Позначення

Позначення	Значення
1	2
R^1	простір дійсних чисел
$x \in G$	x належить множині G (x – елемент множини G)
$i = \overline{1,n}$	i приймає значення від 1 до n (еквівалентно $i = 1,...,n$)
$\forall x \in G$	для всіх x, що належать множині G
$\exists x \in G$	існує x, що належить множині G
$K >> 1$	число K у багато разів більше, ніж 1
R^n	n-вимірний дійсний простір векторів-стовпців, тобто $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$, де $x_i \in R^1$, $i = \overline{1,n}$
$x \in R^n$	x – n-вимірний вектор-стовпець
x^T	вектор-рядок, транспонований до x
$x^{(k)} \in R^n$	$x^{(k)}$ – n-вимірний вектор-стовпець, k-й за номером у деякій нумерації
x_i	i-та компонента вектора x
$\left\{x^{(k)}\right\}$	послідовність $x^{(k)}$, тобто $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots$
$\{x \in G : T\}$	підмножина елементів множини G, що задовольняють умові T
$A = (a_{ij})$	матриця з елементами a_{ij}, де a_{ij} – елемент i-го рядка і j-го стовпця
A^T	матриця, транспонована до A, тобто матриця з елементами a_{ij}
A^{-1}	матриця, обернена до A
$R^{n \times m}$	множина матриць розмірності n на m

1	2
$E \in R^{n \times n}$	одинична матриця розмірності n на n, тобто $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$
$f : R^1 \to R^1$	дійсна функція однієї дійсної змінної, тобто якщо $x \in R^1$ й $y = f(x)$, то $y \in R^1$
$f : R^n \to R^m$	дійсна вектор-функція n дійсних змінних, тобто якщо $x \in R^n$ й $y = f(x)$, то $y \in R^m$
$\langle x, y \rangle$	скалярний добуток векторів x, y, тобто якщо $x, y \in R^n$, то $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$
$\lVert x \rVert$	евклідова норма вектора x, тобто якщо $x \in R^n$, то $\lVert x \rVert = \left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\langle x, x \rangle}$
$v_r\left(x^*\right)$	окіл точки $x^* \in R^n$ радіусу r, тобто $V_r(x^*) = \left\{ x \in R^n : \lVert x - x^* \rVert \le r \right\}$
Δ	оператор Лапласа. У випадку функції $u = u(x, y)$ двох незалежних змінних x і y він має вигляд $\Delta u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$
Δ^2	бігармонічний оператор. У випадку функції $u = u(x, y)$ двох незалежних змінних x і y він має вигляд $\Delta^2 u = \dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4} + 2\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} + \dfrac{\partial^4 u}{\partial y^4}$

Вступ

Не буває зайвої інформації, буває невміння нею розпорядитися.

Сучасний розвиток науки та обчислювальної техніки характеризується все більш зростаючим рівнем використання комп'ютерних моделей як для дослідження поведінки явищ та процесів, що оточують людину, так і для розв'язання практичних задач, пов'язаних з управлінням та прогнозуванням.

Вивчення навчальної дисципліни "Чисельні методи" дозволяє студентам оволодіти знаннями в галузі практичних методів рішення математичних проблем, що виникають у процесі інженерної діяльності та моделювання фізичних систем, засвоїти способи розрахунків на сучасних комп'ютерах із застосуванням пакетів спеціальних прикладних програм.

Об'єктом вивчення навчальної дисципліни є типові математичні задачі, до яких зводиться рішення практичних проблем, що виникають у ході розробки інформаційних систем та систем моделювання. Предметом вивчення навчальної дисципліни є чисельні методи розв'язання типових математичних задач.

Мета даного навчального посібника – ознайомлення студентів із постановками основних математичних задач і чисельних методів їх розв'язання, набуття студентами навичок реалізації на комп'ютері чисельних методів, навичок роботи з відомими комп'ютерними математичними пакетами.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми підготовки бакалаврів напряму 6.050101 "Комп'ютерні науки" студенти після вивчення навчальної дисципліни "Чисельні методи" повинні оволодіти такими компетентностями:

знати:

загальні поняття, пов'язані з чисельними методами;

постановки типових математичних задач;

чисельні методи лінійної та нелінійної алгебри;

чисельні методи наближення функцій;

методи чисельного диференціювання та інтегрування функцій;

чисельні методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь;

чисельні методи розв'язання інтегральних рівнянь;

чисельні методи розв'язання задач математичної фізики;

теоретичні особливості чисельних методів та можливості їх адаптації до інженерних задач;

вміти:

проектувати, програмувати, тестувати й налагоджувати програми, що реалізують чисельні методи;

розв'язувати математичні задачі з використанням математичних пакетів;

здійснювати обґрунтований вибір чисельного методу при вирішенні практичної задачі.

Одним із способів розв'язання практичної задачі є експеримент. Наприклад, будують ракету, запускають і перевіряють характеристики, які цікавлять. Якщо вони не задовольняють, то будують нову ракету і т. д. Зрозуміло, що потрібний результат (при необмежених ресурсах) буде, врешті-решт, досягнутий, проте занадто дорогою ціною.

Інший спосіб – побудова математичної (комп'ютерної) моделі об'єкта або явища, що вивчається, і проведення всіх розрахунків на комп'ютері. Для фізичних процесів математична модель зазвичай записується у вигляді набору рівнянь, в які як коефіцієнти входять характеристики тіл або речовин, що беруть участь у процесі. Наприклад, швидкість ракети $v = v(t)$ (у момент часу t після старту) при вертикальному польоті у вакуумі визначається рівнянням [10]:

$$\left(M - \int_0^t m(\tau) d\tau \right) \left(\frac{dv}{dt} + g \right) = c \times m(t), \tag{1}$$

де M – початкова маса ракети;

$m(t)$ – задана витрата пального;

g – прискорення поля тяжіння;

c – швидкість закінчення витікання газів, що залежить від калорійності пального і середньої молекулярної ваги продуктів горіння.

Для того щоб зрозуміти місце чисельних методів у процесі розв'язання задач, виникаючих у практичній діяльності людини, з використанням комп'ютера, слід навести основні етапи цього процесу.

Етапи розв'язання практичних задач на комп'ютері.

1. Постановка задачі:
   - словесне формулювання задачі;
   - визначення кінцевої мети розв'язку.
2. Побудова математичної моделі, тобто математичне формулювання задачі.
3. Вибір чисельного методу для розв'язання математичної задачі.
4. Розроблення алгоритму.
5. Програмна реалізація алгоритму.
6. Тестування програми (налагодження на тестових задачах).
7. Проведення розрахунків на реальних даних.
8. Аналіз результатів.

Найскладнішим із перерахованих етапів є другий етап, а вивчення методів його реалізації є предметом інших навчальних дисциплін (наприклад, моделювання систем й ін.). У подальшому викладенні матеріалу даного навчального посібника передбачено, що математичне формулювання задачі вже є, потрібно тільки навчитися її розв'язувати на комп'ютері з використанням чисельних методів.

Варто зазначити, що якщо математична модель вибрана недостатньо коректно, то які б методи не застосовувалися для розрахунків з її використанням, отримані висновки будуть ненадійні, або й зовсім неправильні. Так, рівняння (1) непридатне для розрахунків запуску ракети з поверхні Землі, бо в ньому не враховується опір повітря.

Розв'язок, отриманий за допомогою чисельного методу, зазвичай є наближеним, тобто містить деяку погрішність. Джерелами погрішності (у порядку значимості) є:

- невідповідність математичної постановки задачі досліджуваному реальному явищу;
- погрішність відправних даних;
- погрішність чисельного методу розв'язання;
- помилки округлення та розрахунків.

У навчальному посібнику висвітлюються питання, пов'язані з розкриттям основних понять предметної області: математичної постановки задачі, чисельного методу, ітерації, характеристик чисельних методів, абсолютної та відносної похибок розв'язку, джерел погрішності та інших; розглянуті постановки основних математичних задач та найбільш відомі чисельні методи їх розв'язання; наведені приклади програмної реалізації чисельних методів.

У ході розв'язання конкретної практичної задачі спеціаліст повинен, перш за все, визначити, до якого типу математичної задачі належить ця практична задача, вибрати чисельний метод для її розв'язання, розробити програмну реалізацію методу самостійно чи вміти застосувати для її розв'язання один із відомих комп'ютерних математичних пакетів.

1. Вступ до чисельних методів. Загальні поняття

1.1. Сутність чисельних методів. Загальні поняття

Для розв'язання математичних задач в основному існує три групи методів:

1. **Аналітичні методи**, в яких розв'язок задачі подається у вигляді аналітичних виразів. Їх **перевагами** є: запис розв'язку у загальному вигляді; висока точність і малий об'єм комп'ютерної пам'яті для зберігання розв'язку. Основний **недолік** – неуніверсальність, бо тільки невелика частина математичних задач може бути розв'язана аналітично.

2. **Графічні методи**, в яких розв'язок задачі знаходиться візуально. Їх **перевагою** є наочність. **Недоліками** графічних методів є: велика трудомісткість; низька точність (залежить від точності побудови графіків); неуніверсальність (графіки можна побудувати тільки для невеликої розмірності та ін.).

3. **Чисельні методи**, що дозволяють звести розв'язування задачі до виконання скінченного числа арифметичних і логічних дій з числами. При цьому розв'язок визначається як набір чисел, які надалі можуть бути інтерпретовані різним способом (наприклад, подані у вигляді таблиць, графіків, анімації тощо). Їх **перевагами** є: абсолютна універсальність, бо теоретично можуть бути застосовані для розв'язання будь-яких задач; добре пристосовані для реалізації на комп'ютері. **Недоліком** є велика трудомісткість у ході ручного рахунку, що, зазвичай, не є проблемою, оскільки вони призначені для використання на комп'ютері.

Таким чином, чисельні методи є основним апаратом розв'язання математичних задач, а їх значущість тільки збільшуватиметься у міру вдосконалення комп'ютерної техніки.

Чисельні методи бувають двох типів: **прямі** та **ітераційні**. В прямих методах розв'язок задачі досягається за скінченну кількість **кроків** методу після виконання останнього кроку, в ітераційних методах виконується ряд **ітерацій** методу до отримання наближеного розв'язку із заданою точністю.

Поняття ітераційного методу.

В основному чисельні методи є **ітераційними**. **Ітерація** – це повторення сукупності операцій або процедур для покращення наявного (поточного) наближеного розв'язку задачі. Нехай x^* – розв'язок задачі, тоді ітераційний метод будує так звану **ітераційну послідовність** $\{x^{(k)}\}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ наближень розв'язку, при цьому $x^{(k)}$ повинно наближатися до x^* зі збільшенням k.

Алгоритм ітераційного методу в найзагальнішому вигляді має таку схему:

1. Задається **початкове наближення** розв'язку $x^{(0)}$ (на основі апріорних знань про задачу).

2. На k-й ітерації методу $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ буде поточне наближення розв'язку $x^{(k)}$. Далі обчислюється наступне наближення $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$, де Φ і є сукупністю операцій або процедур для покращення наближеного розв'язку задачі, яка є суттю конкретного чисельного методу.

3. Перевіряється **критерій останову**, тобто перевіряється: чи є отримане наближення $x^{(k+1)}$ розв'язку x^* достатньо близьким. Якщо цього немає, то відбувається перехід до наступної ітерації, тобто до пункту 2.

Варто зазначити, що вид критерію останову (тобто припинення обчислень за ітераційним методом) залежить від виду розв'язуваної математичної задачі.

1.2. Характеристики чисельних методів

Для оцінки чисельних методів, тобто порівняння між собою методів для розв'язання однієї задачі, вводять такі їх основні характеристики:

трудомісткість;

порядок методу;

збіжність;

швидкість збіжності;

стійкість до погрішностей обчислень;

стійкість до погрішностей у відправних даних.

Під **трудомісткістю** методу розуміють кількість і якість обчислень, необхідних для досягнення достатньо близького наближення розв'язку задачі.

Під **порядком** методу розуміють вимоги до знань про функції, що входять у математичне формулювання задачі (наприклад, використання в методі похідних цих функцій):

- метод **нульового порядку**, якщо він використовує тільки значення цих функцій;
- метод **першого порядку**, якщо він використовує значення функцій і їх перших похідних;
- метод **другого порядку**, якщо він використовує значення і функцій та їх перших і других похідних і т. д.

Чисельний метод називається **таким, що збігається**, якщо наближення x^k прямує до розв'язку x^* зі збільшенням k. Очевидно, що методи, які не збігаються, не цікаві з прикладної точки зору. Тому одним з найважливіших етапів при введенні нового чисельного методу є теоретичне доведення його збіжності, тобто формулювання умов, за яких метод гарантовано збігається.

В основному розрізняють такі **швидкості збіжності** методів.

1. **Лінійна збіжність**. Указують, що послідовність $\left\{x^{(k)}\right\}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ лінійно збігається до розв'язку x^* (або зішвидкістю геометричної прогресії), якщо існують числа $q \in (0, 1)$ і $k_0 > 0$ такі, що

$$\left\| x^{(k+1)} - x^* \right\| \le q \left\| x^{(k)} - x^* \right\| \text{ для всіх } k \ge k_0.$$

Тут норма $\|x - y\|$ означає відстань між x і y.

2. **Надлінійна збіжність**. Указують, що послідовність $\left\{x^{(k)}\right\}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ надлінійно збігається до розв'язку x^*, якщо існує послідовність $\{q_k\}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$, $q_k \in (0, 1)$ для всіх k, така, що

$$\left\| x^{(k+1)} - x^* \right\| \le q_k \left\| x^{(k)} - x^* \right\| \text{ і } q_k \to 0 \text{ при } k \to \infty.$$

3. **Квадратична збіжність**. Указують, що послідовність $\left\{x^{(k)}\right\}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ квадратично збігається до розв'язку x^*, якщо існують числа $C > 0$ і $k_0 > 0$ такі, що

$$\left\| x^{(k+1)} - x^* \right\| \le C \left\| x^{(k)} - x^* \right\|^2 \text{ для всіх } k \ge k_0.$$

Під **стійкістю до погрішностей обчислень** розуміють те, що застосування чисельного методу приводить до розв'язку задачі на комп'ютері, незважаючи на помилки округлень і обчислень. Для цього в чисельних методах, якщо потрібно, передбачаються додаткові операції, що не змінюють суть методу, але забезпечують його стійкість до помилок обчислень.

Під **стійкістю до погрішностей у відправних даних** розуміють те, що при невеликих погрішностях у відправних даних застосування чисельного методу дозволяє отримати наближений розв'язок задачі з не дуже великою погрішністю. Стійкість до погрішностей у відправних даних досягається, як правило, шляхом модифікації чисельного методу, тобто внесенням змін до суті методу.

1.3. Похибка розв'язку

Для оцінювання точності чисельного методу слід ввести поняття абсолютної і відносної погрішності розв'язку.

Якщо x^* – точний розв'язок задачі, а $\tilde{x}$ – наближений розв'язок, то **абсолютною погрішністю** наближення $\tilde{x}$ називається деяка величина $\Delta(\tilde{x})$, про яку відомо, що

$$\left\| \tilde{x} - x^* \right\| \le \Delta(\tilde{x}).$$

Тут норма $\left\| \tilde{x} - x^* \right\|$ означає відстань між $\tilde{x}$ і x^*. Таким чином, якщо відомі наближений розв'язок задачі $\tilde{x}$ та абсолютна погрішність $\Delta(\tilde{x})$, то невідомий точний розв'язок задачі x^* знаходиться від $\tilde{x}$ на відстані не більше, ніж $\Delta(\tilde{x})$.

Також варто зазначити, що абсолютна погрішность розв'язку – це не різниця між точним і наближеним розв'язком задачі, а оцінка цієї різниці.

Відносною погрішністю наближення $\tilde{x}$ називають деяку величину $\delta(\tilde{x})$, про яку відомо, що

$$\frac{\left\|\tilde{x} - x^*\right\|}{\left\|\tilde{x}\right\|} \le \delta(\tilde{x}).$$

Варто звернути увагу на те, що наближений розв'язок задачі $\tilde{x}$, отриманий за допомогою чисельного методу, зазвичай залежить від вибраних параметрів цього методу. Без обмеження загальності, можна вважати, що параметр у методу один (умовно можна позначити його через h) і при цьому він задовольняє умову $0 < h < 1$. Тоді абсолютна погрішність $\Delta(\tilde{x})$ також залежить від h, тобто $\Delta(\tilde{x}) = \Delta(h)$.

Якщо існують деякі числа $M > 0$ і $k > 0$ (не обов'язково цілі) такі, що виконується нерівність $\Delta(h) \le M\, h^k$, то говорять, що абсолютна погрішність $\Delta(h)$ має порядок $O(h^k)$. Цим хочуть підкреслити **якісну** (на відміну від кількісної) залежність погрішності наближеного розв'язку задачі $\tilde{x}$ від параметра чисельного методу h. Наприклад, це показує, що зменшення значення параметра h на один порядок призводить до зменшення величини абсолютної погрішності $\Delta(\tilde{x})$ на k порядків.

1.4. Похибка округлення у ході розрахунків на комп'ютері з плаваючою крапкою

Одним із основних джерел обчислювальних погрішностей є наближене подання дійсних чисел у комп'ютері, обумовлене скінченністю розрядної сітки. При розв'язанні обчислювальних задач зазвичай використовують подання чисел у **формі з плаваючою крапкою** *(комою)*. Число a у формі з плаваючою крапкою подається у вигляді:

$$a = sign(a)\, M\, r^p,$$

де r – основа системи числення;

p – порядок числа a;

M – мантиса числа a;

$sign(a)$ – знак числа a.

При цьому повинна виконуватися умова нормування $r^{-1} \le M \le 1$, тобто перша цифра в мантисі повинна бути відмінною від нуля.

Усі персональні комп'ютери і більшість робочих станцій підтримують **IEEE-стандарт двійкової арифметики** (тобто $r = 2$). Стандарт передбачає два типи чисел із плаваючою крапкою: *числа звичайної точності* (подаються 4 байтами – 32 бітами)

1	8	23
Знак	Порядок	Мантиса

і *числа подвійної точності* (подаються 8 байтами – 64 бітами)

1	11	52
Знак	Порядок	Мантиса

Через скінченність розрядної сітки (кількість знаків у мантисі) в комп'ютері можна подати не всі числа. Число a, яке не можна подати в комп'ютері, піддається округленню, тобто замінюється близьким числом $\tilde{a}$, яке подається в комп'ютері точно.

Слід знайти оцінку *відносної погрішності подання числа з плаваючою крапкою* [3]. Припускається, що застосовується просте округлення – відкидання всіх розрядів числа, що виходять за межі розрядної сітки. Нехай потрібно записати число, що є нескінченним двійковим дробом (система числення – двійкова):

$$a = \pm \underbrace{2^p}_{порядок} \underbrace{\left(\frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{2^2} + \cdots + \frac{a_t}{2^t} + \frac{a_{t+1}}{2^{t+1}} + \cdots \right)}_{мантиса}, \qquad (1.1)$$

де $a_j = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}, (j = 1, 2, \ldots)$ – цифри мантиси;

t – розрядність мантиси (23 або 52 залежно від типу числа).

Тоді, після відкидання зайвих розрядів, буде отримане округлене число

$$\tilde{a} = \pm 2^{p}\left(\frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{2^2} + \cdots + \frac{a_t}{2^t}\right).$$

Погрішність округлення в цьому випадку дорівнює

$$\tilde{a} - a = \pm 2^{p}\left(\frac{a_{t+1}}{2^{t+1}} + \frac{a_{t+2}}{2^{t+2}} + \cdots\right).$$

Найбільша погрішність буде у випадку, коли $a_{t+1}=1$, $a_{t+2}=1$, …. Тоді **абсолютна погрішність округлення**

$$|\tilde{a} - a| \le 2^{p}\,\frac{1}{2^{t+1}}\underbrace{\left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2^2} + \cdots\right)}_{=2} = 2^{p-t}.$$

З умови нормування виходить, що $M \ge \frac{1}{2}$, а значить завжди $a_1 = 1$. Тоді з (1.1) отримуємо, що $|a| \ge 2^{p} \times 2^{-1} = 2^{p-1}$ і тому $\frac{|\tilde{a} - a|}{|a|} \le 2^{-t+1}$, тобто відносна погрішність дорівнює 2^{-t+1}.

У реальності застосовують точніші методи округлення (ніж просте відкидання розрядів), тому **відносна погрішність** подання чисел в пам'яті комп'ютера дорівнює:

$$\frac{|\tilde{a} - a|}{|a|} \le 2^{-t}, \tag{1.2}$$

тобто точність подання чисел визначається розрядністю мантиси t.

Слід зазначити, що з (1.2) витікає, що наближено подане в комп'ютері число $\tilde{a}$ можна записати в вигляді $\tilde{a} = a(1 \pm \varepsilon)$, де $|\varepsilon| \le 2^{-t}$. Тому відносну погрішність подання чисел 2^{-t} ще називають "машинним епсілоном".

Більш детально похибки у ході розрахунків на комп'ютері з плаваючою крапкою розглянуті в роботах [1; 3; 18].

1.5. Математичні пакети

За останні 50 – 60 років, пов'язаних із використанням комп'ютерної техніки, в усьому світі накопичено велику кількість програмного забезпечення у вигляді бібліотек комп'ютерних підпрограм (написаних, у першу чергу, мовами Fortran та C), призначених для розв'язання типових математичних задач. Крім того, розроблено ряд універсальних математичних пакетів, за допомогою яких можна достатньо швидко як розв'язати багато відомих математичних задач, так і провести попередні розрахунки з подальшою реалізацією вже в проектованій комп'ютерній системі.

Найбільш відомими є такі математичні пакети: R, Mathematica, Maple, MatLab, MathCad [3; 21].

Пакет **Mathematica** найпопулярніший у наукових колах, особливо у теоретиків. Він надає широкі можливості під час проведення символічних (аналітичних) перетворень, дозволяє швидко й ефективно розв'язувати багато задач обчислювальної математики. В пакеті Mathematica більшість задач розв'язується в діалоговому режимі, без традиційного програмування з використовуванням стандартних операторів. Крім того, в цьому пакеті реалізована мова програмування високого рівня, яка дозволяє створювати достатньо складні програми. Також цей пакет дозволяє конвертувати документи у формат LaTex, який є стандартним форматом переважної більшості наукових видавництв світу.

Пакет **Maple** – найдавніший серед пакетів символьної математики – також дуже популярний у наукових колах. Окрім здійснення аналітичних перетворень, з його допомогою можна розв'язувати різноманітні математичні задачі чисельно. Графічний редактор пакета дозволяє одержувати зображення тривимірних фігур із перерізами та конвертувати документи у формат LaTex.

Пакет **MatLab**, як і згадані пакети, є своєрідною мовою програмування високого рівня, що орієнтована переважно на інженерні розрахунки теорії управління, електро- і радіотехніки, а також моделювання технічних систем. Пакет MatLab став фактично міжнародним стандартом сучасного навчального програмного забезпечення і використовується в багатьох провідних університетах світу [21].

Пакет **MathCad** відрізняється від інших такою особливістю, як використання звичайних математичних позначень. Документ пакета MathCad на екрані монітору виглядає як звичайний математичний розрахунок. Крім того, MathCad є середовищем візуального програмування, тобто не вимагає знання спеціального набору команд. Хоча пакет орієнтований, у першу чергу, на проведення чисельних розрахунків, він має вбудований символьний процесор Maple, що дозволяє виконувати аналітичні перетворювання. Також у пакеті MathCad передбачена можливість створювати зв'язки його документів із документами пакета MatLab.

Система **R** відрізняється від наведених пакетів в основному тим, що є вільним програмним продуктом, який розповсюджується на умові ліцензії GNU. Вона включає в себе об'єктно-орієнтовану мову програмування R і середовище в сукупності з великим набором бібліотек (більш ніж 1 600), які доступні для усіх основних платформ – Linux, Windows і MacOS. Постійно виходять нові версії та розширення, які доступні на офіційному сайті http://cran.r-project.org [33], розробники пишуть для системи R пакети, адаптовані до конкретних галузей. Важливим показником популярності цього програмного продукту є і те, що постійно публікуються нові книги з описом застосування R для різних видів аналізу даних [25; 26]. Мова R вбудовується в усілякі системи. Наприклад, корпорація Oracle інтегрувала мову програмування R у СУБД Oracle Database 11g.

З цих причин саме пакет R використовується у цьому навчальному посібнику для програмування, виконання розрахунків та наочного подання результатів розв'язання. Математичний пакет R все частіше застосовується у ході проведення лабораторних занять із різних навчальних дисциплін, тому тим, хто бажає більш досконально опанувати цей пакет, пропонується звернутися до додаткових джерел [28 – 31].

Треба зазначити, що останнім часом позначилася тенденція до зближення та інтеграції різних математичних пакетів. Так, останні версії пакетів Mathematica і Maple мають потужні засоби для візуального програмування; в пакети MatLab та MathCad включена бібліотека аналітичних перетворень Maple; MathCad дозволяє працювати разом із MatLab і т. д. Тому, за великим рахунком, не має значення, який математичний пакет застосовується у навчальному процесі та засвоюється студентами. Головне – принципово навчитися використовувати будь-який математичний пакет для розв'язання практичних задач.

1.6. Висновки

1. Чисельні методи є одним із основних апаратів розв'язання математичних задач.
2. Універсальних чисельних методів розв'язання математичної задачі, як правило, не існує. Тому треба розглядати кілька методів.
3. Вибір чисельного методу для розв'язання математичної задачі треба здійснювати з урахуванням його характеристик.
4. Є ряд математичних пакетів, за допомогою яких можна достатньо швидко розв'язати багато відомих математичних задач.

1.7. Контрольні запитання та завдання

1. Назвіть основні групи методів розв'язання математичних задач та їх характеристики.
2. Назвіть основні характеристики чисельних методів. Розкрийте їх суть.
3. Які є основні швидкості збіжності ітераційних методів?
4. Назвіть та охарактеризуйте основні етапи розв'язання практичних задач на комп'ютері.
5. Що називають "ітерацією"? Наведіть загальну схему ітераційного методу.
6. Які методи розв'язання математичних задач називають ітераційними?
7. Які методи розв'язання математичних задач називають чисельними?
8. Дайте визначення поняттям абсолютної та відносної погрішностей.
9. Дайте визначення лінійної і квадратичної швидкості збіжності ітераційного методу.
10. Що є причинами появи погрішності при арифметичних обчисленнях на комп'ютері?

11. Як подані числа в комп'ютері? Вкажіть розмір абсолютної та відносної погрішностей округлення чисел у комп'ютері.

12. Які універсальні математичні пакети ви знаєте? Дайте їх порівняльну характеристику. Для чого вони використовуються?

2. Прямі та ітераційні методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь

2.1. Постановка задачі

Розглядається система алгебраїчних рівнянь виду:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases}, \tag{2.1}$$

де $a_{ij} \in R^1$, $i = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,n}$;

$b_i \in R^1$, $i = \overline{1,n}$ – задані;

$x_j \in R^1$, $j = \overline{1,n}$ – невідомі.

Якщо ввести позначення:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{pmatrix}, \; x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix},$$

де A – матриця розмірності $n \times n$;

b – вектор-стовпець розмірності n $(b \in R^n)$;

x – вектор-стовпець розмірності n $(x \in R^n)$,

то систему (2.1) можна записати в матричному вигляді:

$$A\,x = b. \tag{2.2}$$

Розв'язати систему (2.2) – це означає знайти таке $x^* \in R^n$ ($x^* = \left(x_i^*\right)_{i=1}^n$), при якому значення лівої частини рівняння тотожно дорівнює правій.

Визначення. Нев'язкою системи (2.2), що відповідає довільному вектору x, називається вектор $r = A\,x - b$. Очевидно, що для розв'язку $x^* \in R^n$ нев'язка ($A\,x - b$) дорівнює нулю.

Для того щоб система (2.2) мала єдиний розв'язок, необхідно й достатньо, щоб $det\,A \neq 0$ [10]. У цьому випадку розв'язок системи (2.2) може бути отриманий за формулами Крамера:

$$x_i = \frac{det(A^{(i)})}{det(A)},\ i = \overline{1,n},$$

де матриця $A^{(i)}$ утворюється з матриці A заміною її i-го стовпця стовпцем вільних членів b.

Але такий спосіб розв'язання системи лінійних рівнянь з n невідомими призводить до обчислення $(n+1)$-го визначника порядку n, що є дуже трудомісткою операцією при великих n.

Чисельні методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (2.2) можна розбити на дві групи: прямі (точні) й ітераційні (наближені).

Визначення. Точними (прямими) **методами** називаються методи, які в припущенні, що обчислення ведуться точно (без округлень), приводять за скінчене число кроків до точних значень x_i^*. Оскільки обчислення на комп'ютері ведуться з округленнями, то розв'язок неминуче міститиме погрішності. До прямих методів відносяться, наприклад, метод Гауса, метод Холецького та ін. [3; 5; 6; 21].

Визначення. Наближеними (ітераційними) **методами** називаються такі методи, які навіть у припущенні, що обчислення ведуться без округлень, дозволяють отримати розв'язок x^* тільки із зазначеною точністю. Точний розв'язок системи в цьому випадку може бути отриманий теоретично як результат нескінченного (ітераційного) процесу. До наближених методів відносяться, наприклад, метод ітерацій, метод Зейделя та ін. [3; 5; 6; 21]. Кожний із цих методів не завжди є збіжним у застосуванні до конкретного класу систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

2.2. Метод виключення Гауса

Найбільш відомим із прямих методів розв'язання системи (2.2) є **метод виключення Гауса**, ідея якого полягає в послідовному виключенні невідомих із рівнянь. Спочатку відправна система (2.2) приводиться до системи трикутного вигляду (прямій хід), а потім невідомі визначаються за простими формулами (зворотний хід).

Розрахункові формули методу Гауса:

Нехай $a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$, $i = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,n}$; $b_i^{(0)} = b_i$, $i = \overline{1,n}$.

Прямий хід: k-й крок

при $k = \overline{1,n-1}$:

$$a_{kj}^{(k)} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},\ j = \overline{k+1,n};\ b_k^{(k)} = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}};$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}\, a_{kj}^{(k)},\ j = \overline{k+1,n},$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}\, b_k^{(k)},\ i = \overline{k+1,n};$$

при $k = n$:

$$b_k^{(k)} = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}.$$

Зворотний хід:

$$x_n = b_n^{(n)};$$

$$x_k = b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)}\, x_j,\ k = \overline{n-1,1}. \qquad (2.3)$$

Тут $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})$ – це проміжна матриця, а $b^{(k)} = (b_i^{(k)})$ – проміжний вектор на k-му кроці прямого ходу методу Гауса, причому

$A^{(0)} = A$, $b^{(0)} = b$. Елементи $a_{kk}^{(k)} = 1$ для усіх k формально, але виконувати це обчислювальня фактично не потрібно. Також не потрібно обчислювати і піддіагональні (нульові) елементи матриці.

Рядки, що містять одиницю на діагоналі, називаються **виділеними рядками**. Процес отримання виділених рядків (приведення системи до трикутного вигляду) називається **прямим ходом**, а процес знаходження невідомих шляхом використання виділених рядків – **зворотним ходом** методу Гауса.

Приклад 2.1. Розв'язати систему рівнянь методом Гауса.

$$\begin{cases} 5x_1 + x_2 + 2x_3 = 10, \\ 6x_1 + 18x_2 + 6x_3 = 54, \\ 10x_1 + 20x_2 + 40x_3 = 160. \end{cases}$$

Розв'язання в математичному пакеті R

Процедуру розв'язання системи лінійних рівнянь методом Гауса можна записати так:

```
MGaussSLE = function(A,b,n)
{
     for(k in 1:(n-1))
     {
          for(j in (k+1):n)
               A[k,j] = A[k,j]/A[k,k]
          b[k] = b[k]/A[k,k]
          for(i in (k+1):n)
          {
               for(j in (k+1):n)
                    A[i,j] = A[i,j] - A[i,k]*A[k,j]
               b[i] = b[i] - A[i,k]*b[k]
          }
     }
     b[n] = b[n]/A[n,n]
     for(k in (n-1):1)
     {
          for(j in (k+1):n)
               b[k] = b[k] - A[k,j]*b[j]
     }
      return(b)
}
```

Відправними даними задачі (2.1) є матриця A коефіцієнтів при невідомих, вектор-стовпець b вільних членів і кількість невідомих n:

```
> A = cbind(c(5,6,10), c(1,18,20), c(2,6,40))
> b = c(10,54,160)
> n = 3
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    5    1    2
[2,]    6   18    6
[3,]   10   20   40
> b
[1]  10  54 160
> n
[1] 3
```

Результат розв'язання заданої системи лінійних рівнянь з використанням записаної процедури:

```
> x = MGaussSLE(A,b,n)
> x
[1] 0.4444444 1.8666667 2.9555556
```

Таким чином, розв'язком заданої системи лінійних рівнянь є знайдені значення невідомих: $x_1 = 0.444$, $x_2 = 1.867$, $x_3 = 2.956$. Для перевірки отриманих результатів знайдені значення невідомих були підставлені у систему:

```
> y = A%*%x
> y
     [,1]
[1,]   10
[2,]   54
[3,]  160
```

Кількість арифметичних операцій, необхідних для реалізації метода Гауса, визначається формулою [6]:

$$K(n) = \frac{2n(n+1)(n+2)}{2} + n(n-1),$$

де n – розмірність системи (2.2), тобто пропорційна кубу числа невідомих ($O(n^3)$).

Слід зазначити, що з логічної точки зору кращою є модифікація методу Гауса, що зветься **метод Гауса – Жордана**. Його суть полягає в тому, що зворотний хід виконується не за формулами (2.3), а проводиться виключення невідомих у зворотному порядку з рівнянь, отриманих після виконання прямого ходу методу Гауса. При цьому система приводиться до діагонального вигляду з одиницями на діагоналі, а розв'язок системи виявляється на місці вектора b. Таким чином, зворотний хід дійсно є зворотним, тобто виконуються операції симетричні відносно прямого ходу.

2.3. Метод Гауса з вибором головного елемента

Стандартний метод Гауса може стати чисельно нестійким, якщо серед $a_{kk}^{(k-1)}$, на які проводиться ділення, виявляються дуже малі числа по абсолютній величині, хоча і відмінні від нуля (не говорячи вже про нульові значення). Тоді при діленні на них отримуються великі числа з великими абсолютними погрішностями. В результаті цього отриманий розв'язок сильно відрізнятиметься від дійсного розв'язку, тобто метод Гауса буде нестійким до помилок обчислень.

Щоб цього уникнути, на практиці застосовують **метод виключення Гауса з вибором головного елемента.** Діагональний елемент $a_{kk}^{(k-1)}$, на який проводиться ділення на k-му кроці, називається **головним** (ведучим) елементом. Якщо головний елемент близький до нуля по абсолютній величині, то можна знайти у відповідному (k-му) стовпці максимальний за модулем елемент і переставити рядки місцями так, щоб цей елемент став головним. Але така перестановка теж не завжди забезпечує стійкість. Тому при програмній реалізації зазвичай вибирають максимальний за модулем елемент не в k-му стовпці, а в усій матриці, що залишилася. Потрібно зазначити, що якщо доводиться переставляти місцями стовпці матриці, то ці перестановки потрібно запам'ятовувати, а потім (після отримання розв'язку) проводити їх у зворотному порядку вже у векторі отриманого розв'язку.

Сенс вибору головного елемента полягає в тому, щоб зробити якомога меншими по абсолютній величині числа $a_{kj}^{(k)} = \dfrac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ і, тим