
Next i
S2=0
For i = 2 To N-2 Step 2
S2=S2 + Y(I)
Next i
Ipar=h/3*(Y(0)+ Y(N)+4*S1+2*S2)
Блок виведення результату Ipar

```

15.7 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В СЕРЕДОВИЩІ VBA

Рекомендації з програмної реалізації методу Ейлера

Програмна реалізація методу Ейлера в середовищі VBA

При розв'язанні звичайного диференціального рівняння за методом Ейлера вихідними даними є функція $f(x)$, кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a,b]$, значення кроку h , початкові наближення x_0, y_0 .

Нехай функція $f(x) = 1,8x + 0,1 \cdot y^3$; відрізок інтегрування $[0, 1]$, значення кроку $h=0,1$, кількість відрізків $n=10$, $x_0=0, y_0=1,5$ (див. розділ 10).

Шукаємо значення функції $f(x)$ при відповідних значеннях x .

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: n , початкові значення $X(0)$, $Y(0)$, h .

For i= 1 To 10

$Y(i) = Y(i-1) + h * (1,8 * X(i-1) + 0,1 * Y(i-1)^3)$

$X(i) = X(i-1) + h$

Next i

Блок виведення результатів: таблична функція (масиви $X(i)$, $Y(i)$)

Рекомендації з програмної реалізації методу Рунге-Кутти

Програмна реалізація методу Рунге-Кутти в середовищі VBA

При розв'язанні звичайного диференціального рівняння за методом Рунге-Кутти вихідними даними є функція $f(x)$, кількість відрізків n розбиття інтервалу інтегрування $[a,b]$, значення кроку h , початкові наближення x_0, y_0 .

Нехай функція $f(x) = 2,3x + 0,1 \cdot y^2$; відрізок інтегрування $[0, 1]$, значення кроку $h=0,1$, кількість відрізків $n=10$, $x_0=0, y_0=0,4$ (див розділ 10).

Шукаємо значення функції $f(x)$ при відповідних значеннях x .

Значення функції розрахуємо в підпрограмі **Function**

Структура програми

Блок оголошення змінних

Блок введення: n, початкові значення $X(0)$, $Y(0)$, h.

For i = 1 To 10

 ' Застосовуємо метод Рунге-Кутти

 y(i) = RungeKutta(x(i - 1), y(i - 1), h)

 x(i) = x(i - 1) + h

Next i

Блок виведення результатів: таблична функція (масиви $X(i)$, $Y(i)$)

Function RungeKutta(x As Single, y As Single, h As Single) As Single

 Dim k1 As Single, k2 As Single, k3 As Single, k4 As Single

 k1 = h * (2.3 * x + (0.1 * y) ^ 2)

 k2 = h * (2.3 * (x + h / 2) + 0.1 * (y + k1 / 2) ^ 2)

 k3 = h * (2.3 * (x + h / 2) + 0.1 * (y + k2 / 2) ^ 2)

 k4 = h * (2.3 * (x + h) + 0.1 * (y + k3) ^ 2)

 RungeKutta = y + (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4) / 6

End Function

16 ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ ДО КОМП'ЮТЕРНОГО ПРАКТИКУМУ

16.1 ПОХИБКИ ВИМІРЮВАНЬ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ РОЗРАХУНКІВ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес обчислення з використанням наближених чисел. Набути вмінь визначати похибки обчислень.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття абсолютної і відносної похибок; правильних значущих цифр наближеного числа;
- розглянути зв'язок між кількістю правильних значущих цифр і похибкою наближеного числа;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.1.1 Послідовність виконання практикуму

1. Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати завдання 1-4 (наприклад, у середовищі MS Excel).

Завдання 1. Округлити задане число до трьох значущих цифр, порівнюючи округлене число з заданим, обчислити абсолютну та відносну похибки округленого (наближеного) числа.

Завдання 2. Визначити для заданого наближеного числа кількість правильних значущих цифр.

Завдання 3. Визначити граничну абсолютну і граничну відносну похибки заданих чисел, врахувавши, що в записі цього числа представлені лише правильні цифри.

Завдання 4. Визначити кількість правильних значущих цифр результату, якщо гранична відносна похибка не перевищує 0,5 %.

Отримані результати розрахунків для завдань 1-4 представити у вигляді таблиці.

Завдання 1	Вихідне число	Округлене число	Δ	δ
а)	...	...	...	...
б)	...	...	...	...
Завдання 2		Число	Кількість правильних значущих цифр	
		...	...	
Завдання 3		Число	Δ	δ
а)		...	...	...
б)		...	...	...
Завдання 4	Число	δ	Кількість правильних значущих цифр	
	...	...	...	

2. Виконати обчислення похибок для завдання 5 (за вказівкою викладача – з програмною реалізацією обчислення похибок з використанням підпрограм чи функцій).

Завдання 5. Для заданої функції $y = f(a, b, c)$ визначити :

- 1) значення функції y ;
- 2) абсолютну похибку Δ_y ;
- 3) відносну похибку δ_y .

Отримані результати розрахунків для завдання 5 представити у вигляді таблиці.

Завдання 5	y	Δ_y	δ_y
значення	...	...	...

3. Надати результати виконання практикуму викладачеві.

4.Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.1.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу)

результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету

комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також результати його виконання (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- таблицю результатів розрахунків (завдання 1-4);
- отримані формули для визначення абсолютної та/або відносної похибок при розрахунках за формулою (завдання 5).
- значення наближеного значення функції у, абсолютної і відносної похибок до завдання 5 у вигляді таблиці, і за вказівкою викладача лістинг програми з результатами розрахунків.

16.1.3 Варіанти індивідуальних завдань

Вихідні дані до завдань 1-4 знаходяться в таблиці 16.1.1, до завдання 5 – у таблиці 16.1.2.

Таблиця 16.1.1 Номери варіантів і вихідні дані до завдань 1-4

Номер варіанта	Номер завдання			
	1	2	3	4
1	a) 72,904	47,291($\pm 0,014$)	a) 0,2286	$\sqrt{38}$
	б) -0,006703		б) 43,854	
2	a) 2,0865	7,8518($\pm 0,0031$)	a) 3,951	$\frac{4}{17}$
	б) -0,006316		б) 0,637	
3	a) 5,9235	12,072($\pm 0,002$)	a) 0,00171	$\sqrt{6,5}$
	б) 0,008919		б) 39,55	
4	a) 8,5945	1,4615($\pm 0,0038$)	a) 0,06842	$\sqrt{30}$
	б) 0,0011412		б) 857,37	
5	a) -3,5075	10,165($\pm 0,023$)	a) 8,445	
	б) 0,008854		б) 0,0388	
6	a) 0,7215	2,31($\pm 0,0048$)	a) 12,55	$\sqrt{52}$
	б) -0,08325		б) 3,4553	
7	a) 6,6421	45,633($\pm 0,021$)	a) 0,0384	$\sqrt{10}$
	б) 0,001617		б) 4,358	
8	a) 0,0085	2,0954($\pm 0,0061$)	a) 20,33	

Номер варіанта	Номер завдання			
	1	2	3	4
			б) 0,578	$\sqrt{9,8}$
	б) 0,0061899			
9	а) 86,935	46,881($\pm 0,013$)	а) 41,823	$\sqrt{83}$
	б) 0,006681		б) 0,0077	
10	а) 5,5725	2,8765($\pm 0,0057$)	а) 5,534	$\sqrt{33}$
	б) 0,0077088		б) 0,0758	
11	а) -85,0414	20,285($\pm 0,018$)	а) 18,457	$\sqrt{19}$
	б) -0,07465		б) 2,26	
12	а) 2,0455	2,5784($\pm 0,0069$)	а) 0,5756	$\sqrt{28}$
	б) 0,002288		б) 237,57	
13	а) -10,0418	39,316($\pm 0,014$)	а) 14,762	$\sqrt{31}$
	б) -0,009024		б) 0,0077	
14	а) -5,1205	2,1645($\pm 0,0057$)	а) 0,7638	$\sqrt{29}$
	б) 0,008414		б) 17,254	
15	а) 4,4501	26,051($\pm 0,025$)	а) 4,167	$\sqrt{18}$
	б) -0,004887		б) 13,518	
16	а) 84,058	3,3756($\pm 0,0063$)	а) 0,00516	$\frac{7}{22}$
	б) 0,008486		б) 12,13	
17	а) 255,623	46,892($\pm 0,017$)	а) 0,01579	$\sqrt{53}$
	б) 0,0045079		б) 457,67	
18	а) 6,1645	1,7875($\pm 0,0028$)	а) 30,262	$\sqrt{34}$
	б) 0,00239		б) 0,005361	
19	а) 7,6475	6,52($\pm 0,016$)	а) 7,1045	$\sqrt{21}$
	б) 0,0072832		б) 0,350	
20	а) 5,5445	6,8126($\pm 0,0028$)	а) 0,0562	$\sqrt{44}$
	б) 0,004069		б) 2,36	
21	а) 4,8385	10,836($\pm 0,022$)	а) -138,2	$\sqrt{11}$
			б) 0,089	

Номер варіанта	Номер завдання			
	1	2	3	4
	б) 0,01555			
22	а) 11,9031	4,9139(±0,0022)	а) 600,25	$\sqrt{26}$
	б) 0,008152		б) 0,00248	
23	а) 6,7645	48,138(±0,018)	а) -0,049	$\sqrt{17}$
	б) -0,0024729		б) 11,7602	
24	а) -48,1402	5,6027(±0,0062)	а) 0,5626	$\sqrt{52}$
			б) -23,714	
	б) 0,009735			
25	а) 2,8745	29,25(±0,003)	а) -30,014	$\sqrt{48}$
	б) -0,0058419		б) 476,4	
26	а) 45,4127	5,6248(±0,0069)	а) -0,213	$\sqrt{63}$
	б) -0,01655		б) 0,0062	
27	а) -7,0315	32,286(±0,011)	а) 0,05742	$\sqrt{10}$
			б) 856,43	
	б) 0,0057195			
28	а) 13,3208	5,97(±0,0061)	а) 0,0966	$\sqrt{87}$
	б) 0,007073		б) 327,5	
29	а) 4,0055	39,843(±0,013)	а) 0,00433	$\sqrt{41}$
	б) 0,007891		б) 15,637	
30	а) 76,2349	1,9095(±0,0031)	а) 0,0354	$\sqrt{58}$
	б) -0,003725		б) 16,755	

Таблиця 16.1.2 Номери варіантів і вихідні дані для завдання 5

Номер варіанта	Функція y	a	b	c
1	$y = \frac{a^3}{a^2 - c} + \frac{b}{a}$	2,85±0,054	1,87±0,044	1,19±0,03
2	$y = \frac{a^2 - c}{b^2} + \frac{a \cdot b^2}{c}$	2,72±0,053	1,75±0,042	1,24±0,032
3	$y = \frac{3 \cdot a^2 + b^2}{a^2 - 2 \cdot c^2}$	2,85±0,051	1,76±0,042	1,21±0,033
4	$y = \frac{2 \cdot a + b^2}{b + c^2}$	2,76±0,053	1,81±0,042	1,25±0,032
5	$y = \frac{2 \cdot a + 3 \cdot b^2}{b + 2 \cdot c^3}$	2,85±0,051	1,89±0,041	1,21±0,033

Номер варіанта	Функція y	a	b	c
6	$y = \frac{a^4 + 2 \cdot b^2}{c - a^2}$	2,81±0,051	1,76±0,044	1,26±0,031
7	$y = \frac{a^2 + 3 \cdot b}{a + c^2} + a \cdot b$	2,81±0,05	1,83±0,042	1,27±0,032
8	$y = \frac{c^3}{a^2 + b + c^2}$	2,85±0,051	1,85±0,042	1,28±0,034
9	$y = \frac{3 \cdot b + c^2}{a^2} - \frac{b}{c}$	2,82±0,053	1,8±0,044	1,2±0,03
10	$y = \frac{b}{a^2 + c} - 2 \cdot (a^2 + c)$	2,88±0,051	1,87±0,044	1,2±0,031
11	$y = \frac{2 \cdot a + 3 \cdot b^2 + c^2}{b + 2 \cdot c^3}$	2,83±0,053	1,81±0,044	1,29±0,033
12	$y = \frac{a^2}{b^2 + c} + (a \cdot b)^2$	2,74±0,054	1,78±0,043	1,27±0,034
13	$y = \frac{2 \cdot a^3 + b + c \cdot 3}{a^2 + 2 \cdot b^2}$	2,89±0,05	1,82±0,042	1,16±0,034
14	$y = 3 \cdot a^2 + \frac{b \cdot c^2}{a + b}$	2,84±0,052	1,77±0,041	1,29±0,032
15	$y = \frac{2 \cdot a + 3 \cdot b^2 \cdot c^3}{a^2 \cdot b}$	2,88±0,052	1,85±0,044	1,16±0,032
16	$y = \frac{a^2 \cdot c - 3 \cdot b}{a + c^2}$	2,82±0,053	1,85±0,043	1,26±0,031
17	$y = \frac{a^2}{b^2 + c} + \frac{a}{b}$	2,8±0,051	1,89±0,042	1,25±0,033
18	$y = \frac{a^2 + b}{a + b^2} + b \cdot c$	2,73±0,053	1,87±0,041	1,29±0,03
19	$y = \frac{a^3 + b^2}{a + b} - \frac{c}{a}$	2,78±0,052	1,71±0,044	1,27±0,034
20	$y = \frac{a^2 + 2 \cdot b}{c - b^2}$	2,81±0,054	1,8±0,044	1,17±0,032
21	$y = \frac{a^3}{a + 2 \cdot c^2} + \frac{c}{b}$	2,82±0,054	1,76±0,044	1,21±0,033

Номер варіанта	Функція y	a	b	c
22	$y = \frac{2 \cdot a^3 + b}{3 \cdot c^2} - 2 \cdot a^2$	2,8±0,051	1,88±0,044	1,2±0,032
23	$y = \frac{3 \cdot b^2 - 1}{a^3 + 2 \cdot c}$	2,78±0,054	1,85±0,041	1,28±0,03
24	$y = \frac{2 \cdot a^3 + b + c \cdot 3}{a^2 + 2 \cdot b^2}$	2,87±0,052	1,83±0,044	1,28±0,033
25	$y = \frac{c^3}{a^2 + b + c^2} + 2 \cdot (a^3 - b)$	2,89±0,05	1,75±0,044	1,15±0,034
26	$y = \frac{a^2 + 3 \cdot c}{\frac{b^2}{c}} + \frac{a}{b}$	2,86±0,052	1,87±0,042	1,22±0,033
27	$y = \frac{a^2}{b + c^2} + \frac{b}{c}$	2,87±0,053	1,77±0,041	1,2±0,03
28	$y = a \cdot b^2 - \frac{2 \cdot a^2 + b}{3 \cdot c^3}$	2,86±0,052	1,88±0,044	1,29±0,033
29	$y = a \cdot b^2 - \frac{2 \cdot a^2 + b}{3 \cdot c^3}$	2,71±0,051	1,89±0,041	1,12±0,033
30	$y = \frac{a^3 + 4 \cdot b}{3 \cdot a \cdot c} + \frac{1}{b}$	2,83±0,052	1,86±0,04	1,28±0,03

16.2 РОЗВ'ЯЗАННЯ НЕЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ ТА ТРАНСЦЕНДЕНТНИХ РІВНЯНЬ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв'язку нелінійних рівнянь з одним невідомим при використанні чисельних методів половинного поділу та ітерацій.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття знаходження коренів нелінійних рівнянь з одним невідомим рівнянь, алгоритми локалізації та уточнення коренів;
- скласти алгоритм методу половинного поділу; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- скласти алгоритм програмної реалізації методу ітерацій; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.2.1 Послідовність виконання практикуму

1. Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати локалізацію коренів рівняння (графічно і аналітично) в середовищі MS Excel.
2. Уточнити з точністю $\varepsilon = 0,001$ один із локалізованих коренів рівняння (або, за вказівкою викладача, усіх дійсних коренів):
 - а) методом половинного ділення;
 - б) методом ітерацій.
3. Перевірити отримані приблизні значення шляхом підстановки у вихідне рівняння.

4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.2.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- а) лістинг програм з результатами розрахунків;
- б) розрахунки та побудови у середовищі MS Excel.

16.2.3 Варіанти індивідуальних завдань

Чисельно розв'язати нелінійне рівняння із одним невідомим:

- 1) виконати локалізацію коренів графічним та аналітичним методами;
- 2) виконати уточнення коренів методами половинного поділу та ітерацій.

Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.2.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	Рівняння	№ варіанта	Рівняння
1	$x^3 - x + 1 = 0$	2	$x^3 + 2x - 4 = 0$
3	$3x^3 - x - 1 = 0$	4	$x^3 - 4x - 1 = 0$
5	$x^3 + 4x - 6 = 0$	6	$x^3 - 12x - 8 = 0$
7	$x^4 - 2x - 1 = 0$	8	$x^3 + 4x^2 - 1 = 0$
9	$x^4 + x - 3 = 0$	10	$x^3 - 6x - 2 = 0$
11	$x^3 - 2x - 3 = 0$	12	$x^4 + 3x - 1 = 0$
13	$x^4 + 4x - 1 = 0$	14	$x^4 + 5x - 3 = 0$
15	$x^3 + 8x^2 - 6 = 0$	16	$x^3 + x - 3 = 0$
17	$x^3 + 10x - 9 = 0$	18	$x^3 + 2x^2 - 2 = 0$
19	$x^3 - 4x - 3 = 0$	20	$x^5 - 5x + 2 = 0$
21	$x^3 + 2x - 7 = 0$	22	$x^3 - 3x - 5 = 0$
23	$x^4 - 5x + 1 = 0$	24	$x^3 - 8x + 4 = 0$
25	$x^3 - 0,3x - 2 = 0$	26	$x^3 - 3,5x - 3 = 0$
27	$x^3 - 4x + 2 = 0$	28	$2x^3 - 9x - 4 = 0$
29	$x^3 + 2x + 3 = 0$	30	$x^3 + 3x + 1 = 0$

16.3 РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь при використанні методів Гауса та простої ітерації.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття знаходження коренів систем лінійних алгебраїчних рівнянь;
- розглянути алгоритм методу Гауса (або, за вказівкою викладача, скласти таблицю для реалізації схеми єдиного ділення);
- скласти алгоритм методу простої ітерації, або (за вказівкою викладача) ітераційного методу Гауса-Зейделя; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.3.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати таке.

1. Знайти з точністю $\varepsilon = 0,001$ корені системи лінійних алгебраїчних рівнянь:
 - a) методом Гауса;
 - b) методом простої ітерації.
2. Перевірити отримані значення шляхом підстановки у вихідну систему рівнянь.
3. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
4. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.3.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.3.3 Варіанти індивідуальних завдань

Розв'язати систему лінійних рівнянь: виконати розрахунок методами Гауса та простої ітерації.

Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.3.1 Індивідуальні завдання

№ Вар.	Система рівнянь	№ Вар.	Система рівнянь
1	$12,500x_1 + 4,100x_2 + 0,550x_3 = 131,175$ $5,900x_1 + 19,050x_2 + 3,250x_3 = 195,175$ $3,150x_1 - 1,800x_2 - 12,000x_3 = -41,400$	16	$19,300x_1 + 5,200x_2 - 8,600x_3 = 179,700$ $7,500x_1 + 21,400x_2 + 5,350x_3 = 265,975$ $-5,000x_1 + 6,150x_2 - 13,200x_3 = -17,650$
2	$-20,300x_1 + 5,850x_2 - 7,450x_3 = -68,825$ $7,150x_1 + 17,200x_2 - 1,350x_3 = 106,025$ $-5,900x_1 - 6,900x_2 - 22,050x_3 = -240,625$	17	$-13,950x_1 - 4,700x_2 - 8,250x_3 = -99,575$ $-2,900x_1 + 9,500x_2 - 5,550x_3 = 3,575$ $-5,700x_1 + 9,400x_2 + 24,550x_3 = 1,575$
3	$16,850x_1 - 8,600x_2 - 6,300x_3 = 56,725$ $-7,800x_1 - 13,250x_2 - 2,100x_3 = -154,400$ $3,600x_1 - 8,150x_2 - 19,350x_3 = -59,075$	18	$21,450x_1 - 2,950x_2 + 9,050x_3 = 31,775$ $-1,700x_1 + 16,750x_2 + 9,850x_3 = 64,525$ $5,300x_1 + 4,300x_2 + 11,550x_3 = 52,650$
4	$-13,050x_1 + 5,800x_2 - 7,000x_3 = -167,400$ $0,750x_1 + 14,850x_2 + 5,950x_3 = 59,550$ $1,900x_1 - 5,900x_2 - 10,250x_3 = -77,050$	19	$-9,000x_1 + 2,600x_2 + 4,850x_3 = 8,950$ $3,350x_1 + 16,800x_2 - 5,600x_3 = 14,525$ $-5,250x_1 + 3,000x_2 + 11,850x_3 = 72,075$
5	$3,850x_1 - 1,600x_2 + 1,150x_3 = 26,875$ $-7,150x_1 - 11,750x_2 - 2,450x_3 = -155,475$ $3,750x_1 + 5,150x_2 + 15,100x_3 = 184,975$	20	$7,750x_1 + 6,350x_2 - 1,100x_3 = 74,475$ $1,300x_1 + 18,150x_2 - 8,150x_3 = -11,925$ $7,750x_1 - 0,050x_2 - 9,700x_3 = -26,425$
6	$13,200x_1 + 0,100x_2 - 6,850x_3 = -44,625$ $-5,950x_1 + 14,950x_2 - 7,050x_3 = 21,275$ $-5,300x_1 + 0,050x_2 + 9,350x_3 = 81,200$	21	$10,750x_1 + 1,750x_2 + 4,550x_3 = 112,500$ $-3,800x_1 + 11,200x_2 + 0,900x_3 = 66,600$ $7,100x_1 + 8,500x_2 + 25,200x_3 = 140,400$
7	$-19,000x_1 + 2,850x_2 - 8,550x_3 = -79,325$ $-9,000x_1 + 16,150x_2 - 5,350x_3 = 46,675$ $1,350x_1 - 4,050x_2 - 7,850x_3 = -47,050$	22	$11,800x_1 - 4,000x_2 - 5,650x_3 = 94,100$ $9,950x_1 - 17,950x_2 - 5,850x_3 = 13,750$ $-9,400x_1 - 4,050x_2 - 13,550x_3 = -107,525$

<i>№ Вар.</i>	<i>Система рівнянь</i>	<i>№ Вар</i>	<i>Система рівнянь</i>
8	$19,350x_1 - 5,250x_2 - 6,400x_3 = 9,000$ $2,350x_1 - 11,800x_2 + 0,250x_3 = -82,625$ $-2,800x_1 - 4,300x_2 + 7,300x_3 = -39,250$	23	$16,900x_1 - 1,250x_2 + 7,350x_3 = 73,625$ $-7,800x_1 - 19,550x_2 - 9,450x_3 = -123,575$ $-2,750x_1 - 8,150x_2 - 17,500x_3 = -69,850$
9	$12,100x_1 + 4,850x_2 - 6,050x_3 = -16,300$ $-8,050x_1 + 15,350x_2 + 4,000x_3 = 75,675$ $-3,500x_1 + 4,250x_2 + 14,100x_3 = 117,125$	24	$22,450x_1 - 9,350x_2 + 9,500x_3 = 7,675$ $-1,750x_1 + 12,300x_2 - 3,850x_3 = 68,650$ $-1,600x_1 - 3,100x_2 + 6,100x_3 = 20,150$
10	$18,900x_1 + 6,600x_2 + 5,950x_3 = 73,500$ $7,850x_1 - 11,650x_2 - 0,600x_3 = 12,100$ $2,200x_1 - 6,150x_2 - 9,500x_3 = -52,600$	25	$18,350x_1 + 6,050x_2 + 9,850x_3 = 219,225$ $7,850x_1 - 13,900x_2 + 5,200x_3 = 74,475$ $-7,600x_1 + 0,150x_2 + 15,300x_3 = 19,775$
11	$-20,000x_1 + 7,150x_2 - 3,200x_3 = -79,625$ $2,650x_1 - 9,250x_2 - 6,350x_3 = -124,375$ $6,700x_1 + 7,600x_2 - 18,800x_3 = -77,150$	26	$6,600x_1 + 2,500x_2 + 1,850x_3 = 27,400$ $3,750x_1 - 10,450x_2 - 4,700x_3 = -102,400$ $-1,900x_1 + 9,750x_2 - 16,900x_3 = 10,400$
12	$-15,400x_1 - 9,050x_2 - 3,900x_3 = -36,875$ $5,900x_1 + 15,450x_2 - 3,600x_3 = 11,725$ $-0,300x_1 + 4,500x_2 - 9,450x_3 = -31,200$	27	$-13,350x_1 - 6,950x_2 + 2,650x_3 = -117,275$ $8,500x_1 + 14,650x_2 - 0,500x_3 = 92,975$ $-7,450x_1 - 6,550x_2 + 15,350x_3 = -34,775$
13	$-10,700x_1 + 9,150x_2 - 0,750x_3 = 53,375$ $3,600x_1 + 13,150x_2 + 8,300x_3 = 95,575$ $1,850x_1 - 9,400x_2 + 15,550x_3 = -44,625$	28	$-15,350x_1 + 2,100x_2 + 7,300x_3 = -77,400$ $2,400x_1 - 12,900x_2 + 7,600x_3 = -75,900$ $-3,800x_1 - 4,300x_2 + 14,600x_3 = -52,900$
14	$16,900x_1 - 9,100x_2 - 3,450x_3 = 10,475$ $-0,500x_1 + 4,250x_2 + 3,700x_3 = 37,775$ $-7,200x_1 - 9,200x_2 + 18,550x_3 = 0,475$	29	$17,700x_1 - 2,500x_2 + 7,650x_3 = 183,850$ $-8,050x_1 + 21,000x_2 - 3,350x_3 = -72,650$ $-4,500x_1 + 4,250x_2 - 16,050x_3 = -157,775$
15	$17,750x_1 + 8,300x_2 + 4,250x_3 = 142,125$ $-3,550x_1 - 14,150x_2 - 5,200x_3 = -74,875$ $-5,850x_1 - 3,900x_2 - 19,400x_3 = -112,750$	30	$-15,500x_1 - 3,250x_2 + 2,450x_3 = -9,250$ $-9,300x_1 + 24,800x_2 + 9,550x_3 = 282,425$ $-1,300x_1 - 3,350x_2 + 12,650x_3 = 66,400$

16.4 РОЗВ’ЯЗАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв’язання систем нелінійних рівнянь при використанні методів простої ітерації та Ньютона-Рафсона.

Завдання до самостійної роботи.

- вивчити поняття знаходження коренів систем нелінійних рівнянь;
- розробити алгоритм методу простої ітерації для системи з двох нелінійних рівнянь (в текстовій або графічній формі). На підставі розробленого алгоритму скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- розробити алгоритм Ньютона-Рафсона для системи з двох нелінійних рівнянь (в текстовій або графічній формі); на підставі розробленого алгоритму скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- лістинг програм з результатами розрахунків.

16.4.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати таке.

1. Знайти початкове наближення графічним методом.
2. Знайти з точністю $\varepsilon = 0,001$ розв’язок системи нелінійних рівнянь:
 - с) методом простої ітерації;
 - д) методом Ньютона-Рафсона.
3. Перевірити отримані приблизні значення шляхом підстановки у вихідну систему рівнянь.
4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.4.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.4.3 Варіанти індивідуальних завдань

Розв'язати систему нелінійних рівнянь: виконати розрахунок методами простої ітерації та Ньютона-Рафсона. Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.4.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	Система рівнянь	Номер варіанта	Система рівнянь
1	$\begin{cases} 5 \cdot x_1 + x_2^2 = 9 \\ -3 \cdot x_1 + x_2 = -1 \end{cases}$	2	$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - x_2 = 3 \\ x_1^2 + x_2 = 5 \end{cases}$
3	$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - x_2 = 3 \\ x_1^2 + x_2 = 5 \end{cases}$	4	$\begin{cases} -4 \cdot x_1 - x_2^2 = 3 \\ x_1 + 8 \cdot x_2 = 7 \end{cases}$
5	$\begin{cases} -x_1^2 + x_1 = -8 \\ 7 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 21 \end{cases}$	6	$\begin{cases} 4 \cdot x_1^2 + x_2^2 = 5 \\ -7 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = -4 \end{cases}$
7	$\begin{cases} x_1 + x_2 = 6 \\ x_1^2 - x_2^2 = 0 \end{cases}$	8	$\begin{cases} x_1 - x_2 = -8 \\ x_1^2 + x_2^2 = 36 \end{cases}$
9	$\begin{cases} -x_1^2 + x_2^2 = -3 \\ 4 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = -11 \end{cases}$	10	$\begin{cases} x_1^2 - x_2 = 2 \\ 2 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 10 \end{cases}$
11	$\begin{cases} x_1^4 + x_2^4 = 82 \\ x_1 + x_2 = 4 \end{cases}$	12	$\begin{cases} x_1^2 - x_2^2 = 0 \\ 7 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 8 \end{cases}$
13	$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - x_2 = 3 \\ x_1^2 + x_2 = 5 \end{cases}$	14	$\begin{cases} x_1 - x_2 = -8 \\ x_1^2 + x_2^2 = 10 \end{cases}$
15	$\begin{cases} x_1^2 - x_2^2 = 0 \\ 7 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 8 \end{cases}$	16	$\begin{cases} x_1 + x_2 = 6 \\ x_1^2 - x_2^2 = 0 \end{cases}$
17	$\begin{cases} x_1 - 5 \cdot x_2 = -1 \\ x_1^2 - x_2^2 = 15 \end{cases}$	18	$\begin{cases} x_1^2 - x_2 = 2 \\ 2 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 10 \end{cases}$

<i>Номер варіанта</i>	<i>Система рівнянь</i>	<i>Номер варіанта</i>	<i>Система рівнянь</i>
19	$\begin{cases} -x_1^2 + x_2 = -8 \\ 6 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 21 \end{cases}$	20	$\begin{cases} 8 \cdot x_1 - x_2 = 7 \\ x_1 + x_2^2 = 2 \end{cases}$
21	$\begin{cases} 4 \cdot x_1^2 + x_2^2 = 5 \\ -7 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = -4 \end{cases}$	22	$\begin{cases} 8 \cdot x_1 - x_2 = 3 \\ x_1^2 + x_2 = 5 \end{cases}$
23	$\begin{cases} -4 \cdot x_1 - x_2^2 = 3 \\ x_1^2 + 8 \cdot x_2 = 7 \end{cases}$	24	$\begin{cases} 20 \cdot x_1 - 10 \cdot x_2 = 30 \\ 10 \cdot x_1^2 + 10 \cdot x_2 = 50 \end{cases}$
25	$\begin{cases} 5 \cdot x_1 + x_1^2 = 9 \\ -3 \cdot x_1 - x_2 = -1 \end{cases}$	26	$\begin{cases} 2 \cdot x_1^2 + x_2^2 = 3 \\ 3 \cdot x_1 + x_2 = 4 \end{cases}$
27	$\begin{cases} x_1^3 + x_2^3 = 9 \\ x_1 \cdot x_2 = 2 \end{cases}$	28	$\begin{cases} x_1 - 5 \cdot x_2 = -1 \\ x_1^2 - x_2^2 = 15 \end{cases}$
29	$\begin{cases} 2 \cdot x_1 - 3 = 2 \\ x_1^2 - x_2 = 14 \end{cases}$	30	$\begin{cases} 8 \cdot x_1 - x_2 = 7 \\ x_1 + x_2^2 = 2 \end{cases}$

16.5 ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання наближеного значення табличної функції в точках, відмінних від вузлових, за допомогою інтерполяційних формул Лагранжа і Ньютона. Набути вмінь проведення інтерполяційних та екстраполяційних розрахунків.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити інтерполяційні формули Лагранжа і Ньютона; поняття інтерполяції та екстраполяції, кінцевих різниць і зворотної інтерполяції; розглянути визначення похибок інтерполяційних формул.
- скласти алгоритм розрахунку значень функцій за формулою Лагранжа; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.5.1 Послідовність виконання практикуму

1. Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати інтерполяцію й обернену інтерполяцію таблично заданої функції в зазначених точках з використанням інтерполяційних формул Лагранжа й Ньютона.
2. Набрати та відлагодити програму для обчислення значень функції за інтерполяційною формулою Лагранжа. За допомогою отриманої програми отримати значення функції у вказаних точках.
3. Адаптувати та застосувати розроблену програму для розв'язання завдання оберненої інтерполяції.
4. Побудувати горизонтальну таблицю скінченних різниць в середовищі MS Excel.
5. Виконати інтерполяцію й обернену інтерполяцію (з точністю $\varepsilon=0,001$)

таблично заданої функції в зазначених точках з використанням інтерполяційних формул Ньютона виконати в середовищі MS Excel.

6. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
7. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.5.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.5.3 Варіанти індивідуальних завдань

За даними, наведеними в таблиці 16.5.1 (індивідуальні варіанти № 1- 15), що виражають залежність тиску насиченої водяної пари (P) від температури (t), знайти:

- а) тиск p при заданій в таблиці 16.5.2 температурі t ;
- б) температуру t , при якій тиск приймає задане в таблиці 16.5.2 значення p .

Таблиця 16.5.1 Вихідні дані

№1		№2		№3		№4		№5	
t	p	t	p	t	p	t	p	t	p
5,5	6,61	40,5	55,87	15,5	12,91	10,5	9,31	35,5	42,59
10,5	9,30	45,5	72,60	20,5	17,71	15,5	12,93	40,5	55,86
15,5	12,92	50,5	93,44	25,5	23,99	20,5	17,73	45,5	72,59
20,5	17,72	55,5	119,18	30,5	32,13	25,5	24,01	50,5	93,43
25,5	24,00	60,5	150,89	35,5	42,59	30,5	32,15	55,5	119,16

№6		№7		№8		№9		№10	
t	p	t	p	t	p	t	p	t	p
20,5	17,70	45,5	72,61	30,5	32,14	15,5	12,94	25,5	24,00
25,5	23,98	50,5	93,45	35,5	42,60	20,5	17,74	30,5	32,14
30,5	32,12	55,5	119,19	40,5	55,87	25,5	24,02	35,5	42,60
35,5	42,58	60,5	150,90	45,5	72,60	30,5	32,16	40,5	55,87
40,5	55,85	65,5	189,39	50,5	93,44	35,5	42,61	45,5	72,60
№11		№12		№13		№14		№15	
t	p	t	p	t	p	t	p	t	p
10,5	9,32	35,5	42,58	20,5	17,75	45,5	72,63	15,5	12,96
15,5	12,94	40,5	55,85	25,5	24,03	50,5	93,47	20,5	17,76
20,5	17,74	45,5	72,58	30,5	32,17	55,5	119,21	25,5	24,04
25,5	24,02	50,5	93,41	35,5	42,59	60,5	150,92	30,5	32,18
30,5	32,16	55,5	119,15	40,5	55,86	65,5	189,41	35,5	42,60

Таблиця 16.5.2 Індивідуальні завдання

Номер завдання	Температура (t)			Тиск (P)	Номер завдання	Температура (t)			Тиск (P)
1	4,5	6,5	24,5	8,44	9	13,5	16,5	37,5	14,45
2	41,5	59,5	61,5	62,79	10	27,5	43,5	48,5	26,44
3	14,5	17,5	34,5	53,00	11	18,5	9,5	32,5	11,36
4	11,5	29,5	31,5	10,42	12	44,5	54,5	57,5	48,75
5	33,5	36,5	49,5	50,78	13	21,5	38,5	41,5	20,56
6	26,5	39,5	42,5	18,81	14	52,5	64,5	68,5	84,56
7	47,5	63,5	67,5	82,36	15	12,5	21,5	36,5	15,39
8	38,5	27,5	51,5	37,63					

За даними, наведеними в таблиці 16.5.3 (індивідуальні варіанти № 16-30), що виражають залежність в'язкості (η) води від температури (t), знайти:

а) в'язкість води η при вказаних в таблиці 16.5.4 значеннях температури t ;

б) температуру t , при якій в'язкість води приймає задане в таблиці 16.5.4 значення η .

Таблиця 16.5.3 Вихідні дані

№16		№17		№18		№19		№20	
t	η	t	η	t	η	t	η	t	η
4,5	1,575	19,5	1,035	10,5	1,313	7,5	1,432	13,5	1,211
7,5	1,435	22,5	0,963	13,5	1,207	10,5	1,312	16,5	1,119
10,5	1,315	25,5	0,895	16,5	1,115	13,5	1,207	19,5	1,037
13,5	1,209	28,5	0,831	19,5	1,033	16,5	1,114	22,5	0,965
16,5	1,117	31,5	0,769	22,5	0,961	19,5	1,032	25,5	0,897

№21		№22		№23		№24		№25	
t	η	t	η	t	η	t	η	t	η
16,5	1,120	7,5	1,438	13,5	1,204	19,5	1,041	10,5	1,309
19,5	1,039	10,5	1,318	16,5	1,112	22,5	0,969	13,5	1,204
22,5	0,967	13,5	1,212	19,5	1,030	25,5	0,901	16,5	1,111
25,5	0,899	16,5	1,120	22,5	0,958	28,5	0,837	19,5	1,030
28,5	0,835	19,5	1,039	25,5	0,890	31,5	0,775	22,5	0,957
№26		№27		№28		№29		№30	
t	η	t	η	t	η	t	η	t	η
13,5	1,212	19,5	1,031	4,5	1,578	16,5	1,121	7,5	1,433
16,5	1,120	22,5	0,959	7,5	1,438	19,5	1,040	10,5	1,313
19,5	1,038	25,5	0,891	10,5	1,318	22,5	0,968	13,5	1,208
22,5	0,966	28,5	0,827	13,5	1,212	25,5	0,900	16,5	1,115
25,5	0,898	31,5	0,765	16,5	1,120	28,5	0,836	19,5	1,033

Таблиця 16.5.4 Індивідуальні завдання

Номер завдання	Температура (t)			В'язкість води (η)	Номер завдання	Температура (t)			В'язкість води (η)
16	3,5	5,5	15,5	1,422	24	20,5	33,5	27,5	0,992
17	23,5	30,5	32,5	0,977	25	9,5	15,5	23,5	1,240
18	18,5	24,5	9,5	1,271	26	14,5	17,5	24,5	1,154
19	8,5	6,5	20,5	1,383	27	21,5	18,5	30,5	1,010
20	11,5	21,5	26,5	1,174	28	2,5	8,5	17,5	1,534
21	17,5	14,5	29,5	1,088	29	24,5	30,5	15,5	1,097
22	12,5	9,5	18,5	1,409	30	8,5	20,5	6,5	1,410
23	27,5	20,5	14,5	1,181					

16.6 НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЇ СПЛАЙНАМИ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити процес побудови кубічних сплайнів для наближення експериментальних даних.

Підготовка до роботи.

Під час самостійної роботи перед виконанням завдань:

- вивчити поняття сплайну, математичну постановку завдання сплайн-інтерполяції;
- розробити алгоритм методу прогонки для знаходження коефіцієнтів кубічного сплайну; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.6.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) здійснити таке.

1. Набрати та відлагодити програмний код для обчислення значень функції за кубічним сплайном (за вказівкою викладача).
2. Виконати інтерполяцію кубічним сплайном функції, заданої таблично (таблиця 16.6.1) в зазначених точках (таблиця 16.6.1). Розрахунки виконати в MS Excel або (за вказівкою викладача) за допомогою створеної програми.
3. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
4. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.6.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету

комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.6.3 Варіанти індивідуальних завдань

За наданими у нижченаведеній таблиці даними побудувати кубічний сплайн $y=f(x)$. Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.6.1 Вихідні дані

Вар. № 1		Вар. № 2		Вар. № 3		Вар. № 4	
x	y	x	y	x	y	x	y
174	76,75	162	76,66	178	76,77	165	76,42
192	81,48	190	81,54	186	80,77	192	81,34
214	84,24	213	84,39	199	84,62	197	84,12
219	85,61	235	85,56	220	85,53	229	85,46
260	90,22	243	88,96	249	89,48	247	88,96
284	92,19	273	92,29	283	90,71	266	91,61
311	94,84	290	95,17	298	95,25	291	95,42
Вар. № 5		Вар. № 6		Вар. № 7		Вар. № 8	
x	y	x	y	x	y	x	y
176	76,37	171	76,83	166	76,42	175	76,83
187	81,31	192	81,18	178	81,84	192	81,22
212	84,95	211	85,28	196	84,46	208	84,93
219	84,53	223	85,12	216	85,4	219	84,84
248	89,64	245	89,44	258	90,02	260	89,25
266	91,97	269	92,04	278	90,85	269	91,61
301	94	290	94,22	288	95,3	312	94,71
Вар. № 9		Вар. № 10		Вар. № 11		Вар. № 12	
x	y	x	y	x	y	x	y
166	76,39	166	77,48	167	76,58	169	77,81
180	80,99	178	81,04	193	81,4	176	81,97
212	84,1	207	84,5	202	83,71	197	85,22
224	85,05	220	84,89	232	85,03	219	85,89
257	89,78	241	89,26	256	89,14	237	90,08
283	91,96	267	92,37	268	91,35	280	90,93
291	95,6	301	95,33	310	94,93	294	95,13

Bap. № 13		Bap. № 14		Bap. № 15		Bap. № 16	
x	y	x	y	x	y	x	y
162	76,44	172	76,68	169	77,81	166	76,42
192	81,15	175	81,22	176	81,97	178	81,84
210	84,88	200	84,04	197	85,22	196	84,46
229	84,43	226	85,08	219	85,89	216	85,4
261	89,91	253	88,64	237	90,08	258	90,02
283	91,28	289	90,75	280	90,93	278	90,85
305	95,52	313	95,3	294	95,13	288	95,3
Bap. № 17		Bap. № 18		Bap. № 19		Bap. № 20	
x	y	x	y	x	y	x	y
172	77,33	177	77,69	174	77,33	169	77,81
190	81,78	180	81,83	185	81,69	183	81,05
198	83,82	208	85,14	199	85,33	214	84,64
227	84,44	231	85,51	228	84,34	233	84,56
254	89,25	257	89,19	244	89,19	244	89,61
283	90,68	277	91,31	266	92,12	292	92,21
296	94,32	304	95,24	292	95,7	307	95,05
Bap. № 21		Bap. № 22		Bap. № 23		Bap. № 24	
x	y	x	y	x	y	x	y
173	76,47	174	76,95	170	77,84	172	77
178	81,04	188	82,12	181	81,24	178	82,03
197	83,67	207	83,82	208	85,27	199	84,15
220	85,03	214	85,1	217	84,91	217	85,7
258	89,88	238	89,71	247	88,83	255	89,92
276	91,15	291	92,49	286	94,07	274	92,14
297	94,78	309	93,93	290	91,63	304	95,26
Bap. № 25		Bap. № 26		Bap. № 27		Bap. № 28	
x	y	x	y	x	y	x	y
174	77,65	170	76,34	176	76,84	162	76,4
184	81,8	178	82,07	189	82,11	179	81,77
200	84,76	206	85,32	206	84,78	202	84,29
224	84,93	218	84,26	230	85,66	220	85,68
253	89,7	251	88,55	260	88,64	241	89,28
292	92,47	283	92,38	292	91,02	283	91,33
298	95,44	295	95,03	293	95,01	309	95,59

Вар. № 29		Вар. № 30	
х	у	х	у
164	77,5	168	77,79
181	81,64	178	80,8
210	83,32	203	84,48
224	85,96	232	84,76
261	89,99	241	88,89
284	90,98	273	90,83
293	94,06	314	93,98

Таблиця 16.6.2 Індивідуальні завдання

Вар. № 1	Вар. № 2	Вар. № 3	Вар. № 4
х	х	х	х
180	175	190	170
200	200	220	210
260	273	290	247
Вар. № 5	Вар. № 6	Вар. № 7	Вар. № 8
х	х	х	х
210	190	180	180
248	211	250	220
279	270	278	260
Вар. № 9	Вар. № 10	Вар. № 11	Вар. № 12
х	х	х	х
180	178	193	190
220	201	210	196
280	270	270	280
Вар. № 13	Вар. № 14	Вар. № 15	Вар. № 16
х	х	х	х
170	180	180	200
210	200	219	216
290	300	290	275
Вар. № 17	Вар. № 18	Вар. № 19	Вар. № 20
х	х	х	х
190	190	190	183
200	208	199	200
250	290	275	290
Вар. № 21	Вар. № 22	Вар. № 23	Вар. № 24
х	х	х	х
183	188	170	172
220	220	181	178
270	300	286	304

Bap. № 25	Bap. № 26	Bap. № 27	Bap. № 28
x	x	x	x
183	183	183	183
200	218	230	220
285	290	275	300
Bap. № 29	Bap. № 30		
x	x		
183	183		
210	232		
280	300		

16.7 ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання наближеного значення першої та другої похідних від табличної функції в заданих точках за допомогою формул, що отримані на основі інтерполяційних формул Лагранжа і Ньютона. Набути вмінь використання формул чисельного диференціювання для визначення похідних.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити формули чисельного диференціювання, що отримані на основі інтерполяційних формул Ньютона і Лагранжа; розглянути особливості визначення похибок формул чисельного диференціювання;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.7.1 Послідовність виконання практикуму

1. Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) визначити першу та другу похідні від таблично заданої функції в зазначених точках з використанням формул, що отримані на основі інтерполяційних формул:
 - а) Лагранжа;
 - б) Ньютона.
2. Розрахунки похідних виконати в середовищі MS Excel.
3. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
4. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.7.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму: розрахунки в середовищі MS Excel.

16.7.3 Варіанти індивідуальних завдань

За даними, наведеними в таблиці 16.7.1, що виражають залежність величини y від величини x , знайти значення першої і другої похідних з використанням формул чисельного диференціювання на основі інтерполяційних формул Лагранжа і Ньютона в заданих точках (таблиця 16.7.2):

Таблиця 16.7.1 Вихідні дані

№ 1		№ 2		№ 3		№ 4		№ 5	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
24	102,53	22	85,44	22	69,67	24	15,33	14	6,15
34	314,63	29	202,38	25	106,61	27	20,69	19	11,60
44	711,01	36	395,18	28	154,66	30	27,18	24	19,05
54	1350,94	43	683,30	31	215,29	33	34,95	29	28,81
64	2294,91	50	1086,45	34	289,99	36	44,16	34	41,30
№ 6		№ 7		№ 8		№ 9		№ 10	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
24	102,53	4	-0,21	24	93,14	33	34,95	33	38,56
27	150,29	14	20,11	27	137,32	40	58,93	37	50,29
30	210,96	24	112,23	30	193,59	47	92,83	41	64,26
33	286,10	34	331,23	33	263,43	54	139,06	45	80,77
36	377,29	44	733,38	36	348,34	61	200,31	49	100,16

№ 11		№ 12		№ 13		№ 14		№ 15	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
19	47,39	32	274,60	11	5,55	30	27,18	0	-0,30
28	169,00	39	505,85	14	14,28	31	29,62	5	0,63
37	411,52	46	840,83	17	28,78	32	32,21	10	3,06
46	817,59	53	1299,40	20	50,48	33	34,95	15	7,09
55	1430,65	60	1901,71	23	80,84	34	37,85	20	12,92
№ 16		№ 17		№ 18		№ 19		№ 20	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
26	133,02	44	733,38	31	215,29	20	9,73	40	60,54
35	345,01	54	1376,17	32	238,55	21	10,98	49	100,16
44	711,01	64	2318,28	33	263,43	22	12,32	58	156,22
53	1274,28	74	3619,58	34	289,99	23	13,77	67	233,38
62	2078,85	84	5341,15	35	318,27	24	15,33	76	337,13
№ 21		№ 22		№ 23		№ 24		№ 25	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
38	447,78	1	-0,40	27	137,32	33	34,95	38	53,56
46	817,59	8	2,78	28	154,66	34	37,85	47	90,09
54	1350,94	15	25,19	29	173,40	35	40,92	56	142,11
62	2078,85	22	85,44	30	193,59	36	44,16	65	214,14
70	3032,84	29	202,38	31	215,29	37	47,57	74	311,47
№ 26		№ 27		№ 28		№ 29		№ 30	
x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
37	411,52	26	144,10	30	193,59	2	-0,20	36	47,16
47	874,69	32	274,60	31	215,29	7	0,68	39	56,98
57	1599,43	38	466,92	32	238,55	12	2,80	42	68,14
67	2646,58	44	733,38	33	263,43	17	6,53	45	80,77
77	4078,19	50	1086,45	34	289,99	22	12,32	48	95,03

Таблиця 16.7.2 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	x			
1	34,0	35,0	44,0	54,0
2	29,0	33,3	42,8	43,0
3	25,0	27,2	29,3	31,0
4	27,0	28,3	31,1	33,0
5	19,0	21,0	26,7	29,0
6	27,0	27,2	32,3	33,0
7	14,0	18,9	31,8	34,0
8	27,0	27,1	31,9	33,0
9	40,0	46,0	53,4	54,0
10	37,0	37,4	43,1	45,0
11	28,0	34,5	37,7	46,0
12	39,0	40,0	48,5	53,0
13	14,0	16,6	17,1	20,0
14	31,0	31,5	32,1	33,0
15	5,0	5,9	12,0	15,0
16	35,0	40,7	50,1	53,0
17	54,0	62,0	69,0	74,0
18	32,0	32,9	33,2	34,0
19	21,0	21,5	22,3	23,0
20	49,0	52,2	66,7	67,0
21	46,0	49,7	59,9	62,0
22	8,0	13,2	20,5	22,0
23	28,0	28,2	29,5	30,0
24	34,0	34,5	35,9	36,0
25	47,0	52,8	58,6	65,0
26	47,0	47,6	59,7	67,0
27	32,0	36,4	40,7	44,0
28	31,0	31,4	32,8	33,0
29	7,0	9,0	12,4	17,0
30	39,0	40,0	42,2	45,0

16.8 ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання визначених інтегралів за допомогою формул чисельного інтегрування. Набути вмінь застосування формул чисельного інтегрування для різного способу завдання підінтегральних функцій.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити формули методів прямокутників, трапецій і Сімпсона для розрахунку значень визначених інтегралів; розглянути особливості визначення похибок вказаних методів;
- скласти алгоритм застосування методу подвійного перерахунку для знаходження значень визначених інтегралів за розглянутими методами із заданим ступенем точності;
- використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередні варіанти програм (за вказівкою викладача);
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.8.1 Послідовність виконання практикуму

1. Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) із заданою точністю знайти величину визначеного інтеграла за двома методами відповідно вказівки викладача (наприклад, з використанням формул трапецій і Сімпсона).
2. Набрати та відлагодити програму, що реалізує розрахунки значень визначеного інтеграла з заданою точністю за формулами трапецій і Сімпсона.
3. Отримати значення визначеного інтеграла за формулами трапецій і Сімпсона з заданою точністю ($\epsilon=0,001$).

4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.8.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.8.3 Варіанти індивідуальних завдань

Обчислити інтеграл за формулами чисельного інтегрування, вказаними викладачем. Значення інтеграла знайти з точністю до $\varepsilon = 0,001$. Використати метод подвійного перерахунку.

Таблиця 16.8.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	Інтеграл	Номер варіанта	Інтеграл
1	$\int_0^1 0,37 \cdot e^{\sin x} dx$	16	$\int_0^{1,5} x^2 \sqrt{1+x^5} dx$
2	$\int_1^2 (0,5 + x \cdot \lg x) dx$	17	$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{2+x^3}} dx$
3	$\int_1^2 (x + 1,9) \cdot \sin\left(\frac{x}{3}\right) dx$	18	$\int_{1,2}^2 \frac{\lg(x+2)}{x} dx$
4	$\int_2^3 \frac{1}{x} \cdot \ln(x+2) dx$	19	$\int_{0,4}^{1,2} \sqrt{x} \cos(x^2) dx$
5	$\int_0^1 \frac{3 \cos x}{2x + 1,7} dx$	20	$\int_{0,6}^{1,4} \frac{\cos x}{x+1} dx$

Номер варіанта	Інтеграл	Номер варіанта	Інтеграл
6	$\int_{1,2}^{2,2} 2,6x^2 \ln x \, dx$	21	$\int_{0,6}^{1,4} x^2 \cos x \, dx$
7	$\int_{1,2}^{2,2} 2,6x^2 \ln x \, dx$	22	$\int_{1,2}^2 \frac{\lg(x^2 + 3)}{2x} \, dx$
8	$\int_{0,2}^{1,2} 3xe^{\cos x} \, dx$	23	$\int_{1,6}^{3,2} \frac{x}{2} \lg \frac{x^2}{2} \, dx$
9	$\int_{0,1}^{1,1} \sqrt{x} \cdot e^{-x} \, dx$	24	$\int_{0,2}^{1,8} \sqrt{x+1} \cos(x^2) \, dx$
10	$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^3}$	25	$\int_{0,6}^{0,72} (\sqrt{x} + 1) \operatorname{tg} 2x \, dx$
11	$\int_1^2 \frac{\sqrt{x^2 - 1}}{x^4} \, dx$	26	$\int_1^5 \frac{2x \, dx}{1+x^4}$
12	$\int_0^1 \frac{e^{-x}}{\sqrt{1+x}} \, dx$	27	$\int_2^3 \frac{x \, dx}{\sqrt{x^2 + 1} + \sqrt{5x + 2}}$
13	$\int_0^1 \frac{xe^{-x}}{1+x^2} \, dx$	28	$\int_1^5 \frac{dx}{5x + x^2}$
14	$\int_1^6 \sqrt{2x - 3} \, dx$	28	$\int_0^2 \sqrt{8x^4 + 2x - 1} \, dx$
15	$\int_1^2 x(1 - x^2)^4 \, dx$	30	$\int_0^2 (e^x + 1) \, dx$

16.9 ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОШІ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв'язання звичайних диференціальних рівнянь з початковою умовою при використанні методів Ейлера та Рунге-Кутти.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття числового інтегрування звичайних диференціальних рівнянь, формули Ейлера та Рунге-Кутти;
- розробити алгоритм методу Ейлера (в текстовій або графічній формі); на підставі розробленого алгоритму скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- розробити алгоритм методу Рунге-Кутти четвертого порядку (в текстовій або графічній формі); на підставі розробленого алгоритму скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.9.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати таке.

1. Знайти чисельний розв'язок заданої задачі Коші за методом Ейлера в середовищі MS Excel (за вказівкою викладача – із використанням розробленої програми).
2. Знайти чисельний розв'язок заданої задачі Коші за методом Рунге-Кутти середовищі MS Excel (за вказівкою викладача – із використанням розробленої програми).
3. Побудувати в середовищі MS Excel графіки табличних функцій, отриманих за методами Ейлера та Рунге-Кутти (за вказівкою викладача).

4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.9.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.9.3 Варіанти індивідуальних завдань

Розв'язати звичайне диференціальне рівняння із заданими початковими умовами на відрізку $[0,1]$ з кроком $h = 0,1$ з використанням:

- а) чисельного методу Ейлера;
- б) чисельного методу Рунге-Кутти.

Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.9.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	Рівняння	Початкові умови	Номер варіанта	Рівняння	Початкові умови
1	$y' = 0,9x + y^2$	$y = 0,6$ при $x=0$	2	$y' = 2,3x + 0,1y^2$	$y = 0,4$ при $x=0$
3	$y' = 1,8x + 1,1y^2$	$y = 0,2$ при $x=0$	4	$y' = 0,7x^2 + 0,9yx$	$y = 0,3$ при $x=0$
5	$y' = 0,3x + 1,2y^2$	$y = 0,1$ при $x=0$	6	$y' = 0,9x^2 + 1,2y$	$y = 0,5$ при $x=0$
7	$y' = 0,8x + 2,1y$	$y = 0,3$ при $x=0$	8	$y' = 1,1xy + y^2$	$y = 0,2$ при $x=0$
9	$y' = 0,9x^2 + y^2$	$y = 0,7$ при $x=0$	10	$y' = x^2 + 0,3y^2$	$y = 0,6$ при $x=0$
11	$y' = 0,4x + 0,9y^2$	$y = 0,5$ при $x=0$	12	$y' = 0,2x + 0,1y^2$	$y = 0,3$ при $x=0$

Номер варіанта	Рівняння	Початкові умови	Номер варіанта	Рівняння	Початкові умови
13	$y' = 1,1x + 0,2y^2$	$y = 0,4$ при $x=0$	14	$y' = 2,1x^2 + yx$	$y = 0,7$ при $x=0$
15	$y' = 0,2x^2 + 1,5yx$	$y = 0,8$ при $x=0$	16	$y' = 0,8x^2 + 0,2yx$	$y = 0,4$ при $x=0$
17	$y' = 2x^2 + 0,3xy$	$y = 0,3$ при $x=0$	18	$y' = 1,2x^2 + 2xy$	$y = 0,2$ при $x=0$
19	$y' = 0,7x^2 + 0,1y^2$	$y = 0,6$ при $x=0$	20	$y' = 2,2x^2 + 2,7y^2$	$y = 0,1$ при $x=0$
21	$y' = 0,3x^2 + 0,6y^2$	$y = 0,7$ при $x=0$	22	$y' = 0,4x^2 + 0,1y^2$	$y = 0,5$ при $x=0$
23	$y' = 0,8xy + 0,2y^2$	$y = 0,3$ при $x=0$	24	$y' = 0,5xy + y^2$	$y = 0,4$ при $x=0$
25	$y' = 1,4xy + 0,1y^2$	$y = 0,2$ при $x=0$	26	$y' = 0,3xy + 2y^2$	$y = 0,4$ при $x=0$
27	$y' = 0,1xy + 0,4y^2$	$y = 0,8$ при $x=0$	28	$y' = 0,5x^2 + 1,6y^2$	$y = 0,3$ при $x=0$
29	$y' = 3,2x + 0,1y^2$	$y = 0,4$ при $x=0$	30	$y' = 0,1x + 2,8y^2$	$y = 0,1$ при $x=0$

16.10 РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв'язання лінійної крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь при використанні методів скінченних різниць та прогонки.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття крайової задачі для диференціальних рівнянь, принципи методів скінченних різниць та прогонки;
- скласти алгоритм методу скінченних різниць; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- скласти алгоритм методу прогонки з використанням підпрограми розв'язання системи лінійних рівнянь за методом Томаса; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу (або, за вказівкою викладача, скласти таблицю для реалізації схеми прогонки).
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.10.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) на заданому відрізку знайти чисельне розв'язання звичайного диференціального рівняння, яке задовольняло б наданим граничним умовам:

1. Знайти розв'язок рівняння методом скінченних різниць з кроком $h = 0,1$ на відрізку $[a, b]$.
2. Знайти розв'язок рівняння методом прогонки з кроком $h = 0,05$ на відрізку $[a, b]$.

3. Побудувати графік табличних функцій, отриманих за методами скінченних різниць та прогонки, в середовищі MS Excel (за вказівкою викладача).
4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.10.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.10.3 Варіанти індивідуальних завдань

Згідно індивідуального завдання (таблиця 16.10.1), на відрізку $[a, b]$ отримати чисельне розв'язання заданого диференційного рівняння $y'' + p(x) \cdot y' + q(x) \cdot y = f(x)$, яке задовольняло б граничним умовам:

$$\begin{cases} \alpha_0 \cdot y(a) + \alpha_1 \cdot y'(a) = A \\ \beta_0 \cdot y(b) + \beta_1 \cdot y'(b) = B. \end{cases}$$

Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.10.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	$p(x)$	$q(x)$	$f(x)$	α_0	α_1	β_0	β_1	A	B	a	b
1	$0,5 + \sin^2 X$	$2(1 + X^2)$	$10(1 + \sin^2 X)$	1	-0,4	0	1	0,9	1,8	1,3	1,6
2	e^{-x^2}	$5(2 + \sin 2x)$	$e^x(1 + \sin 2x)$	1	0,8	1	0	2,2	0,9	1,5	1,8
3	$e^{-(x^2+1)}$	$10(1 + e^{-x})$	$e^{2,5}(0,5 + x)$	1	0	0,3	-1	1,2	1,1	0,5	0,8

Номер варіанта	$p(x)$	$q(x)$	$f(x)$	α_0	α_1	β_0	β_1	A	B	a	b
4	e^{-2x}	$16/(1+x^2)$	$e^{3x}(2 - x^2)$	1	0	1,9	- 0,7	0,8	3,2	1,6	1,9
5	$\ln(1+x)$	$10/(1+x)$	$x+9/(1+x)$	0,4	- 0,9	0	1,1	1,4	0,3	0,1	0,4
6	$\cos^2(x)$	$\frac{10}{1+\sin^2(x)}$	$e^{0,5x}(12 - x^2)$	1,5	0,6	0	0,9	2,1	2,4	1,2	1,5
7	$\ln(1+x^2)$	$\frac{e^{-x}(8+x^2)}{x^2+1}$	$8-x^2$	0	1,1	1	2	1,1	1,1	0,9	1,2
8	$1+\cos^2(x)$	x^2+1	$(x^2+1)\cos(x)$	0	1,2	1,8	- 0,9	0,7	1,8	1,1	1,4
9	$0,5(1,5 - x^2)$	$e^x(4-x)$	$5x^2e^{-x}$	1,3	- 0,8	2,1	0	0,4	0,2	1,2	1,5
10	$\sin(2x)$	$8(1+\sin^2 x)$	$10\cos x$	0,6	1,0	1,0	0	1	0,8	0,8	1,1
11	$0,25(1 - x^2)$	$5(1+\cos^2(x))$	$15\cos x$	0,9	0	1,0	2,8	0,5	1,3	0,6	0,9
12	$-0,5 + \sin x$	$\frac{8}{1+0,25x^2}$	$5(1-x^2)$	1,1	- 0,6	0,9	0	2,2	0,9	1	1,3
13	$\sin(x-2)$	$5(\frac{x+1}{x})$	8	1,0	2,0	0	1	1	1,2	0,4	0,7
14	$\frac{1}{(1+x^2)}$	$10-x$	$e^{1,5x}(1+x^2)$	0,8	0	0,4	- 0,9	1,8	0,8	0,1	0,4
15	$0,5e^x$	$10(1+\sin^2 x)$	12	0	1,1	1,0	- 0,5	0,8	1	0,5	0,8
16	$0,5(1 - 0,4x^2)$	$e^{-x}(9+x)$	$10\sin x$	0,8	- 0,3	0	0,8	1,8	3,8	1	1,3
17	$0,5\sin x$	$7(1+\sin^2 x)$	$6(1+x^2)$	1,0	0	1,0	2	2	0,7	0,4	0,7
18	$0,4\sqrt{1+x^2}$	$4(1+x^2)$	$20e^{-x}$	0	0,9	1,9	- 0,9	0,9	0,4	1,1	1,4
19	$0,3\sqrt{4-x^2}$	$5(1+x^2)$	$8e^{0,5x}$	1,0	2,0	1,0	0	0,6	1	0,9	1,2
20	$\frac{0,5}{(1+x^2)}$	$7(1+\sin^2 x)$	$\frac{20}{(1+0,5x^2)}$	2,1	- 1,1	0	0	1,1	3,1	1,2	1,5
21	$\sin x$	$4(1+x^2)$	$6e^{0,5x}$	2,0	1,0	1,0	1	1	2	0,3	0,6
22	$\sin x$	$6\sqrt{1+x^2}$	$7(1+\sin^2 x)$	1,1	0	1,1	2,1	1,3	1,5	0,4	0,7
23	$\cos x$	$5(1+\cos^2 x)$	$\frac{10}{(1+0,5x^2)}$	0	0,9	1,9	0,9	1,4	2,9	0,7	1,0
24	$\cos x$	$5(1+\sin^2 x)$	$4e^{0,5x}$	2,0	- 1,0	1,0	0	1	3	0,5	0,8
25	e^{-x}	$8(1+\sin^2 x)$	$20-x^2$	0	1,0	0,5	1,1	1,2	1,9	0,6	0,9
26	$0,5e^x$	$5(1+\sin^2 x)$	$5e^{-0,5x}$	0	1,2	0,3	- 0,9	1,2	1,2	2,1	2,4
27	$\frac{2}{(1+x^2)}$	$2-x$	$e^{1,5x}(1+x^2)$	0,9	- 0,2	0	1	0,6	1,7	0,6	0,9

Номер варіанта	$p(x)$	$q(x)$	$f(x)$	α_0	α_1	β_0	β_1	A	B	a	b
28	$\ln(x + 1)$	$\frac{5}{(1 + x)}$	$\frac{5}{(1 + x)}$	1,2	1,4	0	1,1	2,2	1,1	1,6	1,9
29	$5 \sin x$	$5(1 + x^2)$	$5e^{0,5x}$	1,1	0	2,9	- 0,4	1,7	1,2	0,9	1,2
30	$0,5\sqrt{1 + x^2}$	$5(1 + x^2)$	$10e^{-x}$	1,0	0	2,1	1	0,5	1,8	1,7	2,0

16.11 ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити процес отримання розв'язку диференціальних рівнянь у частинних похідних скінченно-різницеvim методом сіток на прикладі рівняння параболічного типу.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття диференціальних рівнянь у частинних похідних, класифікацію диференціальних рівнянь другого порядку у частинних похідних, крайових задач для диференційних рівнянь у частинних похідних, принципи скінченно-різницевого методу сіток;
- скласти алгоритм реалізації методу сіток за явною та неявною схемою; використовуючи розроблений алгоритм, скласти попередній варіант програми для реалізації методу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.11.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта), знайти чисельне розв'язання диференційного рівняння параболічного типу (рівняння теплопровідності):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

яке задовільняло б наданим граничним умовам:

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= f(x), x \in [0; 0,5], \\ T(0, t) &= \varphi(t), T(0,5, t) = \psi(t), t \in [0; 0,01], \end{aligned} \quad (16.1)$$

де t, x – незалежні змінні інтегрування, $T = T(t, x)$ – шукана функція температура, $\alpha = 1$ – константа, що описує швидкість поширення тепла, $f(x)$, $\varphi(t)$, $\psi(t)$ – функції, які задані варіантами індивідуальних завдань (таблиця 16.11.1):

1. Знайти розв’язок рівняння методом сіток із параметрами кроку сітки $h = 0,1$ та $\sigma = 1/6$.
2. Побудувати графік двовимірної табличної функції (поверхню), отриманої за методами сіток, в середовищі MS Excel (за вказівкою викладача).
3. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
4. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.11.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп’ютерного практикуму має включати тему, мету комп’ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків у середовищі MS Excel;
- лістинги програм та результати розрахунків за програмами.

16.11.3 Варіанти індивідуальних завдань

Отримати чисельний розв’язок заданого диференційного рівняння, яке задовольняє граничним умовам (16.1).

Всі розрахунки вести з чотирма десятковими знаками.

Таблиця 16.11.1 Індивідуальні завдання

Номер варіанта	$f(t)$	$\varphi(t)$	$\psi(t)$
1	$2 \cdot x \cdot (1 - x) + 0,14$	$3 \cdot (0,07 + t)$	$0,64$
2	$x \cdot (1 + x)$	$1,2 \cdot t$	$0,75 + 2 \cdot t$
3	$4 \cdot x \cdot (3 - x)$	$0,6 \cdot t$	$5,00 + t$
4	$1,8 \cdot x \cdot (0,7 - x) + 0,25$	$0,25$	$0,43 + 0,8 \cdot t$
5	$1,5 \cdot x \cdot (0,9 - x) + 0,80$	$2 \cdot (0,40 - 3 \cdot t)$	$1,10 + 2 \cdot t$
6	$x \cdot (0,8 - x) + 0,70$	$0,70$	$0,85 + t$
7	$-x \cdot (1,1 - x) + 1,60$	$2 \cdot (0,80 - t)$	$1,30 + 0,4 \cdot t$
8	$x \cdot (0,4 + 2,4 \cdot x)$	$0,4 \cdot t$	$0,80 + 5,6 \cdot t$
9	$x \cdot (2,1 + 1,3 \cdot x) + 0,40$	$(4,4 + t)^2$	$1,775 + t$
10	$2,4 \cdot x \cdot (1 - x) + 0,30$	$2 \cdot (0,15 + t)$	$3 \cdot (0,30 + 0,2 \cdot t)$
11	$1,8 \cdot x \cdot (0,6 + x) + 0,70$	$2 \cdot (0,35 + t)$	$1,69 + t$
12	$-0,2 \cdot x \cdot (0,8 - x) + 2,90$	$2 \cdot (1,45 + t)$	$2,87 + 3 \cdot t$
13	$x \cdot (1,3 - 2 \cdot x) + 0,60$	$3 \cdot (0,20 + t)$	$0,75 + 4 \cdot t$
14	$3,8 \cdot x \cdot (2,6 - x)$	$3,2 \cdot t$	$3,99 + t$
15	$-(0,1 - x) \cdot (0,2 + x) + 0,3$	$4 \cdot t + 0,28$	$2 \cdot (0,29 + t)$
16	$-0,3 \cdot x \cdot (1,4 - x) + 2,50$	$2 \cdot (1,25 + t)$	$2,365$
17	$3 \cdot x \cdot (2,6 \cdot x + 0,19)$	$1,8 \cdot t$	$2,235 + t$
18	$(3,2 \cdot x + 1,8) \cdot x + 4,3$	$2,3 \cdot t + 4,30$	$2 \cdot (2,50 + t)$
19	$2,4 \cdot x \cdot (0,6 - x) + 0,40$	$2 \cdot (0,20 + t)$	$0,52 + t$
20	$x \cdot (1 - x) + 0,20$	$0,20 + t$	$3 \cdot (0,15 + t)$
21	$3,6 \cdot x \cdot (2 - x)$	$4,6 \cdot t$	$2,70 - t$
22	$-0,6 \cdot x \cdot (1,7 - x) + 5,10$	$2,1 \cdot t + 5,10$	$2,74 + 2 \cdot t$
23	$4,2 \cdot x \cdot (0,8 - x) + 1,10$	$1,10 + t$	$1,73$
24	$(2 \cdot x - 0,1) \cdot (0,2 + x) + 0,40$	$0,38$	$1,03 + t$
25	$4 \cdot x \cdot (0,3 + x) + 2,80$	$1,1 \cdot t + 2,80$	$2 \cdot (1,10 + t)$
26	$0,9 \cdot x \cdot (x + 0,7)$	$1,4 \cdot t$	$0,54 + t$
27	$-0,8 \cdot x \cdot (1,3 - x) + 4,70$	$2 \cdot (2,35 + t)$	$4,38$
28	$4,8 \cdot x \cdot (1,9 - x) + 0,30$	$1,6 \cdot t + 0,3$	$3 \cdot (1,22 + t)$
29	$(x - 0,3) \cdot (1,5 + x) + 0,86$	$t + 0,3$	$2 \cdot (0,63 + t)$
30	$0,6 \cdot x \cdot (2,1 - x)$	$1,7 \cdot t$	$3 \cdot (0,16 + t)$

16.12 ПЕРВИННА СТАТИСТИЧНА ОБРОБКА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Мета та основні завдання: Дослідити методи обробки статистичного матеріалу. Набути вмінь аналізу результатів експериментальних досліджень.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття статистичного розподілу і форми його подання, поняття про емпіричну функцію розподілу, гістограми;
- вивчити поняття числових характеристик статистичного розподілу, числових характеристик статистичного інтервального розподілу, довірчих інтервалів для оцінки параметрів нормального розподілу;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.12.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати у середовищі MS Excel таке.

1. За інтервальним статистичним розподілом частот, що наведений в таблиці 16.12.1 побудувати гістограми частот і відносних частот.
2. Порівняти отримані гістограми із типовими формами, поданими у додатку Е та визначити, до якого типу належить даний розподіл результатів.
3. Для заданого статистичного розподілу частот (таблиці 16.12.2):
 - побудувати емпіричну функцію розподілу (аналітично і графічно);
 - обчислити такі числові характеристики: вибірккову середню, вибірккову дисперсію, вибірккове стандартне відхилення, розмах

варіювання, вибіркoву моду й вибіркoву медіану та вибіркoвий коефіцієнт варіації;

- визначити статистичні оцінки генеральної середньої, генеральної дисперсії і генерального стандартного відхилення, а саме вибіркoве середнє, виправлену дисперсію, виправлене стандартне відхилення.

4. Надати результати виконання практикуму викладачеві.

5. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.12.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму, загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків і побудови у середовищі MS Excel;
- висновки (зокрема, щодо можливих причин появи розподілу, відмінного від нормального типу);

16.12.3 Варіанти індивідуальних завдань

Виконати статистичне опрацювання наданих даних (таблиці 16.12.1 та 16.12.2) згідно індивідуального завдання.

Таблиця 16.12.1 Варіанти завдань до задачі 1

№1		№2		№3		№4		№5	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-5	6	2-6	2	7-10	4	5-9	4	4-8	9
5-7	14	6-10	8	10-13	19	9-13	10	8-12	12
7-9	20	10-14	10	13-16	20	13-17	16	12-16	18
9-11	6	14-19	12	16-19	11	17-21	12	16-20	7
11-13	4	19-23	8	19-22	6	21-25	8	20-24	4

№6		№7		№8		№9		№10	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-6	5	2-5	3	1-6	5	1-5	4	1-4	5
6-9	9	5-8	6	6-11	10	5-9	18	4-7	9
9-12	14	8-11	9	11-16	20	9-13	12	7-10	18
12-15	7	11-14	14	16-21	9	13-17	10	10-13	12
15-18	15	14-17	18	21-26	6	17-21	6	13-16	6

№11		№12		№13		№14		№15	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-7	3	2-5	4	2-6	3	2-7	6	2-6	3
7-11	7	5-8	8	6-10	12	7-12	14	6-10	5
11-15	11	8-11	16	10-14	20	12-17	18	10-14	12
15-19	14	11-14	14	14-18	10	17-22	8	14-18	20
19-23	15	14-17	8	18-22	5	22-27	4	18-22	10

№16		№17		№18		№19		№20	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-5	2	1-4	2	4-6	4	2-5	4	3-5	5
5-7	5	4-7	5	6-8	8	5-8	10	5-7	9
7-9	10	7-10	13	8-10	12	8-11	16	7-9	16
9-11	15	10-13	18	10-12	16	11-14	13	9-11	12
11-13	18	13-16	12	12-14	10	14-17	7	11-13	8

№21		№22		№23		№24		№25	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-6	17	2-6	4	1-5	3	2-5	4	2-4	5
6-9	14	6-10	6	5-9	17	5-8	6	4-6	8
9-12	12	10-14	10	9-13	15	8-11	10	6-8	12
12-15	5	14-18	25	13-17	10	11-14	18	8-10	10
15-18	2	18-22	5	17-21	5	14-17	12	10-12	15

№26		№27		№28		№29		№30	
I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i	I_i	n_i
3-8	5	3-7	4	2-5	3	4-8	4	2-7	3
8-13	10	7-11	6	5-8	5	8-12	10	7-12	8
13-18	25	11-15	10	8-11	10	12-16	15	12-17	12
18-23	6	15-19	18	11-14	12	16-20	12	17-22	16
23-28	4	19-23	12	14-17	20	20-24	9	22-27	11

Таблиця 16.12.2 Варіанти завдань до задачі 3

№1		№2		№3		№4		№5	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
3	4	3	4	6	5	2	7	6	3
7	8	8	11	9	15	5	13	12	6
10	16	14	15	14	20	11	5	18	9
13	12	18	14	16	4	20	15	24	15
18	10	24	6	22	6	24	10	30	17

№6		№7		№8		№9		№10	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
4	4	2	4	3	5	4	4	3	5
8	6	5	6	8	12	9	6	5	4
12	13	8	18	10	13	12	10	8	13
16	17	11	12	14	6	16	16	10	18
20	10	15	10	16	14	18	14	13	10

№11		№12		№13		№14		№15	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
3	5	2	5	3	4	4	8	2	11
6	10	5	10	6	6	7	7	4	6
8	12	7	14	9	10	9	15	8	15
11	8	12	7	20	8	12	14	11	10
14	15	14	14	12	2	16	6	14	8

№16		№17		№18		№19		№20	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
2	5	3	5	3	2	4	3	3	4
4	9	6	10	7	5	6	6	4	5
6	7	8	15	9	18	10	15	9	18
8	4	12	9	14	9	12	9	13	5
11	15	15	11	16	6	15	7	16	10

№21		№22		№23		№24		№25	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
2	4	5	8	2	5	2	4	4	2
4	16	7	5	4	10	6	5	5	4
6	13	9	10	6	7	8	11	8	13
9	12	11	7	9	4	11	18	10	15
12	5	15	20	12	14	14	12	14	6

№26		№27		№28		№29		№30	
x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i	x_i	n_i
3	2	4	9	3	6	5	4	2	3
6	8	7	8	5	14	7	5	4	8
8	13	8	15	8	5	9	11	5	14
10	21	12	8	10	12	10	13	8	16
12	6	16	10	14	3	14	7	12	9

16.13 ОСНОВИ КОРЕЛЯЦІЙНОГО АНАЛІЗУ. ЗАВДАННЯ ДО ІНДИВІДУАЛЬНОЇ РОБОТИ

Мета та основні завдання: Дослідити можливості застосування кореляційного аналізу для прийняття технологічних рішень.

Підготовка до практикуму.

Під час самостійної роботи перед виконанням комп'ютерного практикуму:

- вивчити поняття кореляційної залежності, умовної середньої, рівнянь регресії, коефіцієнта кореляції й оцінку сили лінійного зв'язку між випадковими величинами за його допомогою; розглянути представлення даних у вигляді кореляційної таблиці;
- підготувати протокол до комп'ютерного практикуму.

16.13.1 Послідовність виконання практикуму

Згідно з наданим індивідуальним завданням (відповідно до варіанта) виконати у середовищі MS Excel таке (таблиця 16.13.1).

1. Розрахувати коефіцієнт кореляції за класичними формулами.
2. Оцінити силу лінійного кореляційного зв'язку між випадковими величинами.
3. Визначити рівняння прямих ліній регресії Y на X та X на Y (за вказівкою викладача).
4. Виконати побудову прямих ліній регресії Y на X та X на Y у середовищі MS Excel (за вказівкою викладача).
5. Надати результати виконання практикуму викладачеві.
6. Отримані результати оформити у вигляді звіту з практикуму встановленого вигляду (див. вимоги щодо оформлення звіту).

16.13.2 Вимоги щодо опрацювання (аналізу) результатів практикуму та оформлення звіту

Звіт з комп'ютерного практикуму має включати тему, мету комп'ютерного практикуму, стислі теоретичні відомості з теми практикуму,

загальне та індивідуальне завдання, а також матеріали (у випадку аудиторного режиму роботи – роздруковані аркуші) з результатами виконання практикуму:

- результати розрахунків та побудови у середовищі MS Excel;

16.13.3 Варіанти індивідуальних завдань

За даною кореляційною таблицею (таблиці 16.13.1) виконати опрацювання наданих даних згідно завдання.

Таблиця 16.13.1 Індивідуальні завдання

Варіант №1	Значення x_i				Варіант №2	Значення x_i			
Значення y_i	1,2	1,4	1,6	1,8	Значення y_i	3	6	8	10
2	2	3			0,2	1	5		
4		5	7		0,4		3	2	
6			2	1	0,6	4		5	
8				4	0,8			2	1
Варіант №3	Значення x_i				Варіант №4	Значення x_i			
Значення y_i	5	15	25	35	Значення y_i	2	4	6	8
21	3	4			10	2			
23		5			14		4	5	
25		2	5	4	18		5	3	1
27			2	1	22		4	2	2
Варіант №5	Значення x_i				Варіант №6	Значення x_i			
Значення y_i	5	10	15	20	Значення y_i	1	3	5	7
11	2				3,2	2	1	5	
13		10	6		4,2		5	10	
15		5	4		5,2			5	2
17			3	2	6,2			5	1
Варіант №7	Значення x_i				Варіант №8	Значення x_i			
Значення y_i	0,6	1	1,4	1,8	Значення y_i	8	16	24	32
3		2	5		10	4	10		
6	4	5			20		12	6	2
9		4	5	1	30			4	1
12			4	1	40			4	3

Варіант №9	Значення x_i				Варіант №10	Значення x_i			
Значення y_i	8	12	16	20	Значення y_i	15	17	19	21
31	1	2	5		7	2			
35		4	10		10	2	5		
39		12	6		13		5	10	
43			8	2	16			5	1
Варіант №11	Значення x_i				Варіант №12	Значення x_i			
Значення y_i	1	7	13	19	Значення y_i	11	13	15	17
6	3	5			42	2	4	6	
8		4			44		5	1	
10		10	2	2	46		8		
12		5	3	1	48		4	3	2
Варіант №13	Значення x_i				Варіант №14	Значення x_i			
Значення y_i	4	8	12	16	Значення y_i	21	31	41	51
0,5	4	2			8	1	4		
1		3	5	2	10	1	10	5	
1,5		5	2		12	3		4	
2		3	2	1	14			5	3
Варіант №15	Значення x_i				Варіант №16	Значення x_i			
Значення y_i	2,2	2,4	2,6	2,8	Значення y_i	2	4	6	8
2	2	3			0,2	1	6		
4		5	8		0,4		3	3	
6			2	2	0,6	4		5	
8				4	0,8			3	1
Варіант №17	Значення x_i				Варіант №18	Значення x_i			
Значення y_i	3	6	9	12	Значення y_i	3	6	9	12
2	3	4			10	2			
4		8			14		4	5	
6		1	5	4	18		5	3	1
8			2	1	22		4	2	2
Варіант №19	Значення x_i				Варіант №20	Значення x_i			
Значення y_i	5	10	15	20	Значення y_i	1	3	5	7
8	2				2,2	2	1	5	
10		12	6		3,2		6	10	
12		5	5		4,2			6	2
14			3	2	5,2			5	1

Варіант №21	Значення x_i				Варіант №22	Значення x_i			
Значення y_i	1,6	2	2,4	2,8	Значення y_i	1	3	5	9
4		2	5		2,2	2	1	5	
8	4	6			3,2		6	10	
12		4	4	1	4,2			6	2
16			4	1	5,2			5	1
Варіант №23	Значення x_i				Варіант №24	Значення x_i			
Значення y_i	8	12	16	20	Значення y_i	1,5	1,7	1,9	2,1
11	2	2	5		0,7	2			
15		4	7		1	2	4		
19		12	6		1,3		5	12	
23			8	2	1,6			5	1
Варіант №25	Значення x_i				Варіант №26	Значення x_i			
Значення y_i	8	12	16	20	Значення y_i	1,5	1,7	1,9	2,1
11	2	2	5		0,7	2			
15		4	7		1	2	4		
19		12	6		1,3		5	12	
23			8	2	1,6			5	1
Варіант №27	Значення x_i				Варіант №28	Значення x_i			
Значення y_i	2	7	12	17	Значення y_i	1,1	1,3	1,5	1,7
6	3	4			4,2	2	4	6	
8		5			4,4		5	4	
10		10	6	2	4,6		12		
12		5	3	1	4,8		4	3	2
Варіант №29	Значення x_i				Варіант №30	Значення x_i			
Значення y_i	0,4	0,8	1,2	1,6	Значення y_i	2,1	3,1	4,1	5,1
0,5	4	3			8	2	4		
1		3	7	2	12	1	12	5	
1,5		5	3		16	3		6	
2		3	2	1	20			5	3

17 МАТЕМАТИЧНЕ ОПРАЦЮВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

Мета роботи: Вивчити загальні поняття про методи обробки та аналізу результатів експериментальних досліджень. Набути вміння отримання апроксимуючих залежностей і оцінювання точності апроксимації; визначення рівнянь регресії і оцінки тісноти зв'язку між величинами.

17.1 ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

Завдання на розрахункову роботу складається з двох частин і передбачає [18]:

Частина 1.

Перед виконанням завдання, що поставлене в цій частині, необхідно:

- розглянути загальний підхід до наближення функцій і вивчити апроксимацію за методом найменших квадратів (МНК);
- вивчити методи визначення виду апроксимуючої залежності, методику розрахунку коефіцієнтів обраної апроксимуючої залежності;
- розглянути визначення оцінки точності апроксимації.

Завдання до 1 частина передбачає отримання апроксимуючої залежності, що описує задану табличну функцію, яка надана для виконання роботи (згідно варіанта).

Для цього необхідно виконати:

1. Визначити загальний вид апроксимуючої залежності, побудувавши точковий графік заданої функції (побудову графіку виконати в середовищі MS Excel).

2. Апроксимувати задану табличну функцію поліномом **першого порядку**:

- визначити параметри апроксимуючої залежності (поліном 1-го порядку), скориставшись методом найменших квадратів;
- розрахувати значення функції у вузлових точках за допомогою

отриманої апроксимуючої залежності 1-го порядку;

- за отриманими даними побудувати графік отриманої апроксимуючої функції, сумістивши його на одному малюнку з точковим графіком заданої функції (побудову графіку виконати в середовищі MS Excel);
- обчислити середню квадратичну похибку апроксимації;
- зробити висновки про точність опису експериментальних даних знайденою апроксимуючою залежністю 1-го порядку.

2. Апроксимувати задану табличну функцію поліномом **другого порядку**:

- визначити параметри апроксимуючої залежності (поліном 2-го порядку), скориставшись методом найменших квадратів;
- розрахувати значення функції у вузлових точках за допомогою отриманої апроксимуючої залежності 2-го порядку;
- за отриманими даними побудувати графік отриманої апроксимуючої функції, сумістивши його на одному малюнку з точковим графіком заданої функції (побудову графіку виконати в середовищі MS Excel);
- обчислити середню квадратичну похибку апроксимації;
- зробити висновки про точність опису експериментальних даних знайденою апроксимуючою залежністю 2-го порядку.

3. За допомогою методики, аналітичного вибору виду апроксимуючої залежності – див додаток XX) обрати найбільш придатну функцію для апроксимації заданої експериментальної функції. Для обраної **емпіричної функції**:

- визначити параметри апроксимуючої залежності (обрана емпірична функція), скориставшись методом найменших квадратів;
- розрахувати значення функції у вузлових точках за допомогою отриманої емпіричної залежності;
- за отриманими даними побудувати графік отриманої емпіричної

функції, сумістивши його на одному малюнку з точковим графіком заданої функції (побудову графіку виконати в середовищі MS Excel);

- обчислити середню квадратичну похибку апроксимації;
- зробити висновки про точність опису експериментальних даних знайденою емпіричною функцією.

4. Порівняти отримані результати апроксимації експериментальної функції (п.1, п.2 і п.3) і вибрати апроксимуючу залежність, що точніше описує задану експериментальну функцію.

5. Оформити результати розрахунків згідно вимог до РР. Зробити висновки.

Частина 2.

Перед виконанням завдання, що поставлене в цій частині, необхідно:

- вивчити поняття кореляційної залежності, умовної середньої, рівнянь регресії та коефіцієнта кореляції;
- розглянути: оцінку сили лінійного зв'язку між випадковими величинами за допомогою коефіцієнта кореляції та представлення даних у вигляді кореляційної таблиці.

На основі експериментальних даних, отриманих для вивчення залежності між випадковими величинами X і Y (згідно наданого варіанта), і представленими у вигляді кореляційної таблиці виконати таке:

- обробити статистичні дані, що згруповані у кореляційну таблицю, з використанням «правої» і «нижньої» допоміжних таблиць і умовних варіант;
- розрахувати вибіркового коефіцієнта кореляції та оцінити силу зв'язку між величинами Y і X ;
- знайти рівняння прямих ліній регресії X на Y і X на Y ;
- побудувати графіки отриманих прямих ліній регресії Y по X та X по Y (побудову графіків виконати в середовищі MS Excel);
- побудувати таблицю порівняння умовних середніх, обчислених за рівняннями регресії та за даними кореляційної таблиці, у

середовищі MS Excel;

- зробити висновки;
- оформити результати розрахунків згідно вимог до РР.

17.2 СТРУКТУРА І ЗМІСТ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

Розрахункова робота складається з пояснювальної записки обсягом в 25-35 сторінок формату А4. Пояснювальна записка повинна включати:

- титульний лист;
- завдання на розрахунково-графічну роботу;
- зміст;
- вступ;
- основні розділи;
- висновок;
- список літератури;
- додаток (за необхідності).

17.3 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

1. При розв'язуванні поставленого **завдання 1** всі розрахунки і побудова графіків виконується в середовищі MS Excel.
2. При цьому, для **завдання 1 (п.2)** виконується його програмна реалізація, що передбачає розробку програмного модуля в середовищі VBA MS Excel, який реалізує розв'язання системи рівнянь (наприклад, з використанням методу Крамера) для розрахунку коефіцієнтів апроксимуючої функції (багаточлен 2-го порядку) і обчислення середньої квадратичної похибки апроксимації.
3. При розв'язуванні поставленого **завдання 2** всі розрахунки і побудова графіків виконується в середовищі MS Excel.

17.4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКОВОЇ РОБОТИ

Варіант 1

Завдання 1

X	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5
Y	5	12,1	23,4	40,6	64,2	96,1	136,9	187,6

Завдання 2

Y \ X	4 - 14	14 - 24	24 - 34	34 - 44	44 - 54
16 - 26	5	4			
26 - 36	1	3	6		
36 - 46			5	45	5
46 - 56			2	8	7

Варіант 2

Завдання 1

X	1,1	1,7	2,3	2,9	3,5	4,1	4,7	5,3
Y	3,7	3,17	2,8	2,72	2,61	2,53	2,48	2,44

Завдання 2

Y \ X	10 - 20	20 - 30	30 - 40	40 - 50	50 - 60
25 - 35	2	1			
35 - 45	1	2	3		
45 - 55			4	20	5
55 - 65			2	10	8

Варіант 3

Завдання 1

X	1,9	2,74	3,58	4,42	5,26	6,1	6,94	7,78
Y	3,35	4,15	4,82	5,45	6,03	6,55	7,07	7,54

Завдання 2

Y \ X	22 - 28	28 - 34	34 - 40	40 - 46	46 - 52
31 - 39	4	2			
39 - 47		2	3	1	
47 - 55			5	50	6
55 - 63				10	8

Варіант 4

Завдання 1

X	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4
Y	4,5	9,41	12,21	14,3	15,9	17,25	18,32	19,22

Завдання 2

Y \ X	9 - 13	13 - 17	17 - 21	21 - 25	25 - 29
18 - 28	2	3	1		
28 - 38		2	4		
38 - 48			6	35	8
48 - 58			2	9	5

Варіант 5

Завдання 1

X	1,1	1,5	1,9	2,3	2,7	3,1	3,5	3,9
Y	4,8	7,5	10,8	14,6	19,3	24,4	30,4	36,7

Завдання 2

Y \ X	19 - 25	25 - 31	31 - 37	37 - 43	43 - 49
24 - 34	2	2			
34 - 44		4	5		
44 - 54			10	45	7
54 - 64			3	10	6

Варіант 6

Завдання 1

X	1,45	2	2,55	3,1	3,65	4,2	4,75	5,3
Y	20,91	24,61	27,6	30	31,9	33,7	35,1	36,5

Завдання 2

Y \ X	4 - 10	10 - 16	16 - 22	22 - 28	28 - 34
17 - 27	2	4			
27 - 37		6	2	1	
37 - 47			3	35	2
47 - 57			1	10	6

Варіант 7

Завдання 1

X	5,5	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9
Y	14	13,2	12,7	12	11,3	10,8	10,2	9,6

Завдання 2

Y \ X	1 - 9	9 - 17	17 - 25	25 - 33	33 - 41
13 - 23	5	7			
23 - 33		6	8		
33 - 43			4	40	5
43 - 53			6	12	2

Варіант 8

Завдання 1

X	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5
Y	4,2	6	8,2	10,7	13,7	17	20,7	24,7

Завдання 2

Y \ X	3 - 5	5 - 7	7 - 9	9 - 11	11 - 13
10 - 18	3	6			
18 - 26		1	4		
26 - 34			5	25	8
34 - 42			2	10	3

Варіант 9

Завдання 1

X	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5
Y	4,2	6	8,2	10,7	13,7	17	20,7	24,7

Завдання 2

y \ x	25 - 29	29 - 33	33 - 37	37 - 41	41 - 45
35 - 45	4	2			
45 - 55		5	2		
55 - 65			6	43	5
65 - 75			1	7	3

Варіант 10

Завдання 1

X	420	470	520	570	620	670	720	770
Y	179,1	195,8	211,2	225,7	239	251,2	262,6	273

Завдання 2

y \ x	11 – 17	17 – 23	23 – 29	29 – 35	35 – 41
19 – 29	2	5			
29 – 39		5	15		
39 – 49			6	30	4
49 – 59			4	12	6

Варіант 11

Завдання 1

X	5	5,5	6	6,5	7	7,5	8	8,5
Y	10,56	11,65	12,65	13,74	14,77	15,85	16,87	17,94

Завдання 2

y \ x	35 – 39	39 – 43	43 – 47	47 – 51	51 – 55
42 – 52	4	2			
52 – 62		6	4		
62 – 72			6	45	5
72 – 82			5	15	8

Варіант 12

Завдання 1

X	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5	2,75
Y	2	2,68	3,21	3,67	4,07	4,43	4,75	5,03

Завдання 2

$y \backslash x$	14 – 20	20 – 26	26 – 32	32 – 38	38 – 44
22 – 32	4	4			
32 – 42		6	5		
42 – 52			8	40	2
52 – 62			4	10	6

Варіант 13

Завдання 1

X	0,18	0,27	0,36	0,45	0,54	0,63	0,72	0,81
Y	0,723	0,817	0,87	0,908	0,935	0,954	0,968	0,982

Завдання 2

$y \backslash x$	2 – 6	6 – 10	10 – 14	14 – 18	18 – 22
11 – 19	2	5			
19 – 27		7	3		
27 – 35			4	40	2
35 – 43			1	10	6

Варіант 14

Завдання 1

X	1,1	1,25	1,4	1,55	1,7	1,85	2	2,15
Y	3,21	3,294	3,37	3,438	3,5	3,564	3,61	3,67

Завдання 2

$y \backslash x$	19 – 21	21 – 23	23 – 25	25 – 27	27 – 29
20 – 28	3	5			
28 – 36		6	2		
36 – 44			3	30	4
44 – 50			5	8	6

Варіант 15

Завдання 1

X	3,75	4,5	5,25	6	6,75	7,5	8,25	9
Y	24,2	28	31,64	35,21	38,72	42,16	45,41	48,75

Завдання 2

y \ x	5 – 11	11 – 17	17 – 23	23 – 29	29 – 35
21 – 31	3	4			
31 – 41	1	6	2		
41 – 51			3	45	2
51 – 61			1	8	6

Варіант 16

Завдання 1

X	3,75	4,5	5,25	6	6,75	7,5	8,25	9
Y	24,2	28	31,64	35,21	38,72	42,16	45,41	48,75

Завдання 2

Y \ X	2 - 4	4 - 6	6 - 8	8 - 10	10 - 12
12 - 18	4	1			
18 - 24		2	1		
24 - 30		6	20	5	
30 - 36			3	7	2

Варіант 17

Завдання 1

X	3	3,5	4	4,5	5	5,5	6	6,5
Y	88,1	116	147,7	183,8	223,3	267,5	315	367

Завдання 2

Y \ X	25 - 35	35 - 45	45 - 55	55 - 65	65 - 75
30 - 40	3	1			
40 - 50		2	3		
50 - 60			5	20	7
60 - 70			6	8	4

Варіант 18

Завдання 1

X	5,5	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9
Y	64,32	76,5	89,61	103,88	119,11	135,46	152,8	171,23

Завдання 2

Y \ X	3 - 9	9 - 15	15 - 21	21 - 27	27 - 33
11 - 21	1	4			
21 - 31		7	12		
31 - 41			4	22	6
41 - 51			4	8	3

Варіант 19

Завдання 1

X Y	2,2	3,2	4,2	5,2	6,2	7,2	8,2	9,2
	68,9	121	189	271,5	369,3	482	609	752

Завдання 2

Y \ X	7 - 11	11 - 15	15 - 19	19 - 23	23 - 27
21 - 29	1	4			
29 - 37	2	2	4		
37 - 45			7	26	1
45 - 53			5	12	4

Варіант 20

Завдання 1

X Y	1	1,6	2,2	2,8	3,4	4	4,6	5,2
	8,15	6,22	5,3	4,81	4,47	4,22	4,06	3,92

Завдання 2

Y \ X	6 - 10	10 - 14	14 - 18	18 - 22	22 - 26
16 - 24	2	1			
24 - 32		6	5		
32 - 40			10	32	4
40 - 48				12	3

Варіант 21

Завдання 1

X	1,6	2,2	2,8	3,4	4	4,6	5,2	5,8
Y	23,4	36,5	52,6	71	92,4	116	142,9	172,1

Завдання 2

Y \ X	4 - 14	14 - 24	24 - 34	34 - 44	44 - 54
16 - 26	2	3			
26 - 36	1	3	6		
36 - 46			4	40	5
46 - 56			2	12	4

Варіант 22

Завдання 1

X	2,2	3,2	4,2	5,2	6,2	7,2	8,2	9,2
Y	13	11,3	10,4	9,81	9,47	9,17	8,98	8,81

Завдання 2

Y \ X	10 - 20	20 - 30	30 - 40	40 - 50	50 - 60
25 - 35	2	3			
35 - 45	1	2	5		
45 - 55			4	22	5
55 - 65			2	12	6

Варіант 23

Завдання 1

X	3	3,9	4,8	5,7	6,6	7,5	8,4	9,3
Y	8,43	14,65	22,62	32,51	44,17	57,81	73,3	90,85

Завдання 2

Y \ X	22 - 28	28 - 34	34 - 40	40 - 46	46 - 52
31 - 39	2	3			
39 - 47		2	3	2	
47 - 55			5	40	6
55 - 63				12	4

Варіант 24

Завдання 1

X	3,25	4,5	5,75	7	8,25	9,5	10,75	12
Y	6,61	11,46	17,42	24,31	32,18	40,9	50,41	60,83

Завдання 2

Y \ X	9 - 13	13 - 17	17 - 21	21 - 25	25 - 29
18 - 28	1	3	2		
28 - 38		2	6		
38 - 48			5	32	6
48 - 58			2	9	4

Варіант 25

Завдання 1

X	8	8,3	8,6	8,9	9,2	9,5	9,8	10,1
Y	573,2	613,3	655	698	742,8	788,1	835,9	884,1

Завдання 2

Y \ X	19 - 25	25 - 31	31 - 37	37 - 43	43 - 49
24 - 34	1	2			
34 - 44		4	5		
44 - 54			12	42	7
54 - 64			3	8	3

Варіант 26

Завдання 1

X	6,45	8,68	10,91	13,14	15,37	17,6	19,83	22,06
Y	17,37	19,46	21,04	22,18	23,07	23,77	24,39	24,87

Завдання 2

Y \ X	7 - 13	13 - 19	19 - 25	25 - 31	31 - 37
12 - 20	2	3			
20 - 28		5	4		
28 - 36			6	22	4
36 - 44			1	8	5

Варіант 27

Завдання 1

X	0,12	0,2	0,28	0,36	0,44	0,52	0,6	0,68
Y	0,62	0,748	0,824	0,872	0,904	0,928	0,949	0,963

Завдання 2

Y \ X	23 - 27	27 - 31	31 - 35	35 - 39	39 - 43
33 - 43	1	3			
43 - 53		4	5		
53 - 63			6	36	4
63 - 73			2	6	2

Варіант 28

Завдання 1

X Y	620 174,1	670 182	720 189,1	770 195,4	820 201,2	870 206,3	920 211,2	970 216

Завдання 2

Y \ X	18 - 22	22 - 26	26 - 30	30 - 34	34 - 38
20 - 30	1	3			
30 - 40		6	3		
40 - 50			8	38	4
50 - 60			2	8	6

Варіант 29

Завдання 1

X	4,54	5,6	6,66	7,72	8,78	9,84	10,9	11,96
Y	5,52	6,25	6,9	7,52	8,08	8,64	9,17	9,66

Завдання 2

Y \ X	8 - 12	12 - 16	16 - 20	20 - 24	24 - 28
10 - 20	2	7			
20 - 30		12	15		
30 - 40			18	24	6
40 - 50			8	10	8

Варіант 30

Завдання 1

X У	470 195,8	520 211,2	570 225,7	620 239	670 251,2	720 262,6	770 273	820 282,7

Завдання 2

Y \ X	2 - 8	8 - 14	14 - 20	20 - 26	26 - 32
5 - 15	1	3			
15 - 25		6	2		
25 - 35			6	24	5
35 - 45			4	10	2

ЛІТЕРАТУРА

1. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування. Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології : підручник / С. В. Брановицька, Р. Б. Медведєв, Ю. Я. Фіалков. – Київ : ІВЦ «Вид-во Політехніка», 2004. – 220 с.
2. Васильків І. М. Основи теорії ймовірностей і математичної статистики : навч. посіб / І. М. Васильків. – Львів : ЛНУ ім. І. Франка, 2020. – 184 с.
3. Григоренко Я. М. Обчислювальні методи в задачах прикладної математики : навч. посіб / Я. М. Григоренко, Н. Д. Панкратова. – Київ : Либідь, 1995. – 280 с.
4. Завгородня Н. М. Математичні методи і моделі: комп'ютерне моделювання : підручник / Н. М. Завгородня, С. В. Панченко та ін. – Харків : УкрДАЗТ, 2012. – 185 с
5. Задачин В. М. Чисельні методи : навч. посіб / В. М. Задачин, І. Г. Конюшенко. – Харків : Вид. ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2014. – 180 с.
6. Інформаційні технології. Автоматизація обчислень та програмування в MS Excel : навч. посіб. / уклад.: С. Г. Бондаренко, А. О. Абрамова, С. В. Плашихін. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 135 с.
7. Інформаційні технології. Оброблення даних у табличному процесорі MS Excel : навч. посіб. / уклад.: С. Г. Бондаренко, А. О. Абрамова, С. В. Плашихін. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 79 с.
8. Інформаційні технології. Процедури та форми VBA : навч. посіб. / уклад. : С. Г. Бондаренко, А. О. Абрамова, С. І. Заєць. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 158 с.
9. Крижанівська Т. В. Конспект лекцій з дисципліни «Чисельні методи» : курс лекцій / Т. В. Крижанівська, І. А. Бойцова. – Одеса : Од. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2013. – 152 с.
10. Литвинов А. Л. Чисельні методи: теорія і практика : навч. посіб / А. Л. Литвинов. – Харків : ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2022. – 166 с.
11. Обчислювальна математика та програмування : метод. вказівки до викон. лаб. роб. / уклад: С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова, А. О.

- Абрамова, С. І. Заєць. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2017. – 100 с.
- 12.Лященко М. Я. Чисельні методи : підручник / М. Я. Лященко, М. С. Головань. – Київ : Видавництво «Либідь», 1996. – 288 с.
- 13.Маринець В. В. Теорія крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь: навч. посіб / В. В. Маринець, В. Л. Рего, К. В. Маринець. – Ужгород : Вид-во «Говерла», 2013. – 196 с.
- 14.Методи обчислень: Практикум на ЕОМ : навч. посіб. / уклад.: В. Л. Бурківська, С. О. Войцехівський, І. П. Гаврилюк та ін. – Київ : Вища шк., 1995. – 303 с.
- 15.Методи обчислень: Чисельні методи алгебри : навч. посіб. / уклад.: В. В. Третиник, Н. Д. Любашенко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 138 с.
- 16.Мусіяка В. Г. Основи числових методів : підручник / В. Г. Мусіяка. – Дніпро : Видавництво «ЛПРА», 2017. – 256 с.
- 17.Обчислювальна математика та програмування : метод. вказівки до викон. лаб. робіт. / уклад. : С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова, А. О. Абрамова, С. І. Заєць. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського. – 100 с.
- 18.Обчислювальна математика та програмування. Чисельні методи : метод. вказ. і завд. до практ. занять та самостійної роботи для студ. хіміко-технологічного факультету. – Київ : НТУУ «КПІ», 2014. – 86 с.
- 19.Обчислювальна математика та програмування : метод. вказівки та завд. до викон. дом. контр. роботи та самостійної роботи / уклад.: О. В. Сангінова, С. В. Брановицька, С. Г. Бондаренко. – Київ : НТУУ "КПІ", 2013. – 48 с.
- 20.Огірко О. І. Теорія ймовірностей та математична статистика : навч. посіб / О. І. Огірко, Н. В. Галайко. – Львів : ЛьвДУВС, 2017. – 292 с.
- 21.Пістунов І. М. Чисельні методи : навч. посіб / І. М. Пістунов. – Донецьк : Нац. гірн. ун-т., 2014. – 215 с.
- 22.Прокопенко Ю. В. Обчислювальна математика: навч. посіб / Ю. В. Прокопенко, Д. Д. Татарчук, В. А. Казміренко. – Київ : «Політехніка», 2013. – 224 с.
- 23.Самборська О. М. Чисельні методи : навч. посіб / О. М. Самборська, Б. Г. Шелестовський. – Тернопіль: ТНТУ імені Івана Пулюя, 2010. –

164 с.

24. Теорія ймовірностей та випадкові процеси: Основи теорії ймовірностей : метод. вказівки і завд. до викон. самот. / уклад.: С. В. Брановицька, Т. В. Бойко, О. М. Жигір. – Київ : ІВЦ «Політехніка», 2007. – 42 с.
25. Теорія ймовірностей та випадкові процеси: Математична статистика : метод. вказівки до викон. розрах. роботи. / уклад.: С. В. Брановицька, Т. В. Бойко, О. В. Сангінова. – Київ : ІВЦ «Політехніка», 2007. – 48 с.
26. Фельдман Л. П. Чисельні методи в інформатиці : підручник / Л. П. Фельдман, А. І. Петренко, О. А. Дмитрієва. – Київ : Видавнича група ВНУ. 2006. – 480 с.
27. Цегелик Г. Г. Чисельні методи: підручник / Г. Г. Цегелик. – Львів : Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2004. – 408 с.
28. Чисельне обчислення функцій, характеристик матриць і розв'язування нелінійних рівнянь та систем рівнянь : навч. посіб. / уклад.: В. А. Шаповаленко, Л. М. Буката, О. Г. Трофименко. – Одеса : ВЦ ОНАЗ, 2010. – 88 с.
29. Чисельні методи в комп'ютерних науках : навч. посіб. / уклад. В. А. Андруник, В. А. Висоцька та ін. За ред. В. В. Пасічника. – Львів : Видавництво «Новий Світ-2000», 2017. – Т. 1. – 470 с.
30. Чисельні методи в комп'ютерних науках : навч. посіб. / уклад.: В. А. Андруник, В. А. Висоцька та ін. За ред. В. В. Пасічника. – Львів : Видавництво «Новий Світ-2000», 2018. – Т. 2. – 536 с.
31. Чисельні методи розв'язання інженерних задач в пакеті MathCAD. Курс лекцій та індивідуальні завдання : навч. посіб. / уклад.: Васильєва Л. В., Гончаров О. А. та ін. – Краматорськ : ДДМА, 2006. – 108 с.
32. Чисельні методи розв'язання прикладних задач : навч. посіб. / уклад.: О. А. Гончаров, Л. В. Васильєва, А. М. Юнда. – Суми : Сумський державний університет, 2020. – 142 с.
33. Ремез Н. С., Кисельов В. Б., Дичко А. О. та ін. Чисельні методи розв'язання технічних задач : підручник. – Одеса : Видавництво «Гельветика», 2022. – 186 с.
34. Чисельні методи. Чисельне інтегрування функцій : навч. посіб. / уклад.: Л. В. Крилик, І. В. Богач, А. І. Лісовенко. – Вінниця : ВНТУ, 2019. – 74 с.

- 35.Чисельні методи: навч. посіб. / уклад.: Л. О. Волонтир, О. В. Зелінська та ін. – Вінниця : ВНАУ, 2020. – 322 с.
- 36.Al-Malah K. Matlab Numerical Methods with Chemical Engineering Applications / Kamal Al-Malah. – McGraw-Hill, 2014. – 419 p.
- 37.Bansal P. Maths in Chemistry: Numerical Methods for Physical and Analytical Chemistry / Prerna Bansal. – De Gruyter, 2020. – 150 p.
- 38.Beers K. J. Numerical Methods for Chemical Engineering: Applications in Matlab / Kenneth J. Beers. – Cambridge : Cambridge University Press, 2007. – 488 p.
- 39.Chapra S. C. Numerical methods for engineers / Raymond P. Canale, Steven C. Chapra. – McGraw Hill, 2014. – 992 p.
- 40.Constantinides A. Numerical Methods for Chemical Engineers with Matlab Applications / Alkis Constantinides, Navid Mostoufi. – Upper Saddle River, N.J : Prentice Hall PTR, 1999. – 559 p.
- 41.Davis M. E. Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers / Mark E. Davis. – New York : John Wiley & Sons, Inc., 1984. – 267 p.
- 42.Krijnen W. P. Computational and Statistical Methods for Chemical Engineering / Wim P. Krijnen, Ernst C. Wit. – Boca Raton : CRC Press, 2023. – 382 p.
- 43.Law V. J. Numerical Methods for Chemical Engineers Using Excel, VBA, and Matlab / Victor J. Law. – Boca Raton : CRC Press, 2013. – 247 p.
- 44.Montgomery D. C. Applied Statistics and Probability for Engineers / Douglas C. Montgomery, George C. Runger. – 7th Edition. – Wiley, 2018. – 720 p.
- 45.Riggs J. B. An introduction to numerical methods for chemical engineers / James B. Riggs. – 2nd ed. – Lubbock : Texas Tech University, 1994. – 472 p.
- 46.Shardt Y. A. W. Statistics for Chemical and Process Engineers. A Modern Approach / Yuri A. W. Shardt. – 2nd ed. – Springer, 2022. – 460 p.
- 47.Yeo Y. K. Chemical Engineering Computation with MATLAB / Yeong Koo Yeo. 2nd Edition. – Boca Raton : CRC Press, 2022. – 847 p.

ДОДАТКИ

ДОДАТОК А. ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНОГО АНАЛІЗУ ЯК МЕТРОЛОГІЧНОЇ ПРОЦЕДУРИ

Сучасна хімія та хімічна технологія використовує широкий арсенал методів аналізу, які потребують не тільки теоретичних знань, а й практичних експериментальних та інструментальних навиків. Особливістю хімічного аналізу як метрологічної процедури є те, що виміру підлягає одночасно декілька величин, тому процес вимірювання складається, як правило, з декількох стадій, а саме вимірювання має непрямий характер. Реальні досліджувані зразки являють собою складні багатокомпонентні та/або багатозфазні системи, для яких практично неможливо врахувати всі можливі види взаємодій під час проведення операцій з вимірювання. У зв'язку з цим похибки є невід'ємною частиною будь-яких вимірювань, а їх визначення та врахування є важливим завданням хіміка-технолога. Похибки виміру виникають внаслідок багатьох причин: недосконалість засобів вимірювання, методів вимірювання, зовнішні збурення (постійні або змінні), індивідуальні якості дослідника, недостатня ретельність проведення й обробки результатів виміру тощо.

Класифікація похибок вимірювань

Під *похибкою виміру* розуміють відхилення виміру x_B від істинного значення x_I вимірюваної величини:

$$\Delta x = x_B - x_I$$

Оскільки істинне значення величини є невідомим, а при уточненні виміру дослідник лише асимптотично наближається до точного, то числове значення похибки також залишається невідомим. Тому на практиці використовують умовно істинне, або дійсне x_D , значення:

$$\Delta x = x_B - x_D$$

Існує декілька підходів до класифікації похибок; розглянемо найбільш поширені:

I. За способом вираження розрізняють абсолютні та відносні похибки,

які розглянуто у розділі 1. Додатково, прикладом абсолютної похибки є стандартне відхилення, а прикладом відносної – коефіцієнт варіації.

II. За характером зміни результатів при повторних вимірах, розрізняють систематичні, випадкові та грубі похибки (промахи).

Систематична похибка виміру (систематична похибка) – складова частина похибки результату виміру, що залишається постійною або закономірно змінюється при повторних вимірах однієї й тієї самої величини. Систематичні похибки не залежать від кількості вимірів; їх можна враховувати та виключати з результату виміру.

В залежності від характеру прояву розрізняють постійні, прогресивні, періодичні похибки та похибки, які змінюються за складним законом.

Постійні похибки – похибки, які тривалий час зберігають своє значення і знак; вони зустрічаються найчастіше.

Прогресивні похибки – неперервно зростаючі або спадаючі похибки. До них відносяться, наприклад, похибки внаслідок розрядження акумулятору та батареї.

Періодичні похибки – похибки, значення яких є періодичною функцією часу або переміщення показчика вимірювального засобу. Така похибка виникає, коли вісь обертання стрілки приладу не пристав до центру кола шкали.

Похибки, які змінюються за складним законом виникають внаслідок сумісної дії декількох систематичних похибок.

Випадкова похибка виміру (випадкова похибка) – складова частина похибки результату виміру, що змінюється випадковим чином (за знаком та за значенням) при повторних вимірах, проведених з однаковою ретельністю, тієї ж самої величини.

Випадкова похибка не може бути виключена з результату виміру, однак при проведенні деякої кількості повторних вимірів методи теорії імовірності та математичної статистики дозволяють дещо покращити результат, тобто знайти значення вимірювальної величини, більш близьке до істинного, ніж результат однократного вимірювання: при $n \rightarrow \infty$, $\sum \Delta x_i \rightarrow 0$, $x_B \rightarrow x_I$.

Промах – похибка результату окремого виміру, що входить до ряду

вимірів, яка для даних умов різко відрізняється від інших результатів даного ряду. Інколи замість терміну «промах» використовують термін *груба похибка виміру*. Результати вимірів, що містять грубі похибки, не приймають до уваги та виключають з ряду вимірювань.

Найбільш розповсюдженими причинами промахів є: помилка спостерігача, несправність вимірювальної апаратури, різка зміна умов вимірювання та інші випадкові впливи. Розглянемо декілька прикладів.

Неправильне врахування малих позначок на шкалі: 5 поділок приймають за 10, або відлік ведуть не в тому напрямку, в якому відградує шкала (якщо нуль розташований з права), або не враховують, що на логарифмічній шкалі ціна найменшого ділення в середині шкали змінюється.

Неправильний запис результату спостереження: перестановка цифр – 369 замість 396, або неправильний запис маси гирь. Описка може виникнути, коли один учасник досліду диктує іншому відлік показань приладу.

Помилки при маніпуляціях з приладами або елементами вимірювальної установки. Промахи у таких випадках виникають внаслідок недостатнього досвіду або кваліфікації дослідника; при цьому весь ряд спостережень слід скасувати.

III. За причиною виникнення виділяють інструментальні, реактивні, методичні, суб'єктивні похибки, а також похибки, які виникають внаслідок зміни умов вимірювання; похибки, які виникають внаслідок неправильної установки вимірювального засобу; похибки еталонів тощо.

IV. За способом обробки результатів похибки середньоарифметичні та середньоквадратичні, середньоімовірні похибки.

V. В залежності від того, оцінюється похибка вимірюваної величини чи результат непрямого вимірювання, розрізняють похибки прямих та непрямих вимірів.

VI. За кількістю проведених вимірів – похибки однократного виміру та похиби порівнюваних рядів вимірів, серій тощо.

Загальні правила представлення результатів вимірювань

- Якщо інструментальна похибка має більшу кількість десяткових знаків, ніж точність відліку, то кількість десяткових знаків має відповідати точності відліку результату виміру.
- Якщо інструментальна похибка має меншу кількість десяткових знаків, ніж точність відліку, то результат виміру слід представляти з кількістю знаків, що відповідає інструментальній похибці.
- Округлення результатів виміру, отриманих цифровим методом, виконується до кількості знаків, що відповідає похибці засобу вимірювання.
- Якщо результат виміру отримано між поділками шкали, то інтерполювати покази можна лише у тому випадку, якщо це вказано у інструкції до засобу вимірювання; інакше встановлюються довірчий інтервал, що відповідає відстані між поділками.

Результат представляють таким чином:

концентрація кисню C у зразку води за результатами багатократних вимірів з 60 значень складає $C = 5,1 \pm 0,1 \frac{\text{мг}}{\text{дм}^3}$ при $p=0,95$.

або

дійсне значення концентрації кисню C у зразку води за результатами багатократних вимірів з 60 значень знаходиться у межах від 5,0 до 5,2 мг/дм³ з імовірністю $p=0,95$.

ДОДАТОК Б. СХЕМА ЄДИНОГО ДІЛЕННЯ

У випадку, якщо розрахунки за методом Гауса виконують *в електронних таблицях*, зручно користатися наочним представленням алгоритму, що має назву *схема єдиного ділення*. Покажемо принцип побудови схеми єдиного ділення на прикладі системи з трьох лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + a_{13} \cdot x_3 = b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + a_{23} \cdot x_3 = b_2 \\ a_{31} \cdot x_1 + a_{32} \cdot x_2 + a_{33} \cdot x_3 = b_3. \end{cases} \quad (\text{Б.1})$$

Для системи (Б.1) схема єдиного ділення подається у вигляді таблиці, що включає чотири етапи розрахунків (див. таблицю Б.1).

Розрахунок за схемою єдиного повністю відповідає алгоритму методу Гауса. На першому етапі записують до таблиці матрицю коефіцієнтів і стовпець вільних членів системи (Б.1), а також готують дані для контролю правильності розрахунків (у стовпчику контрольних сум):
$$c_i = \sum_{j=1}^3 a_{ij} + b_i \quad (i = 1, 2, 3).$$

Зауваження. Концепція «контрольної суми» передбачає розрахунок спеціальної величини для кожного кроку розрахунку двома незалежними способами. Якщо на певному кроці отримані двома незалежними способами значення вказаної величини (контрольної суми) *не збігаються* – значить, на цьому кроці *припустилися помилки*. І потрібно виправити розрахунки тільки на цьому кроці.

Окремо, четвертим рядком першого етапу, записують перетворений (нормований) перший рядок розширеної матриці системи (всі коефіцієнти вихідної матриці, поділені на a_{11}), який в подальшому буде «викреслений» з розгляду (цей рядок починається з одиниці). Контрольні суми для цього рядка $\gamma_1 = 1 + \lambda_{12} + \lambda_{13} + \beta_1$ і $\gamma_1 = \frac{c_1}{a_{11}}$ (якщо усе розраховано правильно, значення мають збігатись).

На другому етапі до таблиці заносять решту коефіцієнтів нормованої системи (всі коефіцієнти вихідної матриці, поділені на a_{11}), крім першого рядка, який було розраховано на першому етапі: $a_{ij}^{(1)} (i = 2, 3; j = 2, 3)$,

$b_i^{(1)} (i = 2, 3)$. Контрольні суми для цього рядка $c_i^{(1)} = \sum_{j=2}^3 a_{ij}^{(1)} + b_i^{(1)}$ і $c_i^{(1)} = c_i - a_{ij}\gamma_1, i = 2, 3$; (якщо усе розраховано правильно, значення мають збігатись).

Таблиця Б.1. Метод Гауса, реалізований у вигляді схеми єдиного ділення

Хід	Етапи	Коефіцієнт при			Права частина рівнянь	Контрольна сума 1	Контрольна сума 2
		x_1	x_2	x_3			
Прямий хід	1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	b_1	$c_1 = a_{11} + a_{12} + a_{13} + b_1$	-
		a_{21}	a_{22}	a_{23}	b_2	$c_2 = a_{21} + a_{22} + a_{23} + b_2$	
		a_{31}	a_{32}	a_{33}	b_3	$c_3 = a_{31} + a_{32} + a_{33} + b_3$	
	2	$1 = \frac{a_{11}}{a_{11}}$	$\lambda_{12} = \frac{a_{12}}{a_{11}}$	$\lambda_{13} = \frac{a_{13}}{a_{11}}$	$\beta_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$	$\gamma_1 = \frac{c_1}{a_{11}}$	$\gamma_1 = 1 + \lambda_{12} + \lambda_{13} + \beta_1$
	3		$a_{22}^{(1)} = a_{22} - a_{21}\lambda_{12}$	$a_{23}^{(1)} = a_{23} - a_{21}\lambda_{13}$	$b_2^{(1)} = b_2 - a_{21}\beta_1$	$c_2^{(1)} = c_2 - a_{21}\gamma_1$	$c_2^{(1)} = a_{22}^{(1)} + a_{23}^{(1)} + b_2^{(1)}$
			$a_{32}^{(1)} = a_{32} - a_{31}\lambda_{12}$	$a_{33}^{(1)} = a_{33} - a_{31}\lambda_{13}$	$b_3^{(1)} = b_3 - a_{31}\beta_1$	$c_3^{(1)} = c_3 - a_{31}\gamma_1$	$c_3^{(1)} = a_{32}^{(1)} + a_{33}^{(1)} + b_3^{(1)}$
	3		$1 = \frac{a_{22}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$	$\alpha_{23} = \frac{a_{23}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$	$\beta_2 = \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$	$\gamma_2 = \frac{c_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$	$\gamma_2 = 1 + \lambda_{23} + \beta_2$
				$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - a_{32}^{(1)}\lambda_{23}$	$b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - a_{32}^{(1)}\beta_2$	$c_3^{(2)} = a_{33}^{(2)} + b_3^{(2)}$	$c_3^{(2)} = c_3^{(1)} - a_{32}^{(1)}\gamma_2$
			$1 = \frac{a_{33}^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}$	$\beta_3 = \frac{b_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}$		$\gamma_3 = \frac{c_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}$	$\gamma_3 = 1 + \beta_3$

Хід	Етапи	Коефіцієнт при			Права частина рівнянь	Контрольна сума 1	Контрольна сума 2
		x_1	x_2	x_3			
Зворотній хід	4	1	1	1	$\begin{aligned} x_3 &= \beta_3 \\ x_2 &= \beta_2 - \lambda_{23}x_3 \\ x_1 &= \beta_1 - \lambda_{13}x_3 - \lambda_{12}x_2 \end{aligned}$	$\begin{aligned} \bar{x}_3 &= \gamma_3 \\ \bar{x}_2 &= \gamma_2 - \lambda_{23}\bar{x}_3 \\ \bar{x}_1 &= \gamma_3 - \lambda_{13}\bar{x}_3 - \lambda_{12}\bar{x}_2 \end{aligned}$	$\begin{aligned} \bar{x}_3 &= 1 + x_3 \\ \bar{x}_2 &= 1 + x_2 \\ \bar{x}_1 &= 1 + x_1 \end{aligned}$

Окремо, третім рядком другого етапу, записують перетворений (нормований) рядок перетвореної матриці другого етапу (всі коефіцієнти вихідної матриці, поділені на $a_{22}^{(1)}$), який в подальшому буде «викреслений» з розгляду (цей рядок починається з одиниці). Контрольні суми для цього рядка $\gamma_2 = 1 + \lambda_{23} + \beta_2$ і $\gamma_2 = \frac{c_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$ (якщо усе розраховано правильно, значення мають збігатись).

На третьому етапі розраховують $a_{33}^{(2)}$, $b_3^{(2)}$ способом, аналогічним перетворенню на другому етапі. Контрольні суми для цього рядка $c_3^{(2)} = a_{33}^{(2)} + b_3^{(2)}$ та $c_3^{(2)} = c_3^{(1)} - a_{32}^{(1)}\gamma_2$ (якщо усе розраховано правильно, значення мають збігатись).

Окремо, другим рядком третього етапу, записують перетворений (нормований) рядок перетвореної матриці третього етапу (всі коефіцієнти вихідної матриці, поділені на $a_{33}^{(2)}$). Цей рядок також має починатися з одиниці; він є останнім, що залишився у випадку системи з трьома змінними, і в подальшому буде «викреслений» з розгляду. Контрольні суми для цього рядка $\gamma_3 = \frac{c_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}$ та $\gamma_3 = 1 + \beta_3$ (якщо усе розраховано правильно, значення мають збігатись).

На четвертому етапі (зворотній хід) для розрахунків використовують рядки перетвореної до трикутного вигляду системи (Б.1), тобто останні рядки першого, другого, третього етапів. При цьому у стовпці, що відповідають змінним x_1 , x_2 , x_3 , заносять «1» (як показано останньому - нижньому блоці таблиці Б.1). З останнього рядка третього етапу визначають $x_3^* = \beta_3$, після цього,

маючи значення x_3^* , з останнього рядка другого етапу визначають x_2^* , а потім x_1^* і маючи значення x_3^*, x_2^* , з останнього рядка першого етапу визначають x_1^* . Контрольні суми для цього етапу $\overline{x_3} = \gamma_3$ та $\overline{x_3} = 1 + x_3$, $\overline{x_2} = \gamma_2 - \lambda_{23}\overline{x_3}$ та $\overline{x_2} = 1 + x_2$, $\overline{x_1} = \gamma_1 - \lambda_{13}\overline{x_3} - \lambda_{12}\overline{x_2}$ та $\overline{x_1} = 1 + x_1$.

Зауваження. Схеми єдиного ділення, аналогічні таблиці Б.1, можна побудувати для розв'язання систем лінійних рівнянь четвертого та вищих порядків.

Приклад Б.1. Розв'язати систему лінійних рівнянь з прикладу 3.5 з використанням схеми єдиного ділення.

Розв'язок: Складемо схему єдиного ділення для системи лінійних рівнянь (рис. Б.1).

$$\begin{cases} 0,80x_1 + 0,10x_2 + 0,10x_3 = 1840 \\ 0,20x_1 + 0,70x_2 + 0,10x_3 = 1860 \\ 0,05x_1 + 0,05x_2 + 0,90x_3 = 236. \end{cases}$$

	В	С	Д	Е	F	Г	Н
1	Етап	x_1	x_2	x_3	Вільні члени	Контрольна сума 1	Контрольна сума 2
2	Перший	0,8	0,1	0,1	1840	1841	
3		0,2	0,7	0,1	1860	1861	
4		0,05	0,05	0,9	236	237	
5		1,000	0,1250	0,1250	2300,000	2301,250	2301,250
6	Другий		0,6750	0,0750	1400,000	1400,750	1400,750
7			0,0438	0,8938	121,000	121,938	121,938
8			1,0000	0,1111	2074,074	2075,185	2075,185
9	Третій			0,8889	30,259	31,148	31,148
10				1,0000	34,042	35,042	35,042
11	Четвертий	x_3	=	34,042		35,042	35,042
12		x_2	=	2070,292		2071,292	2071,292
13		x_1	=	2036,958		2037,958	2037,958

Рис. Б.1. Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь за схемою єдиного ділення (до прикладу 3.4)

Відповідь: $x_1 = 2036,96$; $x_2 = 2070,29$; $x_3 = 34,04$.

ДОДАТОК В. АНАЛІТИЧНИЙ МЕТОД ВИБОРУ ВИДУ АПРОКСИМУЮЧОЇ ФУНКЦІЇ

Як відмічали раніше, при використанні графічного методу вибору виду апроксимуючої функції виникають складнощі, які пов'язані з тим, що на невеликому відрізку, де отримана експериментальна функція, графіки багатьох функцій схожі між собою. Це ускладнює вибір апроксимуючої функції.

Аналітичний метод, базується на використанні деяких аналітичних критеріїв, що дозволяють обрати загальний виду емпіричної функції з переліку тих функцій, з якими працює метод. Недоліком методу є те, що перелік функцій досить обмежений.

Розглянемо вибір виду емпіричної функції з двома параметрами.

При аналізі й описі закономірностей протікання процесів і явищ в хімії та хімічній технології емпіричну формулу найчастіше обирають серед таких функцій:

- I) $y = a \cdot x + b$ - лінійна;
- II) $y = a \cdot b^x$ - показникова;
- III) $y = \frac{1}{a \cdot x + b}$ - дробово-раціональна;
- IV) $y = a \cdot \ln(x) + b$ - логарифмічна;
- V) $y = a \cdot x^b$ - ступенева, причому при $b > 0$ – залежність параболічна, а при $b < 0$ - гіперболічна;
- VI) $y = a + \frac{b}{x}$ - гіперболічна;
- VII) $y = \frac{x}{a \cdot x + b}$ - дробово-раціональна.

З метою визначення функції, що найкраще описує дослідні дані, виконують такі розрахунки.

1. За даними таблиці В.1 знаходять:

Таблиця В.1

x	x_1	x_2	...	x_n
y	y_1	y_2	...	y_n

$$\begin{aligned}
x_{\text{ар}} &= \frac{x_1 + x_n}{2} \text{ (середнє арифметичне значень } x_1 \text{ та } x_n); & y_{\text{ар}} &= \frac{y_1 + y_n}{2}; \\
x_{\text{геом}} &= \sqrt{x_1 \cdot x_n} \text{ (середнє геометричне);} & y_{\text{геом}} &= \sqrt{y_1 \cdot y_n}; \\
x_{\text{гарм}} &= \frac{2x_1 x_n}{x_1 + x_n} \text{ (середнє гармонічне);} & y_{\text{гарм}} &= \frac{2y_1 y_n}{y_1 + y_n}.
\end{aligned}$$

2. За даними табл. В.1, користуючись, наприклад, інтерполяційними формулами (або побудованим графіком шуканої функції, навколо якого групуються дослідні точки (x_i, y_i)), знаходять значення $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$, що відповідають визначеним раніше значенням $x_{\text{ар}}$, $x_{\text{геом}}$, $x_{\text{гарм}}$. Причому, якщо якесь із цих значень, наприклад, $x_{\text{ар}}$ (або $x_{\text{геом}}$, $x_{\text{гарм}}$), збігається з табличним значенням x_i ($i = 1, 2, \dots, n$), то відповідне значення $y_{\text{ар}}^*$ (або $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$) буде дорівнювати табличному значенню y_i . В загальному випадку $y_{\text{ар}}^*$ можна визначити, користуючись формулою лінійної інтерполяції

$$y_{\text{ар}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} (x_{\text{ар}} - x_i), \quad (\text{В.1})$$

де x_i, x_{i+1} – значення з таблиці В.1, між якими знаходиться $x_{\text{ар}}$ ($x_i < x_{\text{ар}} < x_{i+1}$); $y_i < y_{\text{ар}}^* < y_{i+1}$ ($i = 1, 2, \dots, n - 1$). Аналогічно визначають $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$.

3. Знаходять такі величини:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{ар}}|, & \varepsilon_4 &= |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{ар}}|, \\
\varepsilon_2 &= |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{геом}}|, & \varepsilon_5 &= |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{геом}}|, \\
\varepsilon_3 &= |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{гарм}}|, & \varepsilon_6 &= |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{ар}}|, & \varepsilon_7 &= |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{гарм}}|.
\end{aligned}$$

і серед них визначають мінімальне значення

$$\varepsilon = \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_7\}.$$

4. Обирають емпіричну формулу серед функцій I÷VII. Шукана емпірична формула матиме вигляд:

$$\begin{aligned}
\text{I)} \quad & y = a \cdot x + b & - & \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_1; \\
\text{II)} \quad & y = a \cdot b^x & - & \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_2; \\
\text{III)} \quad & y = \frac{1}{a \cdot x + b} & - & \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_3; \\
\text{IV)} \quad & y = a \cdot \ln(x) + b & - & \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_4;
\end{aligned}$$

$$\begin{array}{ll} \text{V)} & y = a \cdot x^b \quad - \quad \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_5; \\ \text{VI)} & y = a + \frac{b}{x} \quad - \quad \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_6; \\ \text{VII)} & y = \frac{a \cdot x + b}{x} \quad - \quad \text{якщо } \varepsilon = \varepsilon_7. \end{array}$$

Слід враховувати, що функції I÷VII монотонні, і тому відповідні їм дослідні дані (x_i, y_i) при $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$) повинні мати постійний знак приросту $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$). В іншому випадку залежності I÷VII не рекомендовані.

Такий спосіб вибору емпіричної формули є грубо орієнтовним, оскільки він не враховує поведінку всіх проміжних даних (x_i, y_i) . Також може статися, що змінні x і y підпорядковуються іншій закономірності, і тоді вид емпіричної формули буде відрізнитися від функцій I÷VII.

Примітка. При використанні цього методу вважатимемо, що початкові дані x_i, y_i ($i = 1, 2, \dots, n; n \geq 3$) додатні і $x_1 < x_2 < \dots < x_n$. Якщо ж всі $x_i < 0$ (або всі $y_i < 0$), то достатньо розглянути таблицю значень $(-x_i, y_i)$ (або відповідно $(x_i, -y_i)$). Аналогічно при $x_i < 0$ та $y_i < 0$ достатньо побудувати емпіричну формулу для таблиці $(-x_i, -y_i)$. У випадку, коли деякі із значень x_i, y_i додатні, а деякі – від'ємні, завжди можливо виконати заміну змінних, підібравши такі числа $M > 0$ і $N > 0$, при яких $\xi_i = M + x_i > 0$, $\eta_i = N + y_i > 0$. Тоді задача зводиться до знаходження емпіричної формули для додатних значень ξ_i і η_i ($i = 1, 2, \dots, n$).

Приклад В.1. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

Таблиця В.2. Експериментальні дані

x	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5
y	4,2	6	8,2	10,7	13,7	17	20,7	24,7

Користуючись аналітичним способом вибору апроксимуючої функції, знайти загальний вигляд емпіричної формули, який відповідає даним у таблиці В.2.

Розв'язок: побудуємо графік експериментальної функції (рисунок В.1).

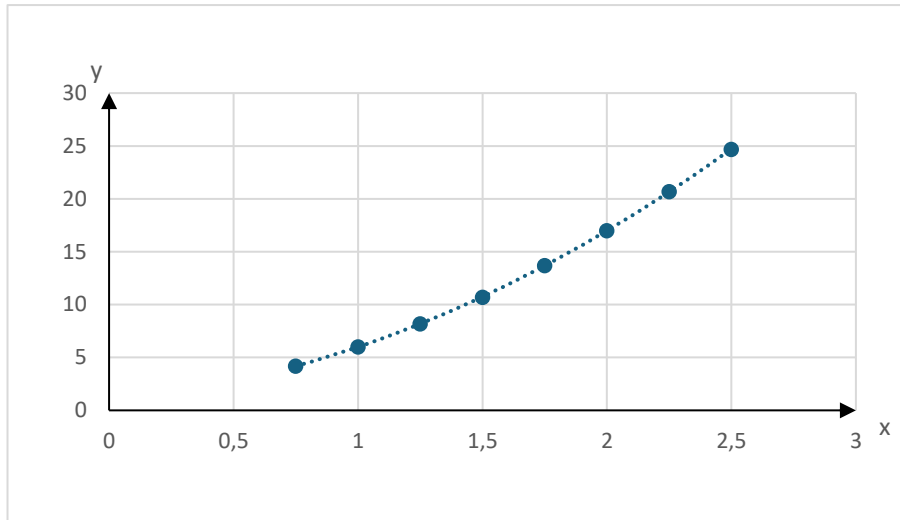


Рис. В.1. Графік вихідної табличної функції

Згідно з алгоритмом аналітичного способу вибору апроксимуючої функції розрахуємо необхідні параметри за даними таблиці В.2.

$$x_{\text{ар}} = \frac{x_1 + x_n}{2} = \frac{0,75 + 2,5}{2} = 1,625;$$

$$y_{\text{ар}} = \frac{y_1 + y_n}{2} = \frac{4,2 + 24,7}{2} = 14,45;$$

$$x_{\text{геом}} = \sqrt{x_1 \cdot x_n} = \sqrt{0,75 \cdot 2,5} = 1,3693;;$$

$$y_{\text{геом}} = \sqrt{y_1 \cdot y_n} = \sqrt{4,2 \cdot 24,7} = 10,1853;$$

$$x_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n} = \frac{2 \cdot 0,75 \cdot 2,5}{0,75 + 2,5} = 1,1538;$$

$$y_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot y_1 \cdot y_n}{y_1 + y_n} = \frac{2 \cdot 4,2 \cdot 24,7}{4,2 + 24,7} = 7,1792;$$

Далі знаходимо значення $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$, які відповідають знайденим значенням $x_{\text{ар}}$, $x_{\text{геом}}$, $x_{\text{гарм}}$. Для цього використовуємо формулу лінійної інтерполяції, де в якості вузлів інтерполяції x_i, x_{i+1} обираємо значення з табл. 6.4, між якими знаходиться ці точки $x_{\text{ар}} (x_i < x_{\text{ар}} < x_{i+1})$; $x_{\text{геом}} (x_i < x_{\text{геом}} < x_{i+1})$; $x_{\text{гарм}} (x_i < x_{\text{гарм}} < x_{i+1})$.

Знайдемо $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$:

$$y_{\text{ар}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{ар}} - x_i) = 10,7 + \frac{13,7 - 10,7}{1,75 - 1,5} \cdot (1,625 - 1,5) = 12,2.$$

$$y_{\text{геом}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{геом}} - x_i) = 8,2 + \frac{10,7 - 8,2}{1,5 - 1,25} \cdot (1,3693 - 1,25) = 9,393.$$

$$y_{\text{гарм}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{гарм}} - x_i) = 6 + \frac{8,2 - 6}{1,25 - 1,0} \cdot (1,1538 - 1,0) = 7,3534.$$

Знайдемо величини $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_7$:

$$\varepsilon_1 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{ар}}| = |12,2 - 14,45| = 2,25;$$

$$\varepsilon_2 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{геом}}| = |12,2 - 10,1853| = 2,0147;$$

$$\varepsilon_3 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{гарм}}| = |12,2 - 7,1792| = 5,0208;$$

$$\varepsilon_4 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{ар}}| = |9,393 - 14,45| = 5,057;$$

$$\varepsilon_5 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{геом}}| = |9,393 - 10,1853| = 0,7923;$$

$$\varepsilon_6 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{ар}}| = |7,3534 - 14,45| = 7,0966;$$

$$\varepsilon_7 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{гарм}}| = |7,3534 - 7,1792| = 0,1742;$$

Оскільки $\varepsilon = \min\{\varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_7\} = \varepsilon_7 = 0,1742$, то шукана емпірична формула матиме вигляд:

$$y = \frac{x}{a \cdot x + b}$$

Приклад В.2. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

Таблиця В.3. Експериментальні дані

x	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5
y	5	12,1	23,4	40,6	64,2	96,1	136,9	187,6

Користуючись аналітичним способом вибору апроксимуючої функції, знайти загальний вигляд емпіричної формули, який відповідає даним у таблиці В.3.

Розв'язок: побудуємо графік експериментальної функції (рисунок В.2) .

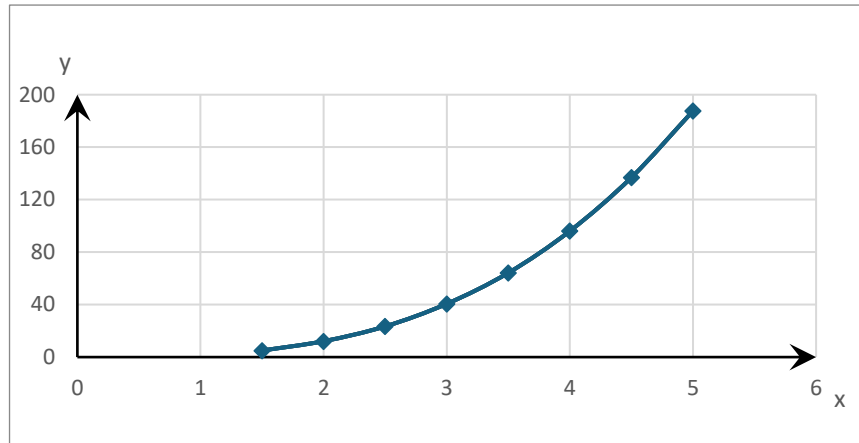


Рис. В.2. Графік вихідної табличної функції

Згідно з алгоритмом аналітичного способу вибору апроксимуючої функції розрахуємо необхідні параметри за даними таблиці В.3.

$$x_{\text{ар}} = \frac{x_1 + x_n}{2} = \frac{1,5 + 5}{2} = 3,25;$$

$$y_{\text{ар}} = \frac{y_1 + y_n}{2} = \frac{5 + 187,6}{2} = 96,3;$$

$$x_{\text{геом}} = \sqrt{x_1 \cdot x_n} = \sqrt{1,5 \cdot 5} = 2,7386;$$

$$y_{\text{геом}} = \sqrt{y_1 \cdot y_n} = \sqrt{5 \cdot 187,6} = 30,6268;$$

$$x_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n} = \frac{2 \cdot 1,5 \cdot 5}{1,5 + 5} = 2,3077;$$

$$y_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot y_1 \cdot y_n}{y_1 + y_n} = \frac{2 \cdot 5 \cdot 187,6}{5 + 187,6} = 9,7404.$$

Далі знаходимо значення $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$, які відповідають знайденим значенням $x_{\text{ар}}$, $x_{\text{геом}}$, $x_{\text{гарм}}$. Для цього використовуємо формулу лінійної інтерполяції, де в якості вузлів інтерполяції x_i, x_{i+1} обираємо значення з табл. 6.4, між якими знаходиться ці точки $x_{\text{ар}} (x_i < x_{\text{ар}} < x_{i+1})$; $x_{\text{геом}} (x_i < x_{\text{геом}} < x_{i+1})$; $x_{\text{гарм}} (x_i < x_{\text{гарм}} < x_{i+1})$.

Знайдемо $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$:

$$y_{\text{ар}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{ар}} - x_i) = 40,6 + \frac{64,2 - 40,6}{3,5 - 3} \cdot (3,25 - 3) = 52,4.$$

$$y_{\text{геом}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{геом}} - x_i) = 23,4 + \frac{40,6 - 23,4}{3 - 2,5} \cdot (2,7386 - 2,5) = 31,60784.$$

$$y_{\text{гарм}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{гарм}} - x_i) = 23,4 + \frac{40,6 - 23,4}{3 - 2,5} \cdot (2,3077 - 2,5) = 16,78488.$$

Знайдемо величини $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_7$:

$$\varepsilon_1 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{ар}}| = |52,4 - 96,3| = 43,2;$$

$$\varepsilon_2 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{геом}}| = |52,4 - 30,6268| = 21,7732;$$

$$\varepsilon_3 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{гарм}}| = |52,4 - 9,7404| = 42,6596;$$

$$\varepsilon_4 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{ар}}| = |31,60784 - 96,3| = 64,6922;$$

$$\varepsilon_5 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{геом}}| = |31,60784 - 30,6268| = 0,98104;$$

$$\varepsilon_6 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{ар}}| = |16,78488 - 96,3| = 79,51512;$$

$$\varepsilon_7 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{гарм}}| = |16,78488 - 9,7404| = 7,0445.$$

Оскільки $\varepsilon = \min\{\varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_7\} = \varepsilon_5 = 0,98104$, то шукана емпірична формула матиме вигляд:

$$y = a \cdot x^b.$$

Приклад В.3. Залежність $y = f(x)$ описується такою таблицею:

Таблиця В.4. Експериментальні дані

x	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5	2,75
y	2	2,68	3,21	3,67	4,07	4,43	4,75	5,03

Користуючись аналітичним способом вибору апроксимуючої функції, знайти загальний вигляд емпіричної формули, який відповідає даним у таблиці В.4.

Розв'язок: побудуємо графік експериментальної функції (рис. В.3).

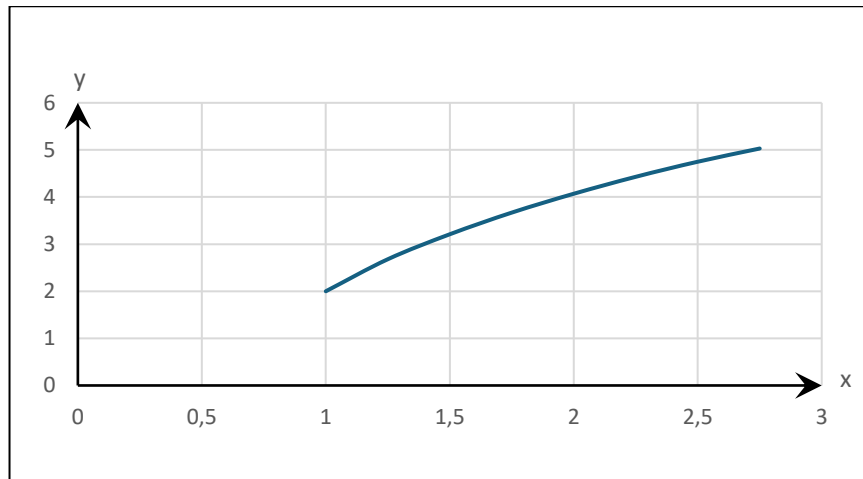


Рис. В.3. Графік вихідної табличної функції

Згідно з алгоритмом аналітичного способу вибору апроксимуючої функції розрахуємо необхідні параметри за даними таблиці В.4.

$$x_{\text{ар}} = \frac{x_1 + x_n}{2} = \frac{1 + 2,75}{2} = 1,875;$$

$$y_{\text{ар}} = \frac{y_1 + y_n}{2} = \frac{2 + 5,03}{2} = 3,515;$$

$$x_{\text{геом}} = \sqrt{x_1 \cdot x_n} = \sqrt{1 \cdot 2,75} = 1,658;$$

$$y_{\text{геом}} = \sqrt{y_1 \cdot y_n} = \sqrt{2 \cdot 5,03} = 3,171;$$

$$x_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n} = \frac{2 \cdot 1 \cdot 2,75}{1 + 2,75} = 1,466;$$

$$y_{\text{гарм}} = \frac{2 \cdot y_1 \cdot y_n}{y_1 + y_n} = \frac{2 \cdot 2 \cdot 5,03}{2 + 5,03} = 2,862.$$

Далі знаходимо значення $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$, які відповідають знайденим значенням $x_{\text{ар}}$, $x_{\text{геом}}$, $x_{\text{гарм}}$. Для цього використовуємо формулу лінійної інтерполяції, де в якості вузлів інтерполяції x_i, x_{i+1} обираємо значення з табл. 6.4, між якими знаходиться ці точки $x_{\text{ар}} (x_i < x_{\text{ар}} < x_{i+1})$; $x_{\text{геом}} (x_i < x_{\text{геом}} < x_{i+1})$; $x_{\text{гарм}} (x_i < x_{\text{гарм}} < x_{i+1})$.

Знайдемо $y_{\text{ар}}^*$, $y_{\text{геом}}^*$, $y_{\text{гарм}}^*$:

$$y_{\text{ар}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{ар}} - x_i) = 3,67 + \frac{4,07 - 3,67}{2 - 1,75} \cdot (1,875 - 1,75) = 3,87.$$

$$y_{\text{геом}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{геом}} - x_i) = 3,21 + \frac{3,67 - 3,21}{1,75 - 1,5} \cdot (1,658 - 1,5) = 3,50072.$$

$$y_{\text{гарм}}^* = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x_{\text{гарм}} - x_i) = 2,68 + \frac{3,21 - 2,68}{1,5 - 1,25} \cdot (1,466 - 1,25) = 3,13792.$$

Знайдемо величини $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_7$:

$$\varepsilon_1 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{ар}}| = |3,87 - 3,51| = 0,355;$$

$$\varepsilon_2 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{геом}}| = |3,87 - 3,171| = 0,699;$$

$$\varepsilon_3 = |y_{\text{ар}}^* - y_{\text{гарм}}| = |3,87 - 2,862| = 1,008;$$

$$\varepsilon_4 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{ар}}| = |3,50072 - 3,51| = 0,01428;$$

$$\varepsilon_5 = |y_{\text{геом}}^* - y_{\text{геом}}| = |3,50072 - 3,171| = 0,32972;$$

$$\varepsilon_6 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{ар}}| = |3,13792 - 3,51| = 0,37708;$$

$$\varepsilon_7 = |y_{\text{гарм}}^* - y_{\text{гарм}}| = |3,13792 - 2,862| = 0,27592.$$

Оскільки $\varepsilon = \min\{\varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_7\} = \varepsilon_4 = 0,01428$, то шукана емпірична формула матиме вигляд:

$$y = a \cdot \ln(x) + b$$

ДОДАТОК Г. ЕЛЕМЕНТИ КОМБІНАТОРИКИ

Основний принцип комбінаторики (правило добутку). Нехай необхідно послідовно виконати k дій. Якщо першу можна виконати n_1 способами, після чого другу – n_2 способами, потім третю – n_3 способами і т.д. до k дії, яку можна виконати n_k способами, то всі k дій можуть бути виконані $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3 \cdot \dots \cdot n_k$ способами.

Розміщення із n елементів по m – це такі їх сполучення, які відрізняються одне від одного або елементами або їх порядком.

Число розміщень з n елементів по m позначається A_n^m . Для будь-яких натуральних чисел n і m ($m \leq n$) має місце формула:

$$A_n^m = \underbrace{n(n-1)(n-2)\dots(n-m+1)}_{m \text{ множників}} = \frac{n!}{(n-m)!} \quad (\text{Г.1})$$

де $n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \dots n$, покладають $0! = 1$.

Наприклад, розміщення із трьох елементів a, b, c по два – ab, ac, bc, ba, ca, cb – розрахуємо за формулою Г.1:

$$A_3^2 = \frac{3!}{(3-2)!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3}{1} = 6$$

Перестановки із n елементів – це такі їх сполучення, які відрізняються одне від одного тільки порядком елементів. Наприклад, перестановки із трьох елементів a, b, c : $abc, acb, bac, bca, cab, cba$. Число всіх перестановок із n елементів позначається P_n і визначається за формулою:

$$P_n = n! = A_n^n$$

Якщо серед n елементів є однакові (a повторюється n_1 разів, b – n_2 разів, c – n_3 разів і т.д.), то

$$P_n = \frac{n!}{n_1! n_2! n_3! \dots}$$

Комбінацією з n елементів по m називають такі їх сполучення, які відрізняються одне від одного хоча б одним елементом. Наприклад, комбінації з трьох елементів a, b, c по два: ab, ac, bc . Число всіх комбінацій із n різних елементів по m позначається C_n^m і визначається за формулою:

$$C_n^m = \frac{n!}{m!(n-m)!} = \frac{A_n^m}{P_m} . \quad (\Gamma.2)$$

Наприклад, комбінацію із трьох елементів a, b, c по два розрахуємо за формулою $\Gamma.2$:

$$C_3^2 = \frac{A_3^2}{P_2} = \frac{6}{2} = 3 .$$

Основна властивість комбінацій: $C_n^m = C_n^{n-m}$. Числа розміщень, перестановок і комбінацій пов'язані рівністю:

$$A_n^m = P_m C_n^m$$

Правило суми: Якщо деякий об'єкт A можна вибрати із сукупності об'єктів m способами, а $B - n$ способами, причому ніякий вибір A не збігається з жодним з виборів B , то один з об'єктів A або B можна вибрати $m + n$ способами.

ДОДАТОК Д. ПОНЯТТЯ ПРО МОМЕНТИ ВИПАДКОВОЇ ВЕЛИЧИНИ

Початковим моментом k порядку випадкової величини X називається математичне сподівання k ступеня цієї випадкової величини:

$$v_k = M(X^k).$$

Якщо X – випадкова дискретна величина, то $v_k = \sum_{i=1}^n x_i^k p_i$.

Якщо X – неперервна випадкова величина, то $v_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) dx$.

Математичне сподівання випадкової величини X є початковим моментом першого порядку:

$$v_1 = M(X).$$

Центрованою випадковою величиною, що відповідає величині X , називається відхилення випадкової величини X від її математичного сподівання:

$$\overset{\circ}{X} = X - M(X).$$

Моменти центрованої випадкової величини називають *центральними моментами*. *Центральним моментом k порядку* випадкової величини X називається математичне сподівання k ступеня відповідної центрованої випадкової величини:

$$\mu_k = M(\overset{\circ}{X}^k) = M[X - M(X)]^k.$$

Зокрема,

$$\mu_1 = M(\overset{\circ}{X}) = M[X - M(X)] = 0;$$

$$\mu_2 = M(\overset{\circ}{X}^2) = M[X - M(X)]^2 = D(X),$$

тобто дисперсія випадкової величини X є центральним моментом другого порядку. Якщо X – випадкова дискретна величина, то $\mu_k = \sum_{i=1}^n [x_i - M(X)]^k p_i$, а якщо X – випадкова неперервна величина, то $\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} [x - M(X)]^k f(x) dx$.

Користуючись властивостями математичного сподівання, легко

одержати співвідношення, що зв'язують початкові і центральні моменти:

$$\mu_2 = v_2 - v_1;$$

$$\mu_3 = v_3 - 3v_1v_2 + 2v_1^3;$$

$$\mu_4 = v_4 - 4v_3v_1 + 6v_2v_1^2 + 3v_1^4.$$

Моменти більш високих порядків застосовуються у задачах хімічної технології рідко.

Центральний момент третього порядку служить для характеристики скошеності, або асиметрії розподілу.

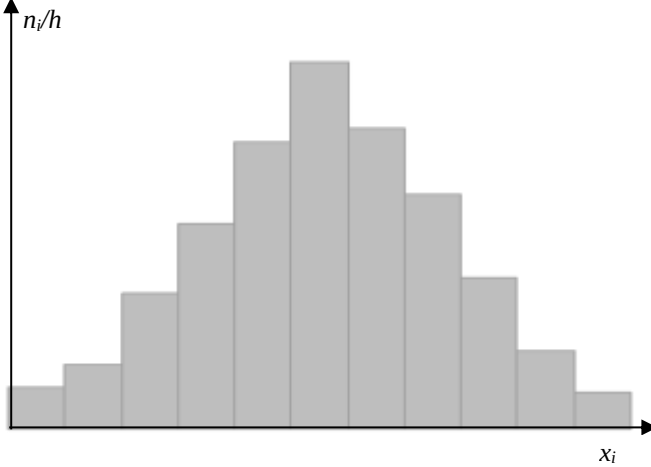
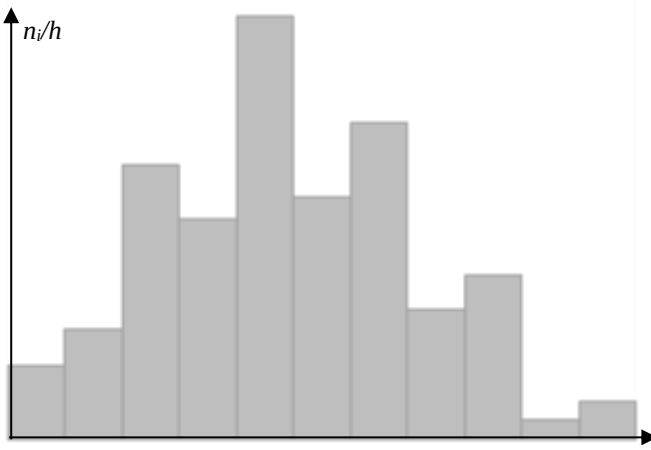
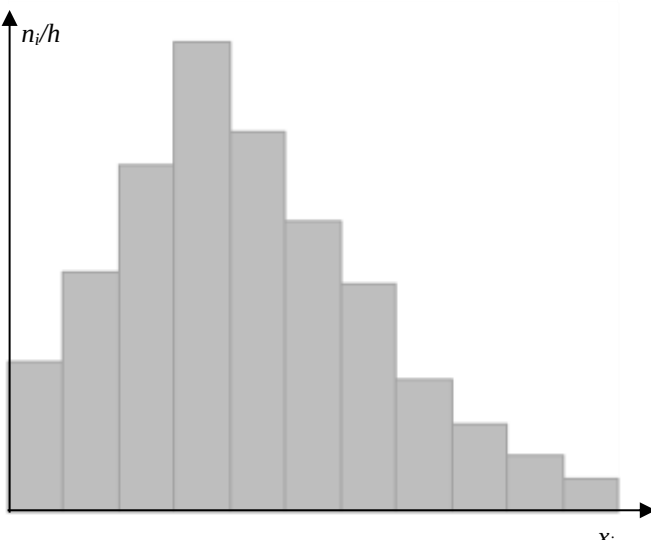
Асиметрією розподілу називається відношення центрального моменту третього порядку до куба стандартного відхилення:

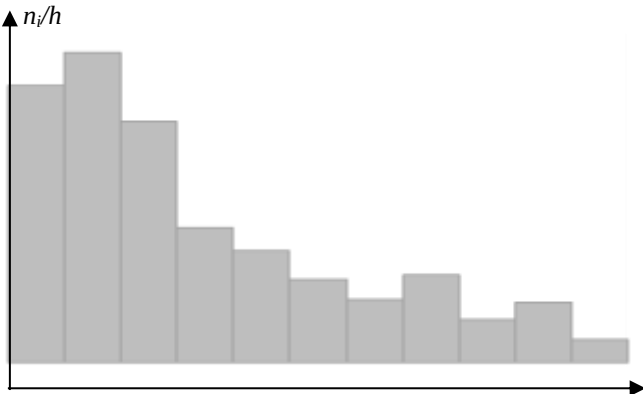
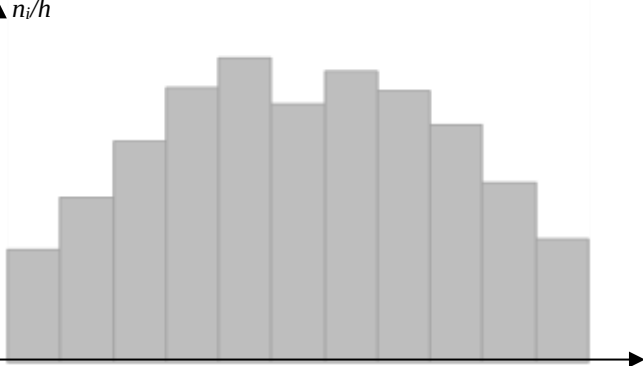
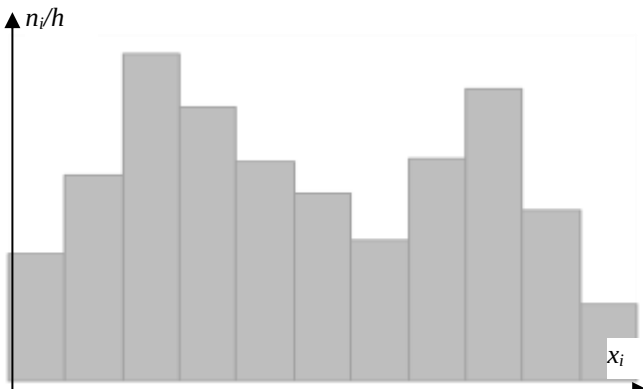
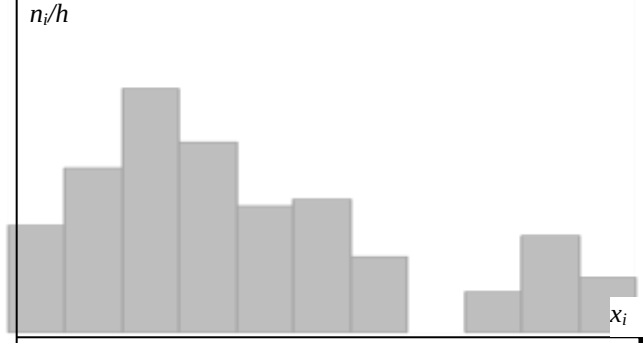
$$A_s = \frac{\mu_3}{\sigma^3}.$$

Центральний момент четвертого порядку служить для характеристики гостровершинності або плосковершинності розподілу. Такою характеристикою є *ексцес*, який визначається рівністю:

$$E_k = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3.$$

ДОДАТОК Е. ТИПИ ГІСТОГРАМ

Загальний вигляд та назва	Опис
 Звичайний тип (нормальний розподіл)	Середнє значення гістограми розташовано на середині розмаху даних. Цей тип зустрічається найчастіше.
 Гребінка	Частинні інтервали (класи) через один мають нижчі частоти. Цей тип зустрічається, коли число одиничних спостережень, що потрапляють в клас, коливається від класу до класу або коли діє певне правило округлення даних.
 Додатньо (від'ємно) скошений розподіл	Середнє значення гістограми локалізується ліворуч (праворуч) від центру розмаху. Така форма зустрічається, коли нижня (верхня) межа регулюється або теоретично, або коли ліве (праве) значення неможливо досягнути (наприклад, за технологічними умовами).

Загальний вигляд та назва	Опис
 Розподіл з обривом ліворуч (праворуч)	Середнє арифметичне локалізується далеко ліворуч(або праворуч у разі розподілу з обривом праворуч). Форма часто зустрічається при 100 % контролі виробів внаслідок поганої відтворюваності процесу
 Плато	Рівномірний і прямокутний розподіл. Такий тип зустрічається в суміші декількох розподілів, що мають різні середні.
 Двопіковий	Бімодальний тип. Така форма зустрічається у разі зміщення двох розподілів з далеко віддаленими середніми значеннями.
 З ізольованим піком	Поряд із розподілом звичайного типу з'являється маленький ізольований пік. Така форма зустрічається за наявності малих включень даних з іншого розподілу.