

Міністерство освіти і науки України
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ "ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"
Інститут хімічних технологій та фармацевтики

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ
з дисципліни
«МЕТОДИ ОБРОБКИ ІНФОРМАЦІЇ В ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ»
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

Затверджено на засіданні кафедри ХТ
протокол №6 від 23.06.2022 р.

Одеса: “Одеська політехніка”, 2022

Конспект лекцій з дисципліни «Методи обробки інформації в хімічних технологіях» для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / Уклад. В.В. Брем, О.В. Макаров, О.А. Борщ; Національний університет «Одеська політехніка». – Одеса, 2022. – 45 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

В.В. Брем, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. Конспект лекцій з дисципліни «Методи обробки інформації в хімічних технологіях». В конспекті лекцій наведено теоретичні відомості про основні методи обробки експериментальних даних, а також методи чисельного інтегрування звичайних диференційних рівнянь. Теорію доповнено прикладами блок-схем і програмних модулів. Конспект лекцій призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

ЗМ 1. ОБРОБКА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ.....	4
Лекція 1. Постановка задачі про наближення функції. Критерії адекватності. Емпіричні формули. Вибір виду емпіричної формули. Метод вирівнювання.....	4
Лекція 2. Визначення параметрів емпіричної формули. Методи вибраних точок і середніх. Лінійна апроксимація за методом найменших квадратів	10
Лекція 3. Інтерполяція функцій. Постановка задачі. Параболічна інтерполяція. Інтерполяційна формула Лагранжа. Обернене інтерполювання.....	16
ЗМ 2. ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ	20
Лекція 4. Постановка задачі. Метод Ейлера. Інтегрування диференціальних рівнянь рядом Тейлора.	20
Лекція 5. Модифікований метод Ейлера. Удосконалений метод Ейлера-Коши.....	27
Лекція 6. Метод Рунге-Кути. Удосконалений метод Ейлера-Коши з наступною ітераційною обробкою (метод прогнозу та корекції)	32
Лекція 7. Наближене розв'язання лінійної крайової задачі. Постановка задачі. Метод скінченних різниць. Метод прогонки	39
Список рекомендованої літератури	45

ЗМ 1. ОБРОБКА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ. НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ

Експериментальні дані, отримані в лабораторних або промислових умовах, є основою для проведення подальших досліджень. Ці дані зазвичай використовуються для визначення констант відомих аналітичних залежностей, або для встановлення виду аналітичних залежностей. У першому випадку експериментальні значення підставляються у відповідні рівняння (наприклад, коефіцієнти обміну, дифузії, в'язкості і т.д.). У другому – сукупність експериментальних даних використовується для знаходження функціональної залежності, якій вони підпорядковані (наприклад, залежності швидкості хімічної реакції від складу і т.д.).

Тобто коли теорія процесу відсутня, дослідник змушений сам створювати математичну модель, тобто визначити її вид і обчислити коефіцієнти до неї.

ЛЕКЦІЯ 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ПРО НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ. КРИТЕРІЙ АДЕКВАТНОСТІ. ЕМПІРИЧНІ ФОРМУЛИ. ВИБІР ВИДУ ЕМПІРИЧНОЇ ФОРМУЛИ. МЕТОД ВИРІВНЮВАННЯ

1.1 Постановка задачі про наближення функції

Задача про наближення функції ставиться таким чином: дану функцію $f(x)$ (наприклад, табличну) потрібно замінити многочленом порядку m

$$P_m(x) = a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \dots + a_m \varphi_m(x) \quad (1.1)$$

(a_0, a_1, \dots, a_m – постійні коефіцієнти; $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ – задана на деякій множині X система функцій досить гладких, наприклад, безперервно диференційованих) так, щоб відхилення (в даному разі) $f(x)$ від $P_m(x)$ на зазначеній множині X було найменшим. При цьому многочлен $P_m(x)$ в загальному випадку називають *апроксимуючим*.

Якщо множина X складається з окремих точок x_1, x_2, \dots, x_m , то наближення називається *точковим*, якщо ж X – відрізок ($a \leq x \leq b$), то наближення називається *інтегральним*.

Для практики дуже важливий випадок, коли система функцій $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ являє собою послідовність цілих невід'ємних степенів змінної x , тобто

$$\varphi_0(x) = 1; \varphi_1(x) = x, \varphi_2(x) = x^2, \dots, \varphi_m(x) = x^m$$

і, отже, $P_m(x)$ є звичайним многочленом ступеня m :

$$P_m(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \dots + a_m x^m \quad (1.2)$$

Залежно від того, що розуміють під відхиленням двох функцій, отримують різні типи задач теорії наближень: інтерполяція, середньоквадратичне наближення, рівномірне наближення та ін.

1.2 Емпіричні формули. Критерії адекватності

Нехай дослідним шляхом отримані значення деякої величини y для заданих значень величини x та подані у вигляді таблиці ($y=f(x)$).

На підставі цих даних зазвичай розв'язують такі задачі:

- 1) формула, що виражає функціональну залежність y від x , відома; потрібно визначити числові значення параметрів, що входять у цю формулу;
- 2) характер функціональної залежності між величинами y та x невідомий; потрібно знайти аналітичний вираз $y=F(x)$ залежності між x та y , який називають *емпіричною формулою*.

Побудову емпіричної формули поділяють на два основні етапи: знаходження загального вигляду цієї формули і визначення найкращих її параметрів.

Геометрично задача побудови емпіричної формули $y=F(x)$ полягає в проведенні такої кривої (чи прямої) (рис. 1.1), що була б досить близько розташована до дослідних точок (x_i, y_i) $i = 1, 2, \dots, n$. Що означає «досить близько розташована», у кожному конкретному випадку варто вказувати (наприклад, відповідно до методу найменших квадратів, квадратичне відхилення повинно бути мінімальним).

Якщо вигляд залежності $y=F(x)$ невідомий, то виходячи з певних міркувань (фізичного сенсу, простоти емпіричної формули та ін.) визначають вузький клас функцій, до якого вона повинна належати. Після того, як визначено обраний клас функцій, необхідно з нього вибрати одну певну функцію, скориставшись відповідними методами і деякими *критеріями оцінки ступеня наближення*.

Як оцінки близькості (*критерії адекватності*) експериментальних і розрахункових значень можуть використовуватися різні критерії, засновані на їх порівнянні для всіх вимірюваних точок. Розглянемо деякі з них.

- 1) Критерій *близькості в середньому*. Мінімізація величини $R(a_1, a_1, \dots, a_s)$ забезпечується відповідним вибором параметрів a_1, a_1, \dots, a_s , і дозволяє отримувати розрахункову залежність, для якої середнє відхилення по всім експериментальним точкам буде мінімальним.

$$R(a_1, a_2, \dots, a_s) = \min \left\{ \sum_{i=1}^n [f(x_i) - F(x_i, a_1, a_2, \dots, a_s)] \right\} \quad (1.3)$$

- 2) Критерій *середньоквадратичного* відхилення. Мінімізація величини $R(a_1, a_1, \dots, a_s)$ забезпечується відповідним вибором параметрів a_1, a_1, \dots, a_s , і дозволяє отримувати розрахункову залежність, для якої *середньоквадратичне* відхилення по всім експериментальним точкам буде мінімальним.

$$R(a_1, a_2, \dots, a_s) = \min \left\{ \sum_{i=1}^n [f(x_i) - F(x_i, a_1, a_2, \dots, a_s)]^2 \right\} \quad (1.4)$$

Критерій (1.4) найбільш часто використовується в задачах обробки експериментальних даних.

Використання критеріїв (1.3) і (1.4) для оцінки адекватності розрахункової і експериментальної залежності дають хороші результати в тому випадку, якщо вимірювані значення шуканої залежності змінюються у відносно невеликих межах.

В якості оцінок близькості для функціональних залежностей, що змінюються в широких межах, застосовують такі вирази

3) Критерій *середнього відносного відхилення*

$$R(a_1, a_2, \dots, a_s) = \min \left\{ \sum_{i=1}^n \left[\frac{f(x_i) - F(x_i, a_1, a_2, \dots, a_s)}{f(x_i)} \right] \right\} \quad (1.5)$$

4) Критерій *середньоквадратичного відносного відхилення*

$$R(a_1, a_2, \dots, a_s) = \min \left\{ \sum_{i=1}^n \left[\frac{f(x_i) - F(x_i, a_1, a_2, \dots, a_s)}{f(x_i)} \right]^2 \right\} \quad (1.6)$$

1.3 Вибір вигляду емпіричної формули. Метод вирівнювання.

У деяких випадках вибір типу емпіричної формули робиться на основі теоретичних уявлень про характер залежності, що досліджується. У інших випадках доводиться підбирати формулу, порівнюючи криву, побудовану за даними спостережень, із типовими графіками формул. Такі графіки наведені в довідниках. Іноді виявляється, що емпірична крива схожа на декілька кривих, рівняння яких різні. Зміна чисельних коефіцієнтів, що входять у формулу, часто різко змінює вид її графіка. Вибір масштабу координатних осей відбивається на формі побудованої кривої, що також може призвести до відмінності експериментальної кривої від графіка цілком відповідної їй формули.

Тому, перед тим, як визначати чисельні значення коефіцієнтів в обраній емпіричній формулі, необхідно *перевірити можливість її використання*. Лише після цього можна перейти до відшукування тих значень постійних коефіцієнтів, що дадуть найкраще наближення дослідних і обчислених величин.

Метод вирівнювання полягає в зміні функції $y = F(x)$ (аналітичної залежності) таким чином, щоб перетворити її в лінійну. Досягається це шляхом заміни змінних x і y новими змінними $X = q(x, y)$ і $Y = g(x, y)$, що вибираються так, щоб утворилося рівняння прямої лінії:

$$Y = A + BX \quad (1.7)$$

Обчисливши значення X_i і Y_i по заданим x_i і y_i , наносять їх на графік (діаграму) із прямокутними координатами (X , Y). Якщо побудовані таким способом точки розташовуються поблизу прямої лінії, то обрана емпірична формула $y = F(x)$ підходить для характеристики залежності $y = f(x)$ (табличної функції).

Під час аналізу й опису закономірностей хімічних і фізико-хімічних процесів і явищ емпіричну формулу найчастіше вибирають серед функцій: 1) $y = ax + b$ (лінійна); 2) $y = ab^x$ (показникова); 3) $y = 1/(ax + b)$ (дробово-раціональна);

- 4) $y = a \ln x + b$ (логарифмічна); 5) $y = ax^b$ (степенева, причому при $b > 0$ залежність параболічна, при $b < 0$ – гіперболічна); 6) $y = a + b/x$ (гіперболічна); 7) $y = x / (ax + b)$ (дробово-раціональна).

ПРИКЛАД. Задана деяка функція $y=f(x)$, яка представлена у вигляді таблиці.

Таблиця 1.1 – Дослідні дані експерименту

№ дослідю	1	2	3	4	5	6	7	8
x	1,2	1,5	1,7	1,8	2	2,2	2,5	2,8
y	8,5	3,7	2,7	1,8	1,4	0,6	0,4	0,18

Апроксимувати (замінити) табличну функцію $y=f(x)$ емпіричною формулою $y=F(x)$.

РОЗВ'ЯЗОК. Наше завдання – підібрати формулу, як можна більш просту, розрахунки по якій будуть наближатися до табличних даних.

Зауважимо наступне: на відміну від завдання до курсової роботи, де значення йдуть врозки, в таблиці дотримано нормальний порядок подання – x розміщені в порядку зростання від меншого до більшого.

Нанесемо дані на координатну площину (рис. 1.1).

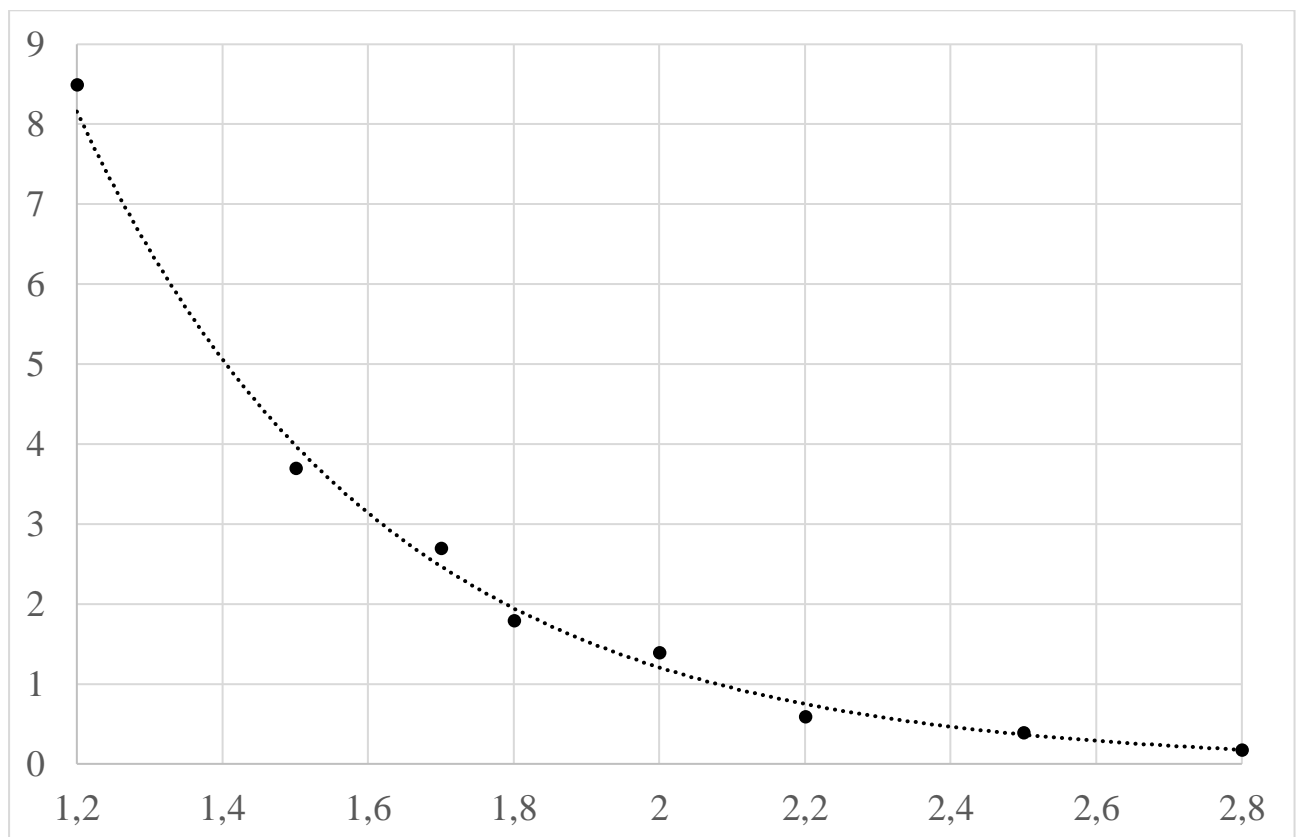


Рис. 1.1 – Графічна інтерпретація даних табл. 1.1.

Метод вирівнювання дозволяє нам знайти вигляд залежності (аналітичний вид формули), за допомогою якої ми зможемо замінити (апроксимувати) нашу табличну функцію ($y = f(x)$).

Перший висновок по виду кривої напрошується відразу: крапки не лежать поблизу прямої лінії, тому лінійна залежність

$$y = a + bx$$

не зможе замінити табличну функцію. Умовно проведена крива нагадує параболічну і експонентну залежність одночасно. Тобто вид нашої шуканої формули може бути

$$y = a + bx^2 \tag{1.8}$$

або

$$y = a e^{bx} \tag{1.9}$$

За методом вирівнювання приведемо наші формули до лінійного вигляду шляхом заміни змінних, перерахуємо наші нові отримані X і Y , і нанесемо їх на координатну площину (рис. 1.2 і рис. 1.3).

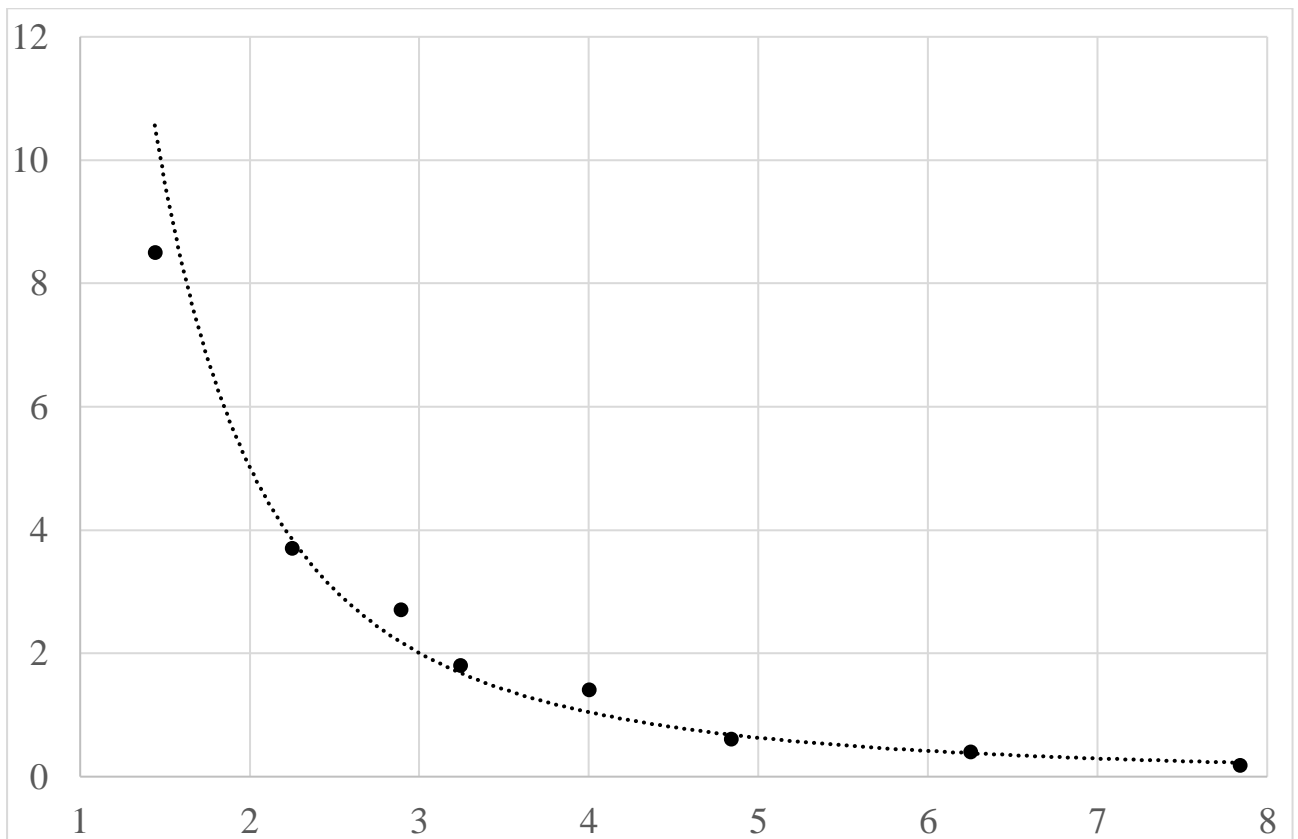


Рис. 1.2 – Графічне зображення даних табл. 1.2.

Для залежності $y = a + bx^2$ заміна очевидна: $X = x^2$, а $Y = y$ залишиться без змін. Тоді формула прийме лінійний вид $Y = A + BX$. Наші нові дані будуть виглядати так:

Таблиця 1.2

№ дослідю	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x^2$	1,44	2,25	2,89	3,24	4	4,84	6,25	7,84
$Y = y$	8,5	3,7	2,7	1,8	1,4	0,6	0,4	0,18

Для другої формули $y = ae^{bx}$ потрібно знайти логарифм обох частини:

$$\ln y = \ln a + bx.$$

Замінивши $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $X = x$ отримаємо лінійний вид залежності

$$Y = A + BX.$$

Дані таблиці 1.3, з урахуванням заміни:

Таблиця 1.3

№ дослідю	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x$	1,44	2,25	2,89	3,24	4	4,84	6,25	7,84
$Y = \ln y$	2,140	1,308	0,993	0,588	0,336	-0,511	-0,916	-1,715

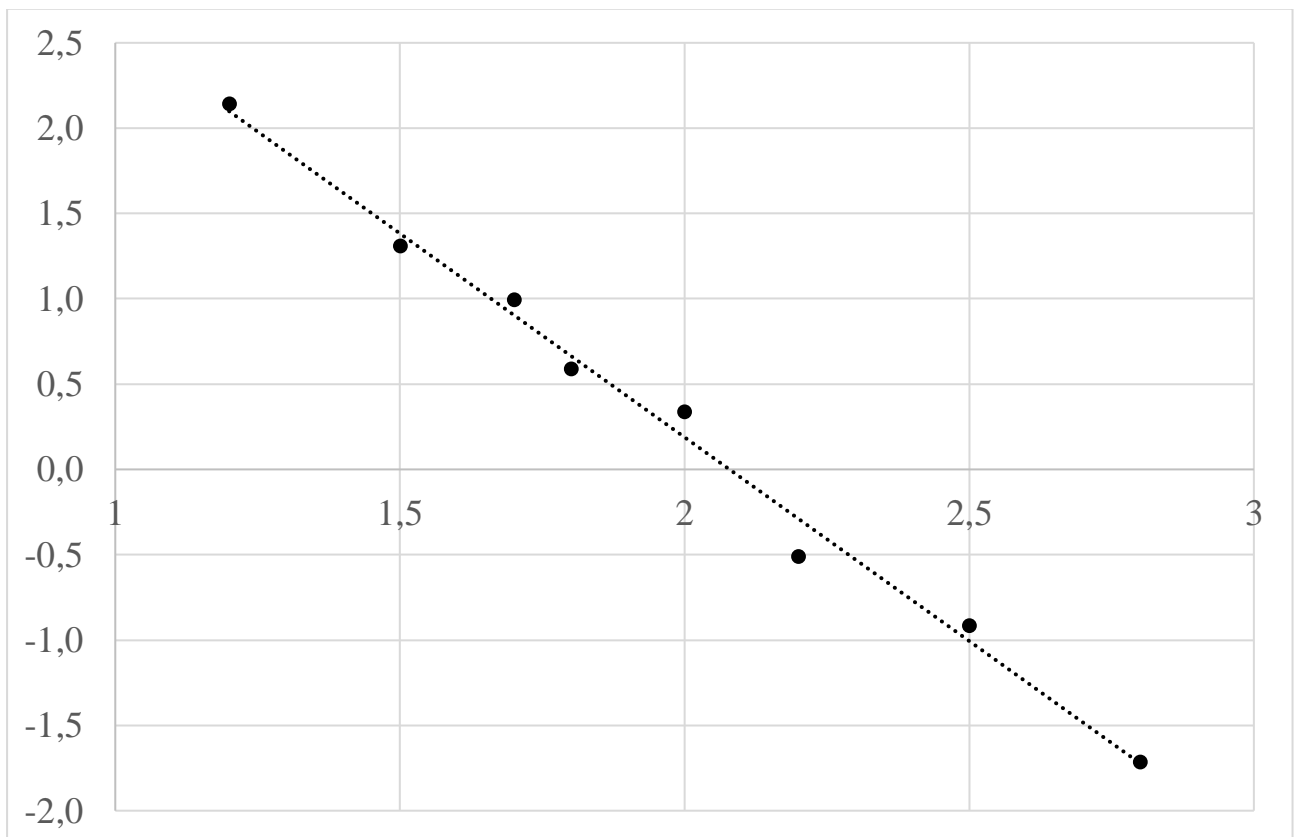


Рис. 1.3 – Графічне зображення даних табл. 1.3

Точки на рис. 1.2 не вкладаються на пряму (дані таблиці 1.2). Це означає, що залежність $y = a + bx^2$ не зможе описати табличну функцію. Навпаки точки

на рис. 1.3 добре розташовуються поблизу прямої лінії, тобто обрана формула $y = a e^{bx}$ підходить під опис табличній функції.

Таким чином, визначивши коефіцієнти в останній формулі, можна буде зробити по ній розрахунок значень функції. Цей розрахунок буде наближатися до табличних даних настільки добре, наскільки точно будуть порашовані коефіцієнти. Найпростіший метод розрахунку коефіцієнтів емпіричної формули – *метод вибраних точок*.

Питання до лекції 1

- 1) Скільки існує способів завдання функції, назвіть і охарактеризуйте їх?
- 2) Яким чином ставиться задача про наближення функції?
- 3) Які критерії використовують для оцінки близькості експериментальних і розрахункових значень?
- 4) Для яких задач використовують метод вирівнювання, в чому полягає його суть?

ЛЕКЦІЯ 2. ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЕМПІРИЧНОЇ ФОРМУЛИ. МЕТОДИ ВИБРАНИХ ТОЧОК І СЕРЕДНІХ. ЛІНІЙНА АПРОКСИМАЦІЯ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

2.1. Метод вибраних точок

Після того як вигляд емпіричної залежності обрано, вирішується задача визначення найкращих коефіцієнтів (параметрів), що входять у цю формулу. Як правило, пошук параметрів здійснюється для емпіричної формули, приведеної до лінійного вигляду. В основному, застосовуються три методи: метод обраних точок, метод середніх і метод найменших квадратів.

Нехай емпірична формула має вид (1.7) Потрібно знайти значення коефіцієнтів a і b .

Нанесемо на координатну площину дослідні точки (X_i, Y_i) . Як найближче до цих точок проводимо пряму (наближуюча пряма, рис. 2.1). На цій прямій вибираємо дві (по числу параметрів) довільні точки $N_1 (X_1, Y_1)$ і $N_2 (X_2, Y_2)$, не обов'язково збіжними з точками (X_i, Y_i) і якнайдалі віддаленими друг від друга. Координати цих точок підставляємо в рівняння (1.7), одержуємо систему:

$$\begin{aligned} Y_1 &= A + B \cdot X_1 \\ Y_2 &= A + B \cdot X_2 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Вирішуючи її, знаходимо A і B .

ПРИКЛАД. По дослідним даним (табл. 1.3) визначити методом обраних точок коефіцієнти емпіричної залежності (1.9).

РОЗВ'ЯЗОК. Для визначення коефіцієнтів формули (1.9) ($y = a e^{bx}$) використовуємо її лінійний вид (1.7). Значення змінних $X = x$ і $Y = \ln y$ з табл. 1.3. Графік залежності $Y=f(X)$ приведено на рис. 2.1.

Проведемо близько до точок графіку наближуючу пряму (рис. 2.1) і виберемо на ній довільні точки $N_1(X_1, Y_1)$ і $N_2(X_2, Y_2)$.

Вибір проведення прямої залишається за нами. На цій прямій вибираємо 2 точки, які розташовані якомога далі одна від одної. Наприклад, точки $N_1(1,4; 1,6)$ і $N_2(2,6; -1,3)$. Пряма $Y = A + BX$ проходить через 2 точки, а значить для координат кожної з них можна записати рівняння прямої. А потім 2 рівняння звести в систему.

$$\begin{aligned} A + B \cdot 1,4 &= 1,6 \\ A + B \cdot 2,6 &= -1,3 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Систему називають *нормальною*. Вирішивши її знайдемо коефіцієнти прямої A і B .

$$\begin{aligned} (2) - (1) \\ B \cdot (2,6 - 1,4) &= -1,3 - 1,6 \\ B \cdot 1,2 &= -2,9 \end{aligned}$$

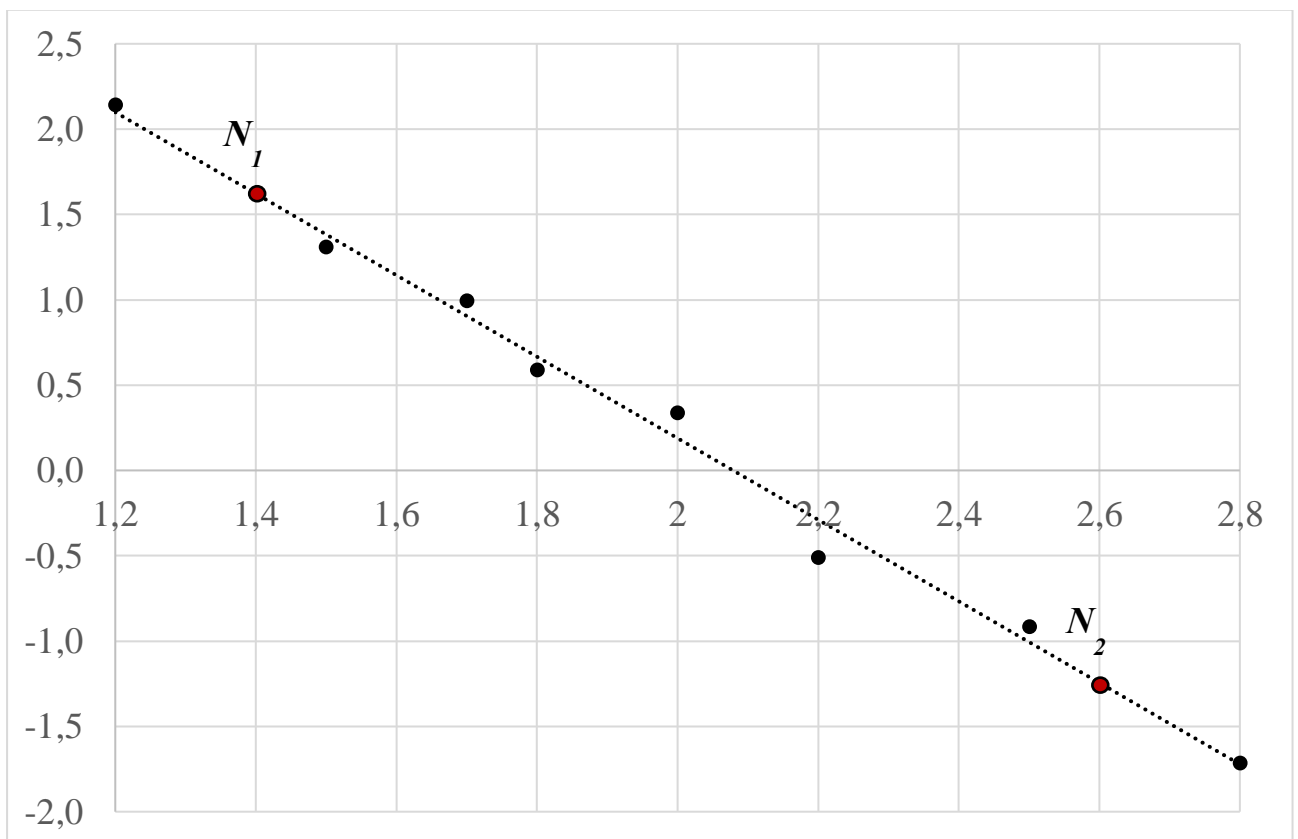


Рис. 2.1 – Дані таблиці 1.3, наближаюча пряма і вибрані довільні точки

$$B \approx -2,42$$

З рівняння (1)

$$A = 1,6 - B \cdot 1,4 = 4,99 \approx 5$$

Таким чином, остаточний вигляд лінійної залежності

$$Y = 5 - 2,4 \cdot X \quad (2.3)$$

Але висхідна залежність мала нелінійний характер $y = a e^{bx}$, приведена до лінійного виду заміною $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $X = x$. Таким чином коефіцієнт $a = e^A = e^5 = 148,4$. Фінальний вид емпіричної формули буде наступним:

$$y = 148,4 e^{-2,42 x}$$

2.2 Метод середніх

Нехай емпірична формула має вид (1.7). Підставимо у неї замість X і Y дослідні значення X_i і Y_i . Оскільки ліва частина формули звичайно не дорівнює правій, одержимо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} A + B \cdot X_1 - Y_1 &= E_1; \\ A + B \cdot X_2 - Y_2 &= E_2; \\ &\dots\dots\dots \\ A + B \cdot X_n - Y_n &= E_n; \end{aligned} \quad (2.4)$$

де E_1, E_2, \dots, E_n – відхилення, що можуть бути як позитивними, так і негативними.

Відповідно до методу середніх, за найкращу емпіричну залежність приймається та, що забезпечує *нульове значення суми відхилень* по всім експериментальним точкам, тобто алгебраїчна сума відхилень дорівнює нулю.

Для визначення параметрів A і B формули (1.7) поступають таким чином:

- 1) Складають умовні рівняння $Y_i = A + B \cdot X_i$, число котрих m дорівнює числу значень X_i і Y_i .
- 2) Умовні рівняння розбивають на приблизно рівні групи, число котрих n дорівнює числу коефіцієнтів, що потрібно визначити (у нашому випадку – 2).
- 3) Рівняння, що входять у кожну з цих груп, складають. Для даного випадку одержуємо два рівняння:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k Y_i &= k \cdot A + B \cdot \sum_{i=1}^k X_i; \\ \sum_{i=k+1}^m Y_i &= (m-k) \cdot A + B \cdot \sum_{i=k+1}^m X_i. \end{aligned} \quad (2.5)$$

- 4) З системи цих рівнянь знаходять невідомі коефіцієнти A і B .

Угруповання умовних рівнянь перед їхнім підсумовуванням можливо провести різноманітними способами, причому кожний із них дає декілька значень коефіцієнтів, що відрізняються. *Рекомендується групувати рівняння в порядку монотонної зміни однієї зі змінних.*

ПРИКЛАД. По дослідним даним (табл. 1.3) визначити методом середніх коефіцієнти емпіричної залежності (1.9).

РОЗВ'ЯЗОК. Для визначення коефіцієнтів формули (1.9) ($y = a e^{bx}$) використовуємо її лінійний вид (1.7). Значення змінних $X = x$ і $Y = \ln y$ беруться з табл. 1.3. 8 пар значень розбиваємо на 2 групи і складаємо для кожної групи по 4 умовних рівняння $Y_i = A + B \cdot X_i$:

$$2,140 = A + B \cdot 1,2$$

$$0,336 = A + B \cdot 2,0$$

$$\begin{array}{rcl}
+ & 1,308 = A + B \cdot 1,5 & + & -0,511 = A + B \cdot 2,2 \\
& 0,993 = A + B \cdot 1,7 & & -0,916 = A + B \cdot 2,5 \\
& \underline{0,588 = A + B \cdot 1,8} & & \underline{-1,715 = A + B \cdot 2,8} \\
& 5,029 = 4 \cdot A + B \cdot 6,2 & & -2,805 = 4 \cdot A + B \cdot 9,5
\end{array}$$

Підсумовуючи почленно кожену групу, одержимо систему нормальних рівнянь:

$$\begin{array}{l}
5,029 = 4 \cdot A + B \cdot 6,2 \\
-2,805 = 4 \cdot A + B \cdot 9,5
\end{array}$$

Розв'язавши систему, знаходимо значення коефіцієнтів формули (1.7), приведені до лінійного виду:

$$\begin{array}{l}
(4 - 4) \cdot A + (9,5 - 6,2) \cdot B = -2,805 - 5,029 \\
3,3 \cdot B = -7,834 \\
B = -2,374
\end{array}$$

$$A = (5,029 - 6,2 \cdot B) / 4 = 4,937$$

Переходячи до початкового виду формули (1.7) одержимо остаточно її вид:

$$Y = 4,937 - 2,374 \cdot X \quad (2.6)$$

Первісний вигляд отриманої формули $y = a e^{bx}$. Вона була приведена до лінійного вигляду заміною змінних $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $X = x$. Таким чином коефіцієнт $a = e^A = e^{4,937} = 139,4$. Фінальний вид емпіричної формули у випадку розрахунку коефіцієнтів за методом середніх буде наступним:

$$y = 139,4 e^{-2,374 x}$$

2.3 Метод найменших квадратів

Емпірична формула в загальному виді може бути записана так:

$$\tilde{y}_i = F(x_i, a_j), \quad (2.7)$$

де x_i – незалежні змінні, a_j – коефіцієнти емпіричної залежності.

Відповідно до методу найменших квадратів найкращими будуть коефіцієнти, знайдені за умови:

$$\min \{R(a_j)\} = \sum_{i=1}^n [f(x_i) - F(x_i, a_j)]^2 \quad (i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 0, 1, \dots, m) \quad (2.8)$$

тобто мінімуму суми квадратів відхилень між експериментальними ($y_i = f(x_i)$) і розрахунковими (\tilde{y}_i) значеннями.

При фіксованих значеннях x_i функція $R(a_j)$ є позитивно визначеною функцією (заданою і неперервною на інтервалі $[x_1, x_n]$) і, отже має екстремум. Необхідною умовою існування екстремуму функції декількох змінних є рівність нулю часткових похідних.

Нехай емпірична формула має вид

$$F(x_i, a_j) = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m \quad (2.9)$$

Тоді вираз (2.8) можна записати в такому виді:

$$R(a_j) = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m)^2 \quad (2.10)$$

Знайдемо часткові похідні функції $R(a_0, a_1, \dots, a_m)$ по a_0, a_1, \dots, a_m і

дорівнюємо їх до нуля. Одержимо так названу нормальну систему $m+1$ рівнянь із $m+1$ невідомими a_0, a_1, \dots, a_m :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial a_0} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial R}{\partial a_1} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m) \cdot x_i = 0 \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{\partial R}{\partial a_m} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_m x_i^m) \cdot x_i^m = 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Розв'язавши систему (2.11) відомими методами (формули Крамера, метод Гауса та ін.), знайдемо коефіцієнти a_0, a_1, \dots, a_m емпіричної формули (2.7).

На практиці, як правило, при визначенні коефіцієнтів по методу найменших квадратів будь-яку емпіричну залежність доцільно привести до лінійного вигляду. Розглянемо одержання системи нормальних рівнянь для цього випадку.

Потрібно визначити коефіцієнт емпіричної формули

$$\tilde{y}_i = F(x_i, a_j) = a + b \cdot x_i. \quad (2.12)$$

Тоді вираз (2.8) прийме вид:

$$R(a_j, x_i) = \sum_{i=1}^n (y_i - a + b \cdot x_i)^2 \quad (2.13)$$

Нормальна система для визначення a і b буде мати такий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial a} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a + b \cdot x_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial R}{\partial b} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a + b \cdot x_i) \cdot x_i = 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Зробивши найпростіші перетворення, одержимо:

$$\begin{aligned} a \cdot n + b \cdot \sum_{i=1}^n x_i &= \sum_{i=1}^n y_i \\ a \cdot \sum_{i=1}^n x_i + b \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 &= \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \end{aligned} \quad (2.15)$$

Розв'язавши систему (2.15), одержуємо значення a і b . Підставивши їх у вираз (2.12), отримаємо вид емпіричної формули.

Коефіцієнти регресії b і a можна обчислити по формулам:

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}; \quad (2.16)$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - b \sum_{i=1}^n x_i}{n}. \quad (2.17)$$

ПРИКЛАД. По дослідним даним (табл. 1.3) визначити методом найменших квадратів коефіцієнти емпіричної залежності (1.9).

РОЗВ'ЯЗОК. Для розрахунку параметрів формули скористаємося традиційно її лінійним видом. Попередньо обчислимо всі потрібні суми (таблиця 2.1) для обчислень за виразами (2.16) і (2.17)

Таблиця 2.1

i	1	2	3	4	5	6	7	8	sum
X_i	1,2	1,5	1,7	1,8	2	2,2	2,5	2,8	15,700
Y_i	2,140	1,308	0,993	0,588	0,336	-0,511	-0,916	-1,715	2,224
$X_i Y_i$	2,568	1,962	1,689	1,058	0,673	-1,124	-2,291	-4,801	-0,266
X_i^2	1,44	2,25	2,89	3,24	4	4,84	6,25	7,84	32,750

$$B = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{8 \cdot (-0,266) - 15,7 \cdot 2,244}{8 \cdot 32,75 - 15,7^2} = -2,388$$

$$A = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - b \sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{2,244 - (-2,388) \cdot 15,7}{8} = 4,965$$

$$a = e^A = e^{4,965} = 143,34$$

Лінійний вигляд формули (1.9)

$$Y = 4,965 - 2,388 \cdot X \quad (2.18)$$

Остаточний вигляд

$$y = 143,34 e^{-2,388 x}$$

Питання до лекції 2

- 1) Якими методами визначаються параметри емпіричної формули? Які критерії лежать в основі того чи іншого методу?
- 2) Яким чином визначаються коефіцієнти емпіричної формули за метод обраних точок?
- 3) Як отримати систему нормальних рівнянь методом середніх?
- 4) Отримання системи нормальних рівнянь методом найменших квадратів.

ЛЕКЦІЯ 3. ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. ПАРАБОЛІЧНА ІНТЕРПОЛЯЦІЯ. ІНТЕРПОЛЯЦІЙНА ФОРМУЛА ЛАГРАНЖА. ОБЕРНЕНЕ ІНТЕРПОЛЮВАННЯ.

3.1 Постановка задачі інтерполяції

Нехай деяка функція $y=f(x)$ задана таблицею (табл. 3.1), тобто при значеннях аргументу $x=x_0, x_1, \dots, x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідні значення y_0, y_1, \dots, y_n .

Таблиця 3.1 – Таблиця експериментальних значень

x	x_0	x_1	x_2	x_n
y	y_0	y_1	y_2	y_n

Також нехай необхідно визначити значення $y=f(\bar{x})$, ($x_{i-1} < \bar{x} < x_i$). Величина $x = \bar{x}$ потрапляє між двома табличними значеннями, тому для обчислення значення функції необхідно запропонувати деякий характер її зміни між відомими експериментальними даними.

Інтерполяцію можна розглядати як процес визначення для даного аргументу x значення функції $y=f(x)$ по її декількох відомих значеннях. При цьому розрізняють *інтерполяцію у вузькому смислі*, коли x знаходиться між x_0 і x_n , і *екстраполювання*, коли x знаходиться поза відрізком інтерполяції $[x_0, x_n]$.

Задача інтерполяції полягає в наступному. На відрізку $[a, b]$ задані $n+1$ точки x_0, x_1, \dots, x_n , що називаються *вузлами інтерполяції*, і значення деякої функції $f(x)$ у цих точках.

$$\begin{aligned} f(x_0) &= y_0; \\ f(x_1) &= y_1; \\ &\dots\dots\dots \\ f(x_n) &= y_n \end{aligned} \tag{3.1}$$

Потрібно побудувати функцію $P_n(x)$ (*інтерполюючу функцію*), яка б задовольняла таким умовам:

$$\begin{aligned} P_n(x_0) &= y_0; \\ P_n(x_1) &= y_1; \\ &\dots\dots\dots \\ P_n(x_n) &= y_n \end{aligned} \tag{3.2}$$

тобто інтерполююча функція $P_n(x)$ повинна приймати ті ж значення, що і функція $f(x)$, для вузлових значень аргументу x_0, x_1, \dots, x_n .

Геометрично це означає, що потрібно знайти криву $y=P_n(x)$ деякого визначеного типу, що проходить через задану систему точок $M_i (x_i, y_i)$ ($i=0, 1, 2, \dots, n$). Очевидно, можна побудувати множину неперервних функцій, що будуть проходити через задані вузлові точки.

Заміна функції $f(x)$ її інтерполяційним багаточленом $P_n(x)$ може

знадобитися не тільки тоді, коли відома лише таблиця її значень, але і коли аналітичний вираз для $f(x)$ відомо, проте є занадто складним і незручним для подальших математичних перетворень (наприклад, для інтегрування, диференціювання та ін.). Іноді розглядаються задачі тригонометричної інтерполяції (інтерполююча функція – тригонометричний поліном). Інтерполюючою може бути також раціональна функція.

У загалі залежність, якою підпорядковується функція, може бути апроксимована багаточленом ступеня n :

$$P_n(x) = y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n. \quad (3.3)$$

Таку задачу називають задачею *параболічної інтерполяції* (або *інтерполюванням*).

3.2 Параболічна інтерполяція

Для визначення коефіцієнтів багаточлена (3.3) необхідно мати $n+1$ вузлову точку. Аналітичне визначення коефіцієнтів інтерполяційного багаточлена для $n+1$ точки зводиться до рішення системи лінійних рівнянь $n+1$ порядку, кожне з яких являє собою вираз (3.3), записаний для визначеної вузлової точки

$$y_i = a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + \dots + a_n \cdot x_i^n, \quad (3.4)$$

де $i = 1, 2, \dots, n+1$.

Даним методом побудови інтерполяційного поліному зручно користуватися, маючи комп'ютер і відповідні програми. Даний метод не є єдиним способом побудови інтерполяційного поліному. Інший підхід, яким часто користуються на практиці, називається методом Лагранжа.

3.3 Метод Лагранжа

Нехай при $x=x_0, x_1, \dots, x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідно значення y_0, y_1, \dots, y_n . Багаточлен ступеня не вище n , що приймає у вузлових точках задані значення, має вид:

$$P_n(x) = y = \sum_{i=1}^n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \cdot y_i. \quad (3.5)$$

Цей багаточлен (3.5) називається *інтерполяційною формулою Лагранжа* і має такі властивості:

1. При заданій сукупності вузлових точок будова багаточлена можлива тільки єдиним способом.
2. Багаточлен Лагранжа може бути побудовано при будь-якому розташуванні вузлів інтерполяції (включаючи і нерівномірне).

У розгорнутому виді форма Лагранжа має вид:

$$P_n(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)\dots(x_0-x_n)} \cdot y_0 + \\ + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)\dots(x_1-x_n)} \cdot y_1 +$$

$$\begin{aligned}
& + \dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \cdot y_i + \\
& + \dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)\dots(x_n-x_{n-1})} \cdot y_n.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

При $n=1$ формула Лагранжа має вид:

$$P(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} \cdot y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \cdot y_1 \tag{3.7}$$

і називається формулою лінійної інтерполяції.

При $n=2$ одержимо формулу квадратичної інтерполяції:

$$P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \cdot y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \cdot y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \cdot y_2 \tag{3.8}$$

3.4 Обернене інтерполювання

Нехай функція $y=f(x)$ задана таблицею. Задача *оберненого інтерполювання* полягає в тому, щоб по заданому значенню функції y визначити відповідне значення аргументу x .

Якщо вузли інтерполяції $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ нерівновіддалені, задача легко вирішується за допомогою інтерполяційної формули Лагранжа (3.5). Для цього достатньо прийняти y за незалежну змінну, а x вважати функцією. Тоді отримаємо

$$x = \sum_{i=0}^n x_i \frac{(y-y_0)(y-y_1)\dots(y-y_{i-1})(y-y_{i+1})\dots(y-y_n)}{(y_i-y_0)(y_i-y_1)\dots(y_i-y_{i-1})(y_i-y_{i+1})\dots(y_i-y_n)} \tag{3.9}$$

ПРИКЛАД. Термодинамічні характеристики води на лінії насичення представлені в таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 – Термодинамічні характеристики води на лінії насичення

T, °C	110	120	130	140	150	160	170	180
$\mu \cdot 10^6$, Па · с	256	231	212	196	185	174	163	153

Використовуючи метод параболічної інтерполяції, визначити необхідну ступінь поліному, його коефіцієнти і значення параметрів y зазначених невузлових точках (при $T=115^\circ\text{C}$); аналогічні розрахунки виконати з використанням формули Лагранжу.

РОЗВ'ЯЗОК. Для визначення, наприклад, значення коефіцієнта в'язкості (μ) в невузловій точці при температурі $T=115^\circ\text{C}$ потрібно припустити на початку самий простіший характер зв'язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (T) – *лінійний*. Тобто ступінь поліному дорівнює одиниці. Так, можна записати:

$$\mu^{(1)} = a + b \cdot T \tag{3.10}$$

Для визначення коефіцієнтів a і b прямої потрібно вибрати з таблиці 3.1 *дві*

вузлові точки між якими розташовано задане значення $T=115^{\circ}\text{C}$ (або найближчі значення до нього для випадку екстраполювання). В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°C і 120°C . Використовуючи основну властивість інтерполюючого поліному (3.2) можна записати систему рівнянь і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a і b .

$$\begin{aligned} 256 &= a + b \cdot 110 \\ 231 &= a + b \cdot 120 \\ a &= 531 \\ b &= -2,5 \end{aligned}$$

Остаточний вигляд залежності (5.10)

$$\mu^{(1)} = 531 - 2,5 \cdot T \quad (3.11)$$

Визначимо коефіцієнт в'язкості для заданої температури:

$$\mu^{(1)} = 531 - 2,5 \cdot 115 = 243,5 \cdot 10^{-6}, \text{ Па} \cdot \text{с}$$

Тепер припустимо більш складніший тип зв'язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (T) – *квадратичний*. Тоді можна записати наступне:

$$\mu^{(2)} = a + b \cdot T + c \cdot T^2 \quad (3.12)$$

Для визначення коефіцієнтів параболи потрібно вибрати вже три вузлові точки. В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°C , 120°C і 130°C . Тоді стає можливим скласти систему 3 рівнянь, а також і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a , b і c .

$$\begin{aligned} 256 &= a + b \cdot 110 + c \cdot 110^2 \\ 231 &= a + b \cdot 120 + c \cdot 120^2 \\ 212 &= a + b \cdot 130 + c \cdot 130^2 \\ a &= 927 \\ b &= -9,4 \\ c &= 0,03 \end{aligned}$$

Тоді поліном другого порядку остаточно:

$$\mu^{(2)} = 927 - 9,4 \cdot T + 0,03 \cdot T^2 = 242,75 \cdot 10^{-6}, \text{ Па} \cdot \text{с} \quad (3.13)$$

Розрахуємо відносну похибку обчислень, виконаних для одного і того ж значення по температурі:

$$\beta = \frac{|\mu^{(2)} - \mu^{(1)}|}{\mu^{(1)}} \cdot 100\% = \frac{|242,75 - 243,5|}{243,5} \cdot 100\% = 0,31\%$$

Якщо прийняти за стандарт похибки експерименту величину 3%, то отримане нами значення виявляється значно меншим. Тобто для виконання задачі інтерполювання у випадку розрахунку коефіцієнта в'язкості для заданої температури остаточно приймаємо *лінійний* характер зв'язку.

Для заданих значень повторюємо обчислення за допомогою формули Лагранжа.

При $n=1$

$$\mu^{(1)}(T) = \frac{115 - 120}{110 - 120} \cdot 256 + \frac{115 - 110}{120 - 110} \cdot 231 = 243,5 \cdot 10^{-6}, \text{ Па} \cdot \text{с}$$

Як бачимо, значення параметрів, розрахованих за допомогою параболічної інтерполяції і формули Лагранжа збігаються між собою.

При $n=2$

$$\begin{aligned}\mu^{(2)}(T) = & \frac{(115-120)(115-130)}{(110-120)(110-130)} \cdot 256 + \frac{(115-110)(115-130)}{(120-110)(120-130)} \cdot 231 + \\ & + \frac{(115-110)(115-120)}{(130-110)(130-120)} \cdot 212 = 242,75 \cdot 10^{-6}, \text{ Па} \cdot \text{с}\end{aligned}$$

Питання до лекції 3

- 1) Що таке інтерполяція функцій? В чому полягає відміна інтерполяції від апроксимації?
- 2) Основна сутність метода параболічного інтерполювання.
- 3) Основні особливості методу Лагранжа, блок-схема методу.
- 4) Обернене інтерполювання.
- 5) Визначення порядку інтерполяційного поліному.

ЗМ 2. ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ

Класичні методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь часто на практиці або призводять до складних рішень, або взагалі не застосовуються (коефіцієнти або функції в диференціальному рівнянні містять суттєві нелінійності або задані у вигляді таблиць експериментальних даних).

Тому великого значення набувають методи наближеного інтегрування диференціальних рівнянь, які в залежності від форми подання рішення можна розділити (умовно) на три групи:

- 1) аналітичні, що дають наближений розв'язок диференціального рівняння у вигляді аналітичного виразу;
- 2) графічні, що дають наближений розв'язок у вигляді графіка;
- 3) чисельні, що дають наближений розв'язок у вигляді таблиці.

Розглянемо деякі чисельні методи вирішення звичайних диференціальних рівнянь.

ЛЕКЦІЯ 4. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. МЕТОД ЕЙЛЕРА. ІНТЕГРУВАННЯ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ РЯДОМ ТЕЙЛОРА.

4.1 Постановка задачі

Диференційне рівняння встановлює зв'язок між незалежними змінними, невідомими (шуканими) функціями та їх похідними.

Рішення диференційного рівняння n -го порядку

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (4.1)$$

полягає у відшуванні функції $y=y(x)$, котра задовольняє (4.1) та початковим умовам:

$$y(x_0) = y_0; y'(x_0) = y'_0; y''(x_0) = y''_0; y^{(n)}(x_0) = y^{(n-1)}_0, \quad (4.2)$$

де $y_0, y'_0, y''_0, \dots, y^{(n-1)}_0$ – задані числа.

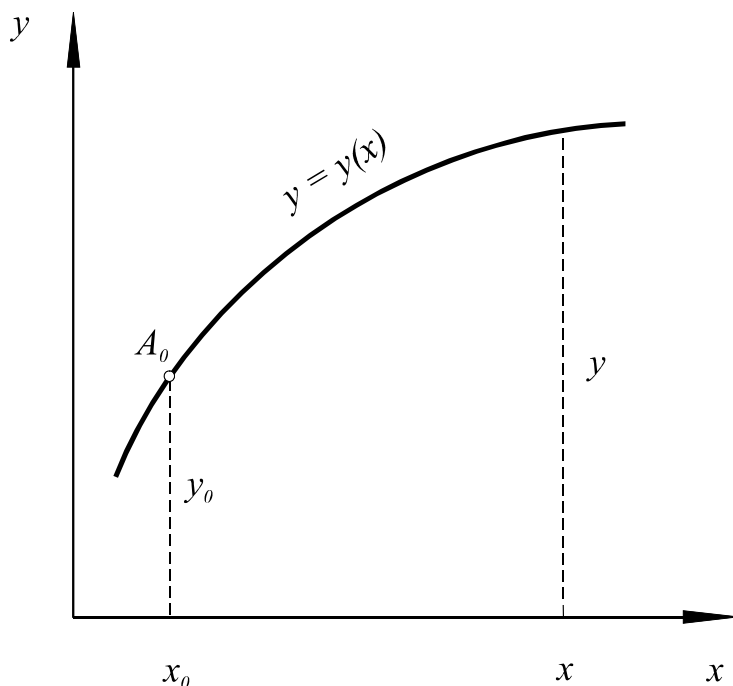


Рис. 4.1 – Графік інтегральної кривої $y=y(x)$, що проходить через задану точку $A(x_0, y_0)$

Така задача називається задачею Коши. Для звичайного диференційного рівняння першого порядку

$$y' = f(x, y) \quad (4.3)$$

початкова умова має вигляд:

$$y(x_0) = y_0. \quad (4.4)$$

Геометричний зміст рішення цієї задачі полягає в знаходженні інтегральної кривої $y=y(x)$, яка проходить через задану точку $A(x_0, y_0)$ (рис. 4.1). Рівняння (4.3) встановлює зв'язок між координатами та похідною від функції в наданій точці в системі координат $y-x$. Отже, для будь-якої точки за (4.3) можливо обчислити похідну, тобто тангенс кута нахилу дотичної до кривої $y=y(x)$. Інакше кажучи, рівняння (4.3) можливо розглядати як визначення кривої через її похідну.

Чисельне рішення задачі Коши полягає в знаходженні значень y_1, y_2, \dots, y_n в точках $x_1=x_0+h, x_2=x_0+2h, \dots, x_n=x_0+nh$ відрізка $[a, b]$, де h – шаг інтегрування, $x_0=a, x_n=b$. Завдавши точки $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ на координатній площині та з'єднав їх відрізками прямої, одержимо ламану лінію, яка зветься ламана Ейлера – приближене зображення шуканої кривої (рис. 4.2)

Цей метод рішення диференційного рівняння називається методом Ейлера. Цілком зрозуміло, що у цьому найпростішому методі безліч недоліків. Ми намагаємося описати криву відрізками прямої, що може приводити до помітних похибок (рис. 4.2). Очевидно, що яким-небудь способом необхідно облічувати кривизну шуканого рішення. Для цього розроблено ряд методів, котрі підрозділяються на два класи – *одноступінчаті* та *багаступінчаті* методи.

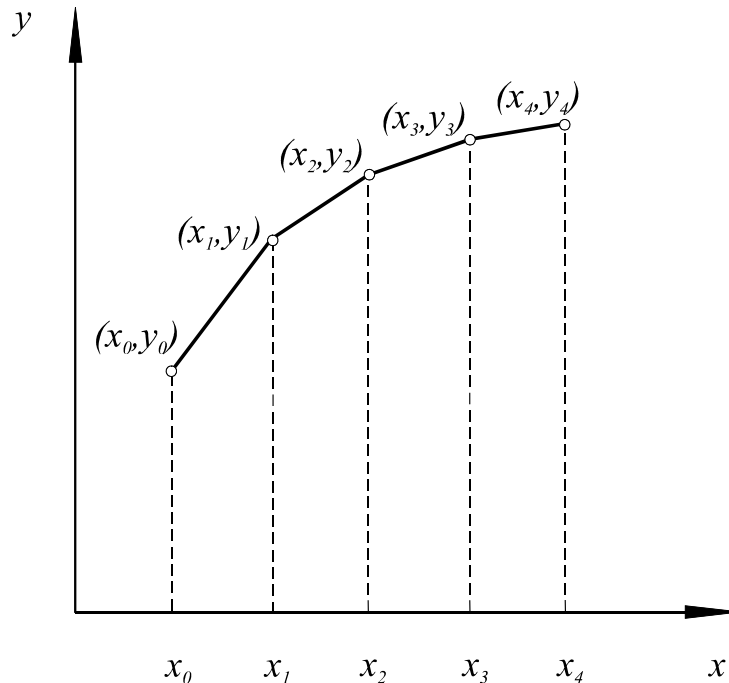


Рис. 4.2 – Ламана Ейлера

1. В *одноступінчатих* методах використовується тільки інформація про шукану криву в одній точці та не робляться ітерації. Одним з таких методів є рішення рівнянь за допомогою рядів Тейлора. Практично зручними методами виявляються методи Рунге-Кута.
2. У *багаступінчатих* методах використовується інформація про криву як мінімум у двох точках та вживається ітераційна процедура. До цих методів належать методи прогнозу та корекції.

Головна особливість чисельного рішення диференціальних рівнянь першого порядку: *рівняння $y' = f(x, y)$ встановлює зв'язок між координатами точки на площині і похідною функції y в даній точці.* Таким чином для будь-якої точки по рівнянню першого порядку можна обчислити похідну, тобто тангенс кута нахилу дотичної до кривої $y=y(x)$. Інакше кажучи, рівняння можна розглядати як визначення кривої через її похідну. Підсумкове рішення – шукану функцію – ми отримаємо у вигляді таблиці x і y .

4.2 Одноступінчасті методи. Рішення за допомогою рядів Тейлора

Методика чисельного рішення будь-якого диференційного рівняння зв'язана з розкладом рішення у ряд Тейлора у h -околу точки x :

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot y_i' + (h^2/2!) \cdot y_i'' + (h^3/3!) \cdot y_i''' + \dots \quad (4.5)$$

де $y_i^{(k)}$ – k -а похідна функції $y=f(x)$ у точках $x=x_k$; $h=x_{i+1}-x_i$.

Пошук рішення за допомогою ряду Тейлора являється *одноступінчатим* методом, тому що для обчислення y_{i+1} потрібна інформація тільки про одну попередню точку. Принципово (4.5) може бути використана при інтегруванні будь-якого диференційного рівняння з будь-якою наперед заданою точністю, від якої буде залежати число членів ряду. На практиці через необхідність обчислення функції та всіх її похідних, що дуже складно, цей метод використовується як спосіб оцінки точності інших формул, тобто наскільки той або інший метод погоджується з розкладом у ряд Тейлора. Деякі методи будуть погоджуватися до членів порядку h , другі – аж до членів порядку h^4 і т.п.

4.3 Метод Ейлера

Нехай дано рівняння (4.3), яке задовольняє початковій умові (4.4). Рішенням цього рівняння виявляється функція $y=y(x)$, яка визначена на інтервалі $[a,b]$. Для інтегрування скористуємося (4.5), обмежуючись двома членами ряду:

$$y_{i+1}=y_i+h \cdot y_i'=y_i+h \cdot f(x_i,y_i). \quad (4.6)$$

Інтегрування за методом Ейлера полягає у послідовному застосуванні формули (4.6) до рівняння (4.3), починаючи з $i=1$. У присутності початкової умови (4.4) для обчислення y_1 не потрібна додаткова інформація – достатньо обчислити праву частину (4.3) при заданих значеннях x_0 та y_0 .

Обчислення y_1 аналогічне проведенню дотичної в точці (x_0,y_0) , тангенс кута нахилу якої задається правою частиною (4.3) при $x=x_0$, $y=y_0$, до перетинання з вертикальною прямою, проведеною із точки $x=x_1$ (рис. 4.3). При наступному кроці, тобто при обчисленні y_2 , знов визначається похідна, але вже у точці з координатами (x_1,y_1) . З цієї точки проводиться дотична до перетинання з прямою $x=x_2$. Аналогічно повторюються обчислення для y_3, y_4, \dots

Дотична проводиться до перетину з вертикальною прямою, проведеною з точки $x=x_1$. На перетині отримуємо точку В с координатами $B(x_1, y_1)$. x_1 знаходиться на відстані кроку інтегрування від лівої границі інтервалу.

$$x_1 = a + h = x_0 + h$$

y_1 можливо знайти з співвідношень сторін прямокутного трикутника ABC , помітивши, що

$$\operatorname{tg} \alpha = BC/AC = \Delta y / \Delta x = f(x_0, y_0) = y'_0.$$

$$\Delta y = y_1 - y_0; \Delta x = x_1 - x_0 = h.$$

Тоді $(y_1 - y_0)/h = y'_0$ і

$$y_1 = y_0 + h y'_0 = y_0 + h f(x_0, y_0)$$

Отриманий вираз носить назву *формули методу Ейлера*.

При наступному кроці, тобто при обчисленні y_2 , знову визначається похідна, але вже в точці $B(x_1, y_1)$, і проводиться нова дотична до перетину з прямою $x = x_2$ (точка D, рис. 4.5).

$$y_2 = y_1 + h y'_1 = y_1 + h f(x_1, y_1)$$

...

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i = y_i + h f(x_i, y_i)$$

$$y_n = y_{n-1} + h y'_{n-1} = y_{n-1} + h f(x_{n-1}, y_{n-1})$$

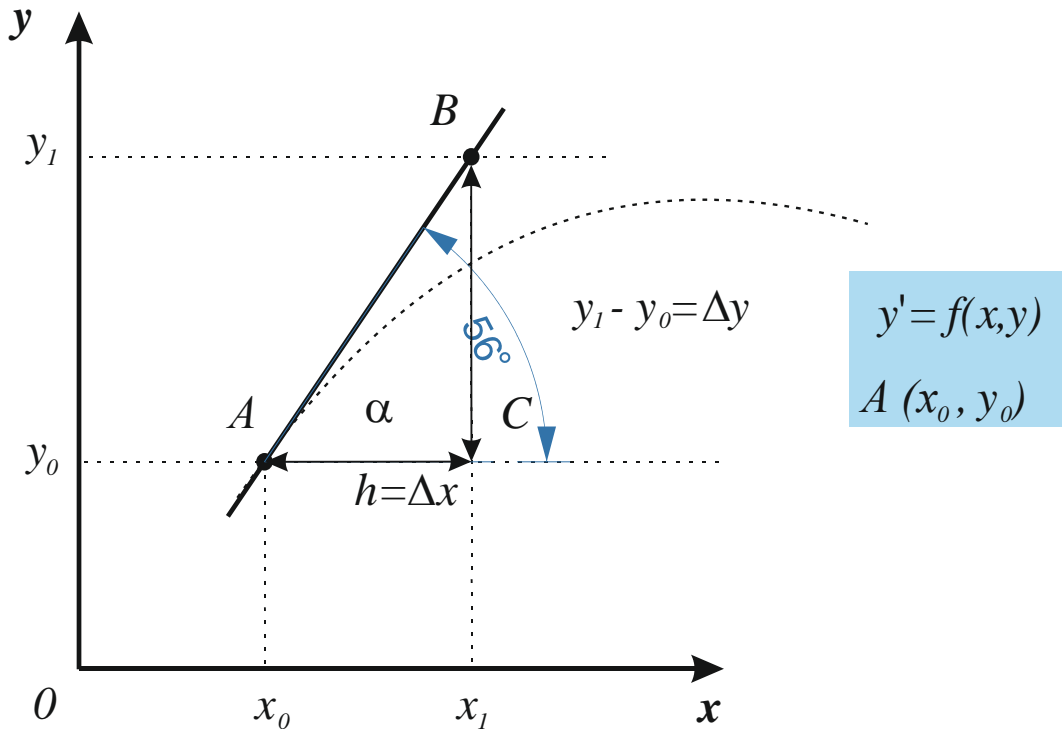


Рис. 4.3 – Чисельне рішення рівняння методом Ейлера

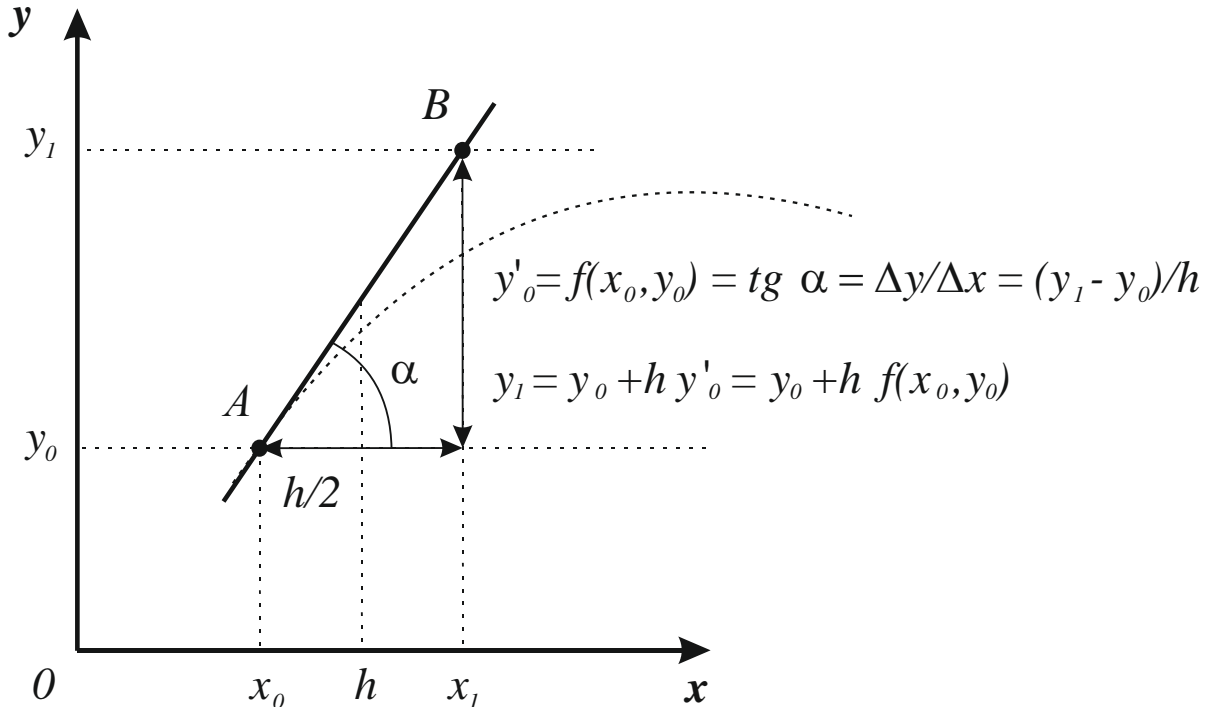


Рис. 4.4 – Формула Ейлера

При достатньо малій величині кроку h метод Ейлера дає рішення з достатньою точністю, тому що похибка рішення близька до h^2 ($h \ll 1$) на кожному кроці інтегрування. До недоліків методу необхідно віднести сильну

залежність одержаного рішення від величини кроку h та збільшення об'єму обчислень для досягнення задовільної точності.

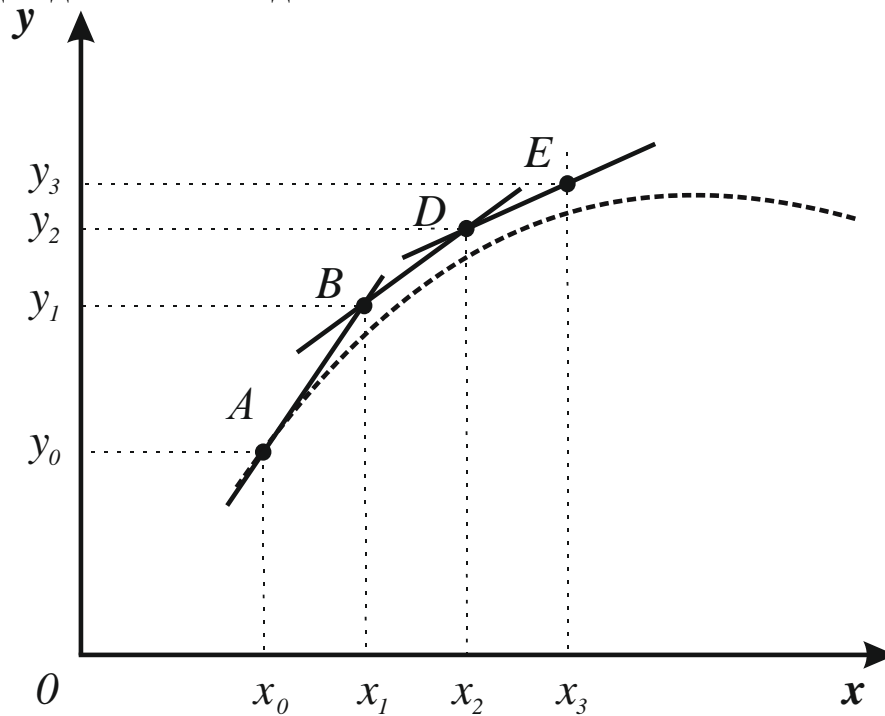


Рис. 4.5 – Метод Ейлера

Блок-схему методу приведено на рис. 4.6.

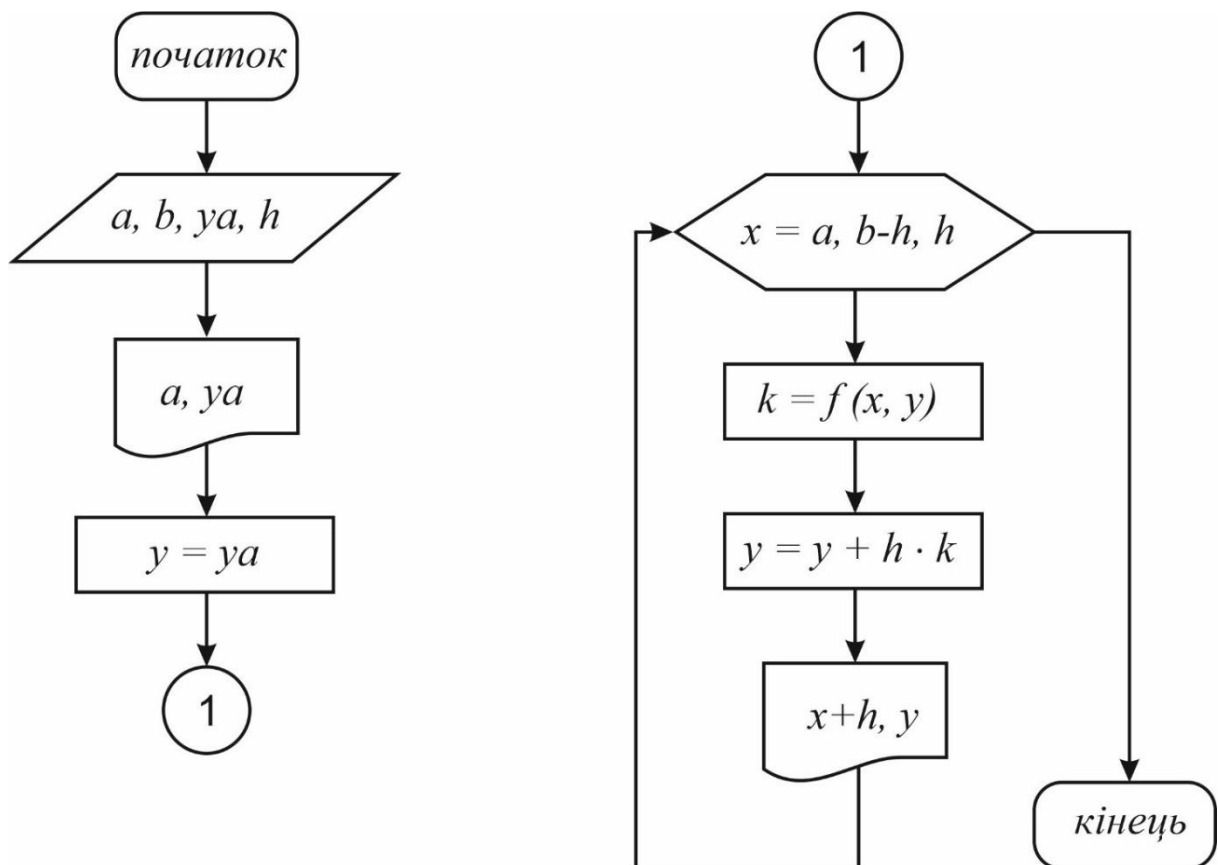


Рис. 4.6 – Блок-схема методу Ейлера

В блок схемі: a, b – границі інтервалу; h – шаг інтегрування; a, y_a – точка початкової умови; x – поточне значення вузлової точки інтервалу інтегрування; k – значення похідної в поточній точці.

ПРИКЛАД: Швидкість реакції пропорційна кількості вихідного продукту

$$dy/dt = y' = -ky. \quad (4.7)$$

Знак « \rightarrow » говорить про те, що вихідна речовина витрачається в ході реакції. $k = 0,01$ – константа швидкості реакції. Початкові умови (ПУ):

$$t = 0, y = 100.$$

Скільки речовини залишиться в момент часу $t = 80$ с. Знайти рішення чисельно з $h = 20$ с, використовуючи *метод Ейлера*.

РОЗВ'ЯЗОК: Формула Ейлера має загальний вигляд

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i = y_i + h f(x_i, y_i)$$

Знайдемо рішення, починаючи з точки ПУ:

$$y'_0 = -k y_0 = -0,01 \cdot 100 = -1$$

$$t = 20: y_{20} = y_0 + h y'_0 = 100 + 20 \cdot (-1) = 80; \quad y'_{20} = -0,01 \cdot 80 = -0,8;$$

$$t = 40: y_{40} = y_{20} + h y'_{20} = 80 + 20 \cdot (-0,8) = 64; \quad y'_{40} = -0,01 \cdot 64 = -0,64;$$

$$t = 60: y_{60} = y_{40} + h y'_{40} = 64 + 20 \cdot (-0,64) = 51,2; \quad y'_{60} = -0,01 \cdot 51,2 = -0,512;$$

$$t = 80: y_{80} = y_{60} + h y'_{60} = 51,2 + 20 \cdot (-0,512) = \mathbf{40,96}$$

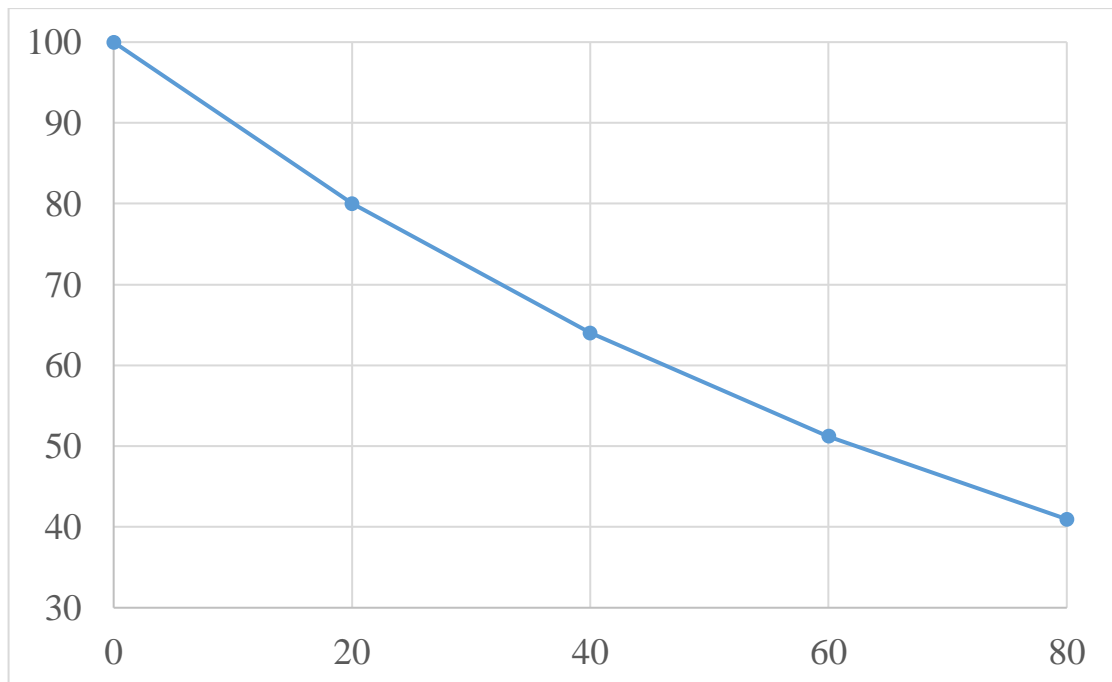
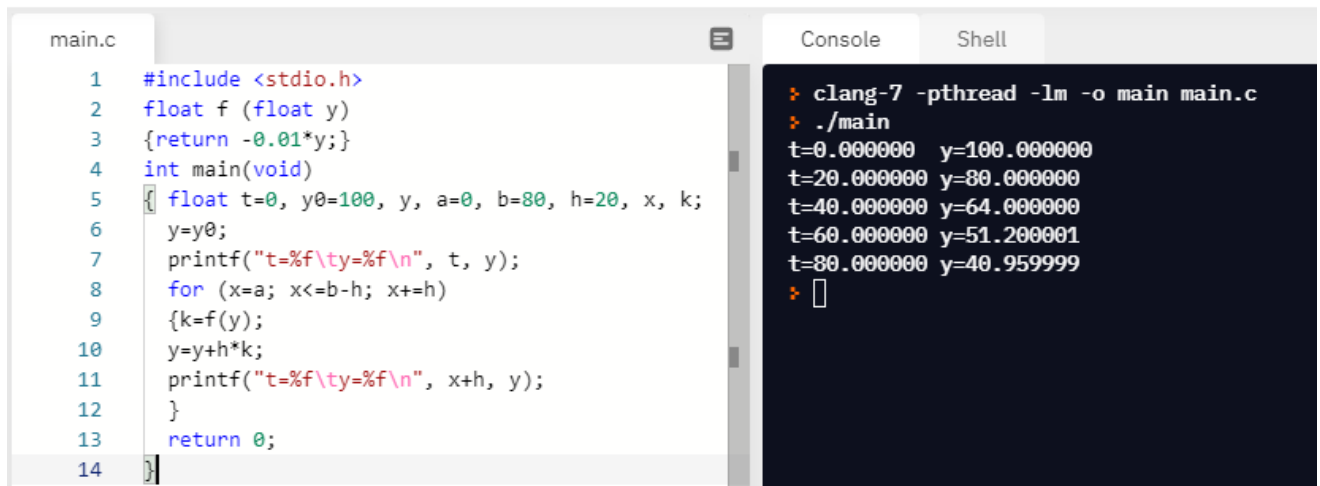


Рис. 4.7 – Графічна інтерпретація рішення за методом Ейлера

Рішення має вигляд табличній функції:

i	0	1	2	3	4
t	0	20	40	60	80
y	100	80	64	51,2	40,96



```

main.c
1  #include <stdio.h>
2  float f (float y)
3  {return -0.01*y;}
4  int main(void)
5  { float t=0, y0=100, y, a=0, b=80, h=20, x, k;
6    y=y0;
7    printf("t=%f\ty=%f\n", t, y);
8    for (x=a; x<=b-h; x+=h)
9      {k=f(y);
10     y=y+h*k;
11     printf("t=%f\ty=%f\n", x+h, y);
12     }
13     return 0;
14 }

Console Shell
> clang-7 -pthread -lm -o main main.c
> ./main
t=0.000000 y=100.000000
t=20.000000 y=80.000000
t=40.000000 y=64.000000
t=60.000000 y=51.200001
t=80.000000 y=40.959999
>

```

Рис. 4.8. Текст і результат роботи програми, що реалізує метод Ейлера на мові C

Питання до лекції 4

- 1) Що таке диференційне рівняння? В чому полягає рішення диференційного рівняння?
- 2) В чому полягає головна особливість чисельного рішення диференціальних рівнянь першого порядку?
- 3) З якою метою використовується рішення диференціальних рівнянь за допомогою рядів Тейлора?
- 4) Сформулюйте основні особливості рішення за допомогою методу Ейлера.
- 5) Поясніть блок-схему методу Ейлера.

ЛЕКЦІЯ 5. МОДИФІКОВАНИЙ МЕТОД ЕЙЛЕРА. УДОСКОНАЛЕНИЙ МЕТОД ЕЙЛЕРА-КОШИ.

5.1. Модифікований метод Ейлера

На відміну від звичайного метода Ейлера в цьому методі використовується оцінка поведінки інтегральної кривої в наступних точках. Порядок побудови рішення в модифікованому методі Ейлера полягає в наступному.

Через точку $P_i(x_i, y_i)$ (рис. 5.1) проводиться дотична A_1 з тангенсом кута нахилу $k_1=f(x_i, y_i)$ до перетинання з ординатою в точці $x=x_i+h/2$ (по методу Ейлера (4.6)). Одержуємо точку перетинання B з координатами $(x_i+h/2, y_i+h/2 \cdot y_i')$. Вираховуємо тангенс кута нахилу дотичної в цій точці: $k_2= y'_{i+1/2}=f(x_i+h/2, y_i+h/2 \cdot y_i')$. Пряма з таким нахилом, яка проходить через точку B , позначена A_2 . Далі, через точку $P_i(x_i, y_i)$ проводимо пряму A_0 , паралельну A_2 . Перетинання прямої A_0 з ординатою $x=x_{i+1}$ і дає шукану точку $P_{i+1}(x_{i+1}, y_{i+1})$.

Рівняння прямої A_0 можна записати:

$$y_{i+1} = y_i + k_2 \cdot (x_{i+1}-x_i) = y_i + h \cdot f(x_i+h/2, y_i+h/2 \cdot y_i'). \quad (5.1)$$

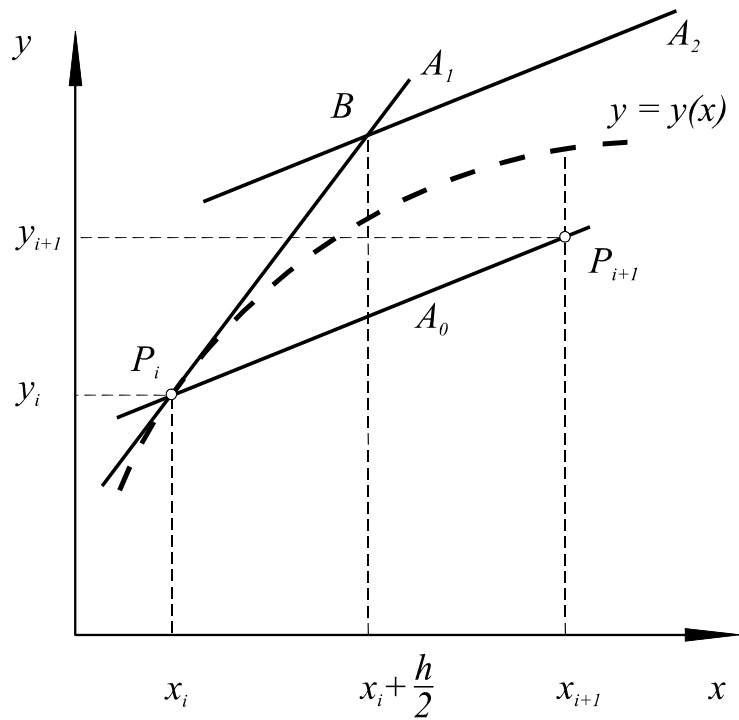


Рис. 5.1 – Графічна ілюстрація модифікованого методу Ейлера

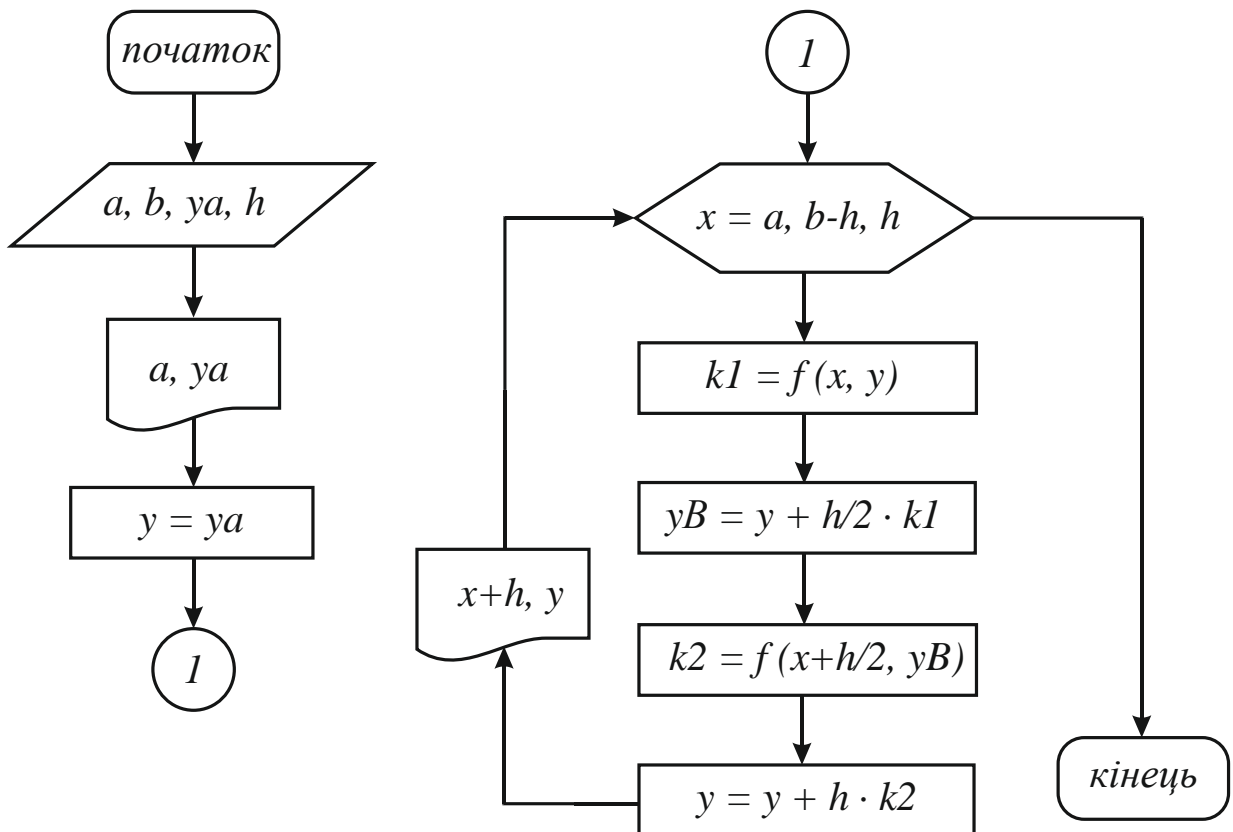


Рис. 5.2 – Блок-схема модифікованого методу Ейлера

В блок схемі: a, b – границі інтервалу; h – шаг інтегрування; a, y_a – точка початкової умови; x – поточне значення вузлової точки інтервалу інтегрування; $k1$ – похідна в поточній точці P_i , yB – значення функції в допоміжній точці B , $k2$

– похідна в допоміжній точці В.

Формула (5.1) описує модифікований метод Ейлера. Інтегрування за модифікованим методом Ейлера міститься у послідовному застосуванні формул (4.6) (при $h=h/2$) і (5.1) до рівняння (4.3), починаючи з $i=1$. Цей метод є більш точним (другий порядок точності), ніж метод Ейлера, який має перший порядок точності.

Блок-схема методу наведена на рис. 5.2.

ПРИКЛАД: Розв'язати модифікованим методом Ейлера рівняння (4.7) з початковою умовою $y_0=100$, на відрізку $[0; 80]$, крок $h=40$.

РОЗВ'ЯЗОК: Формула модифікованого методу Ейлера має загальний вигляд

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i + h/2; y_i + h/2 \cdot f(x_i, y_i))$$

Знайдемо рішення, починаючи з точки ПУ:

$$y'_0 = -k y_0 = -0,01 \cdot 100 = -1$$

$$t = 40: y_{40} = y_0 + h \cdot y'_{20}; \quad y'_{20} = -0,01 \cdot y_{20}; \quad y_{20} = y_0 + h/2 \cdot y';$$

$$y_{20} = 100 + 40/2 \cdot (-1) = 80;$$

$$y'_{20} = -0,01 \cdot 80 = -0,8;$$

$$y_{40} = y_0 + h \cdot y'_{20} = 100 + 40 \cdot (-0,8) = \mathbf{68};$$

$$t = 80: y_{80} = y_{40} + h \cdot y'_{60}; \quad y'_{60} = -0,01 \cdot y_{60}; \quad y_{60} = y_{40} + h/2 \cdot y'_{40};$$

$$y'_{40} = -0,01 \cdot y_{40} = -0,01 \cdot 68 = -0,68;$$

$$y_{60} = 68 + 40/2 \cdot (-0,68) = 54,4;$$

$$y'_{60} = -0,01 \cdot 54,4 = -0,544;$$

$$y_{80} = y_{40} + h \cdot y'_{60} = 68 + 40 \cdot (-0,544) = \mathbf{46,24}.$$

Рішення має вигляд табличній функції:

i	0	1	2
t	0	40	80
y	100	68	46,24

5.2. Метод Ейлера-Коши

В цьому методі також використовується оцінка поведінки інтегральної кривої в подальших точках. Суть метода Ейлера-Коши полягає в наступному (дивись рис. 5.3).

За допомогою метода Ейлера (4.6) відшукується точка $A(x_{i+h}, y_i + hy'_i)$. Для чого в точці $D(x_i, y_i)$ проводимо дотичну L_1 до перетинання з ординатою, яка відновлену в точці $x_{i+1}=x_i+h$. В точці A знову обчислюється тангенс кута нахилу дотичної і проводиться дотична L_2 . В точці A проводимо пряму \bar{L} , тангенс кута нахилу якої є середнє арифметичне тангенсів кутів нахилу дотичних L_1 і L_2 . Через точку $D(x_i, y_i)$ проводимо пряму L , паралельну \bar{L} . Точка, в котрій пряма перетне ординату, відновлену в точці $x_{i+1}=x_i+h$ і буде шуканою точкою в (x_{i+1}, y_{i+1}) . Формула метода Ейлера-Коши має наступний вигляд:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + h \cdot y_i')}{2}. \quad (5.2)$$

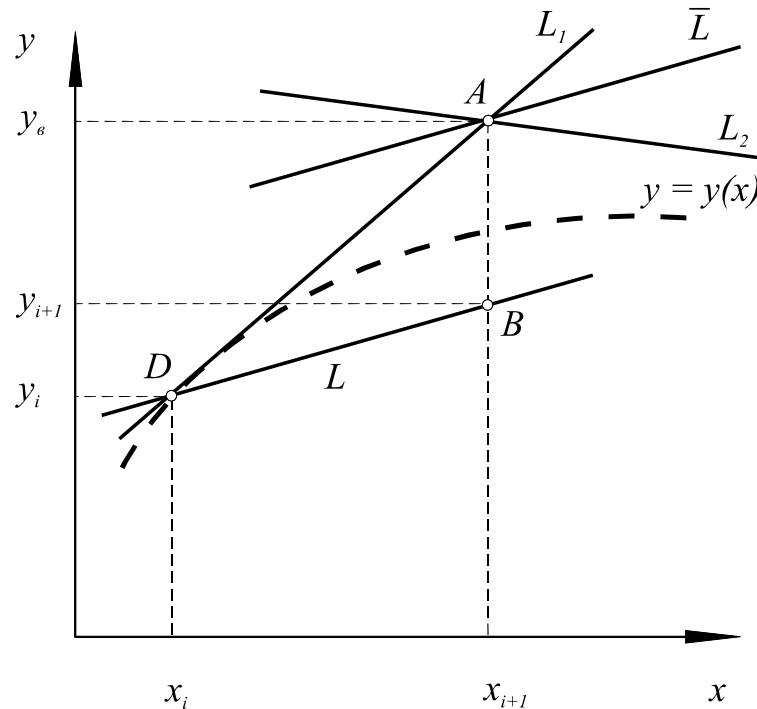


Рис. 5.3 – Графічна ілюстрація методу Ейлера-Коши

Інтегрування по методу Ейлера-Коши полягає в послідовному застосуванні формул (4.6) і (5.2), починаючи з $i=1$. Спочатку, по (4.6) обчислюють приблизні значення y_6 . Потім, визначивши y_6 , по (5.2) обчислюють шукане y_{i+1} . Даний метод, також як і модифікований метод Ейлера, має другий порядок точності. Блок-схема методу наведена на рис. 5.4.

ПРИКЛАД. Користуючись методом Ейлера-Коши, розв'язати рівняння (4.7) з початковою умовою $y_0=100$, на відрізку $[0; 80]$, крок $h=20$.

РОЗВ'ЯЗОК. Формула методу Ейлера-Коші в загальному вигляді:

$$y_{i+1} = y_i + (h/2) \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_i + h; y_i + h \cdot f(x_i, y_i))]$$

На практиці формулу використовують наступним чином:

А) $y_{i+1}^* = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$ – спочатку обчислюється наближене рішення;

Б) $y_{i+1} = y_i + (h/2) \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}; y_{i+1}^*)]$

$$y'_0 = -k y_0 = -0,01 \cdot 100 = -1$$

$$t = 20: y_1^* = y_0 + h \cdot y'_0 = 100 + 20 \cdot (-1) = 80; (y_1^*)' = -0,8;$$

$$y_1 = y_0 + (h/2) \cdot [y'_0 + (y_1^*)'] = 100 + 10 \cdot [-1 - 0,8] = 82;$$

$$y'_1 = -0,82;$$

$$t = 40: y_2^* = y_1 + h \cdot y'_1 = 82 + 20 \cdot (-0,82) = 65,6; (y_2^*)' = -0,656;$$

$$y_2 = y_1 + (h/2) \cdot [y'_1 + (y_2^*)'] = 82 + 10 \cdot [-0,82 - 0,656] = 67,24;$$

$$y'_2 = -0,672;$$

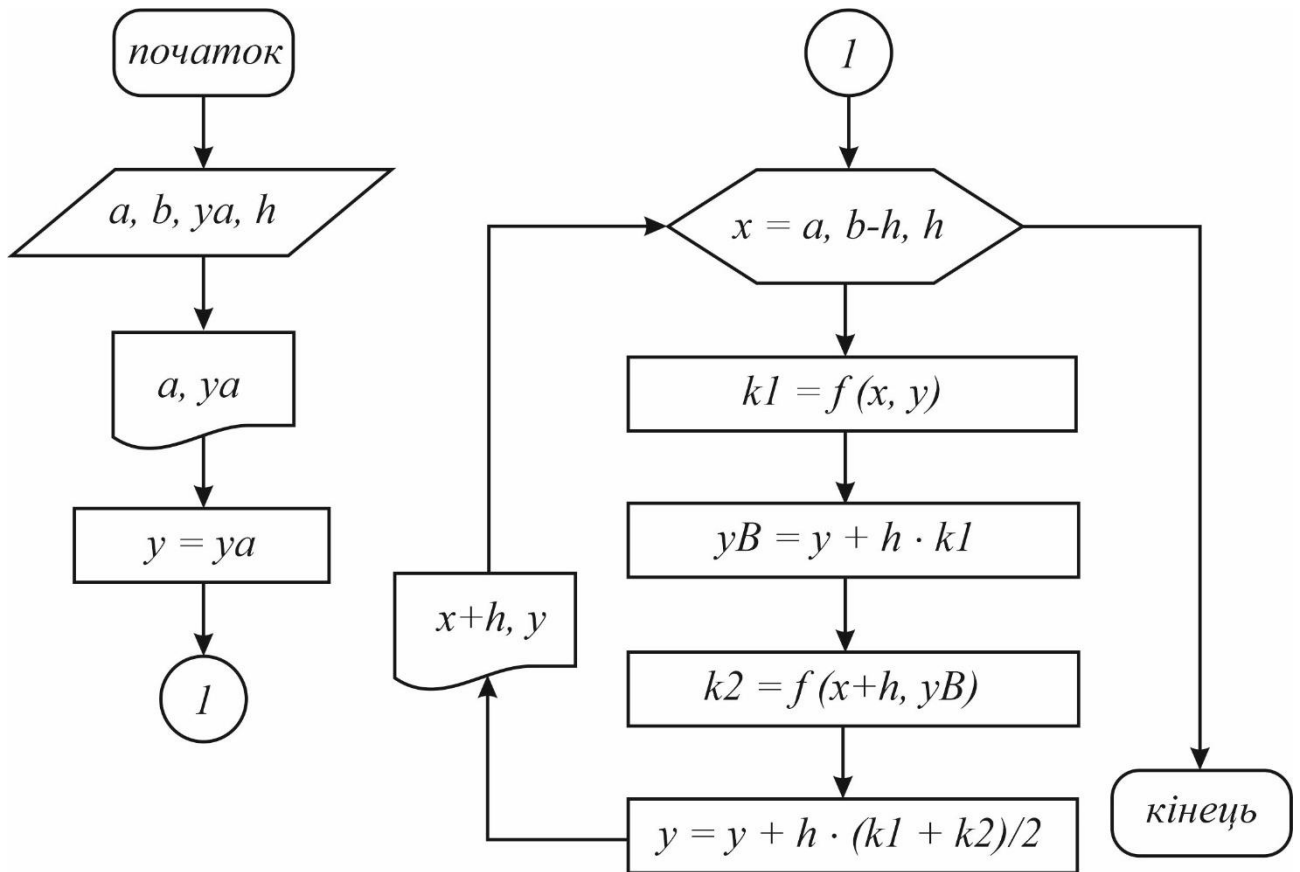


Рис. 5.4 – Блок-схема методу Ейлера-Коши

В блок схемі: a, b – границі інтервалу; h – шаг інтегрування; a, y_a – точка початкової умови; x – поточне значення вузлової точки інтервалу інтегрування; k_1 – похідна в поточній точці D , y_B – значення функції в допоміжній точці A , k_2 – похідна в допоміжній точці A .

$$t = 60: y_3^* = y_2 + h \cdot y_2' = 67,24 + 20 \cdot (-0,672) = 53,79; (y_3^*)' = -0,538;$$

$$y_3 = y_2 + (h/2) [y_2' + (y_3^*)'] = 67,24 + 10 \cdot [-0,672 - 0,538] = \mathbf{55,14};$$

$$y_3' = -0,551;$$

$$t = 80: y_4^* = y_3 + h \cdot y_3' = 55,14 + 20 \cdot (-0,551) = 44,12; (y_4^*)' = -0,441;$$

$$y_4 = y_3 + (h/2) [y_3' + (y_4^*)'] = 55,14 + 10 \cdot [-0,551 - 0,441] = \mathbf{45,21}.$$

Рішення у вигляді табличній функції

i	0	1	2	3	4
t	0	20	40	60	80
y	100	82	67,24	55,14	45,21

Для прикладу наведемо точне рішення задачі.

$$\frac{dy}{dt} = -ky; \quad \frac{dy}{y} = -k \cdot dt;$$

$$\int_{y_0}^y \frac{dy}{y} = \int_0^t -k \cdot dt;$$

$$\ln y - \ln y_0 = -k t;$$

$$y = e^{\ln y_0 - kt};$$

$$t_0=0; y_0=100; k = -0,01; t = 80 \text{ c};$$

$$y = e^{\ln 100 - 0,8} = e^{3,805} = 44,933$$

Точне рішення у вигляді табличної функції

<i>i</i>	0	1	2	3	4
<i>t</i>	0	20	40	60	80
<i>y</i>	100	81,873	67,032	54,881	44,933

Питання до лекції 5

- 1) Сформулюйте основні особливості рішення за допомогою модифікованого методу Ейлера.
- 2) Поясніть блок-схему модифікованого методу Ейлера.
- 3) Рішення диференційного рівняння за допомогою методу Ейлера-Коши.
- 4) Поясніть блок-схему методу Ейлера-Коши.
- 5) Порядок точності методів Ейлера-Коши та модифікованого методу Ейлера.

ЛЕКЦІЯ 6. МЕТОД РУНГЕ-КУТИ. УДОСКОНАЛЕНИЙ МЕТОД ЕЙЛЕРА-КОШИ З НАСТУПНОЮ ІТЕРАЦІЙНОЮ ОБРОБКОЮ (МЕТОД ПРОГНОЗУ ТА КОРЕКЦІЇ)

6.1. Методи Рунге-Кутти

Найбільш поширеними у практиці інтегрування звичайних диференційних рівнянь є методи Рунге-Кутти різноманітного порядку точності. Перевагою цих методів є те, що при їх використуванні не треба обчислювати похідні вище першого порядку, а їх головний недолік – значний об'єм обчислень на кожному кроці.

До методів Рунге-Кута відносяться метод Ейлера – метод Рунге-Кутти першого порядку точності; модифікований метод Ейлера і метод Ейлера-Коши – методи Рунге-Кутти другого порядку.

Метод Рунге-Кутти четвертого порядку точності – один із найуживаніших методів інтегрування диференційних рівнянь. Взагалі його називають просто "методом Рунге-Кутти". Цей метод описується системою п'яти рівнянь:

$$y_{i+1} = y_i + h/6 \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4), \quad (6.1)$$

де

$$k_1 = f(x_i, y_i), \quad (6.2)$$

$$k_2 = f(x_i + h/2, y_i + h \cdot k_1/2), \quad (6.3)$$

$$k_3 = f(x_i + h/2, y_i + h \cdot k_2/2), \quad (6.4)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + h \cdot k_3). \quad (6.5)$$

Інтегрування по методу Рунге-Кутта полягає в наступному. Для кожної i -ої точки ($i=1, 2, \dots, n-1$) по (6.2)–(6.5) обчислюються значення k_j ($j = 1, 2, 3, 4$). Потім по (6.1) послідовно визначаються значення y_i ($i=1, 2, \dots, n$).

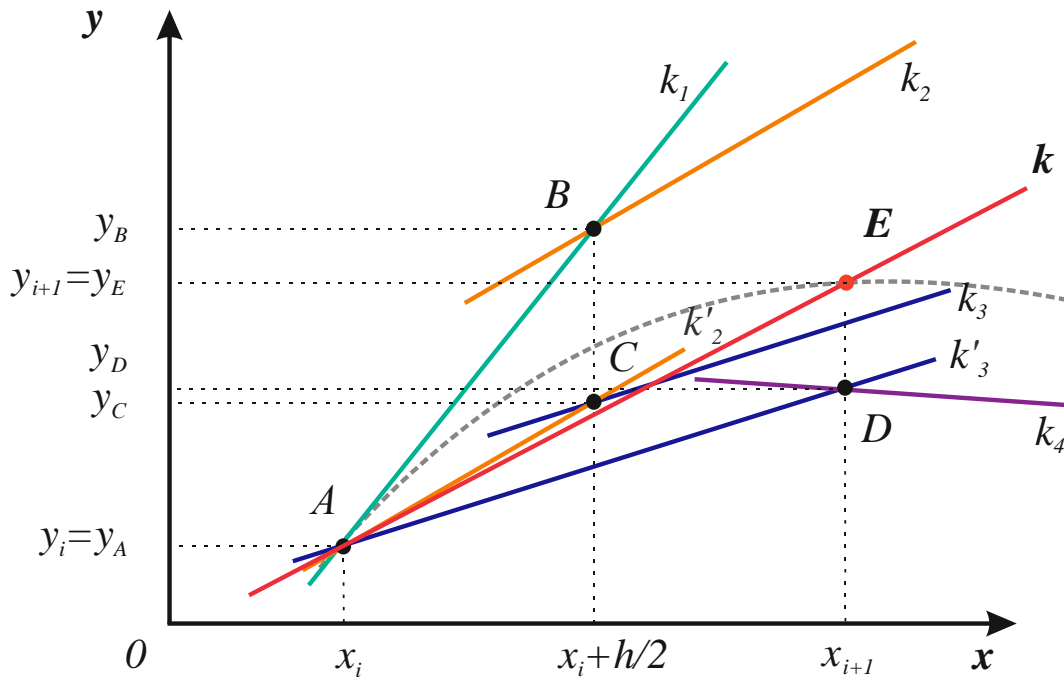


Рис. 6.1 – Графічна ілюстрація методу Рунге-Кутти.

Порядок побудови рішення полягає в наступному (рис. 6.1).

1. Через точку $A(x_i, y_i)$ проводиться дотична k_1 з тангенсом кута нахилу $k_1 = y'_i = f(x_i, y_i)$ (6.2) до перетину з ординатою в точці $x = x_i + h/2$. Отримуємо точку перетину B з координатами $(x_i + h/2; y_B)$ або $(x_i + h; y_i + h/2 \cdot f(x_i, y_i))$.

2. У точці B обчислюємо похідну k_2 , а так само тангенс кута нахилу нової дотичній k_2 в цій точці (6.3):

$$k_2 = y'_B = f(x_i + h/2; y_i + h/2 \cdot k_1)$$

3. Через точку $A(x_i, y_i)$ проводимо пряму k'_2 , паралельну k_2 до перетину з $x = x_i + h/2$. Отримуємо точку перетину C з координатами $(x_i + h/2; y_C)$ або $(x_i + h/2; y_i + h/2 \cdot k_2)$.

4. У точці C обчислюємо похідну k_3 , і проводимо ще одну дотичну (6.4):

$$k_3 = y'_C = f(x_i + h/2; y_i + h/2 \cdot k_2)$$

5. Через точку $A(x_i, y_i)$ проводимо пряму k'_3 , паралельну k_3 до перетину з $x = x_i + h$. Отримуємо точку перетину D з координатами $(x_i + h; y_D)$ або $(x_i + h; y_i + h \cdot k_3)$.

6. У точці D обчислюємо похідну k_4 , і проводимо ще одну дотичну (6.5):

$$k_4 = y'_D = f(x_i + h; y_i + h \cdot k_3)$$

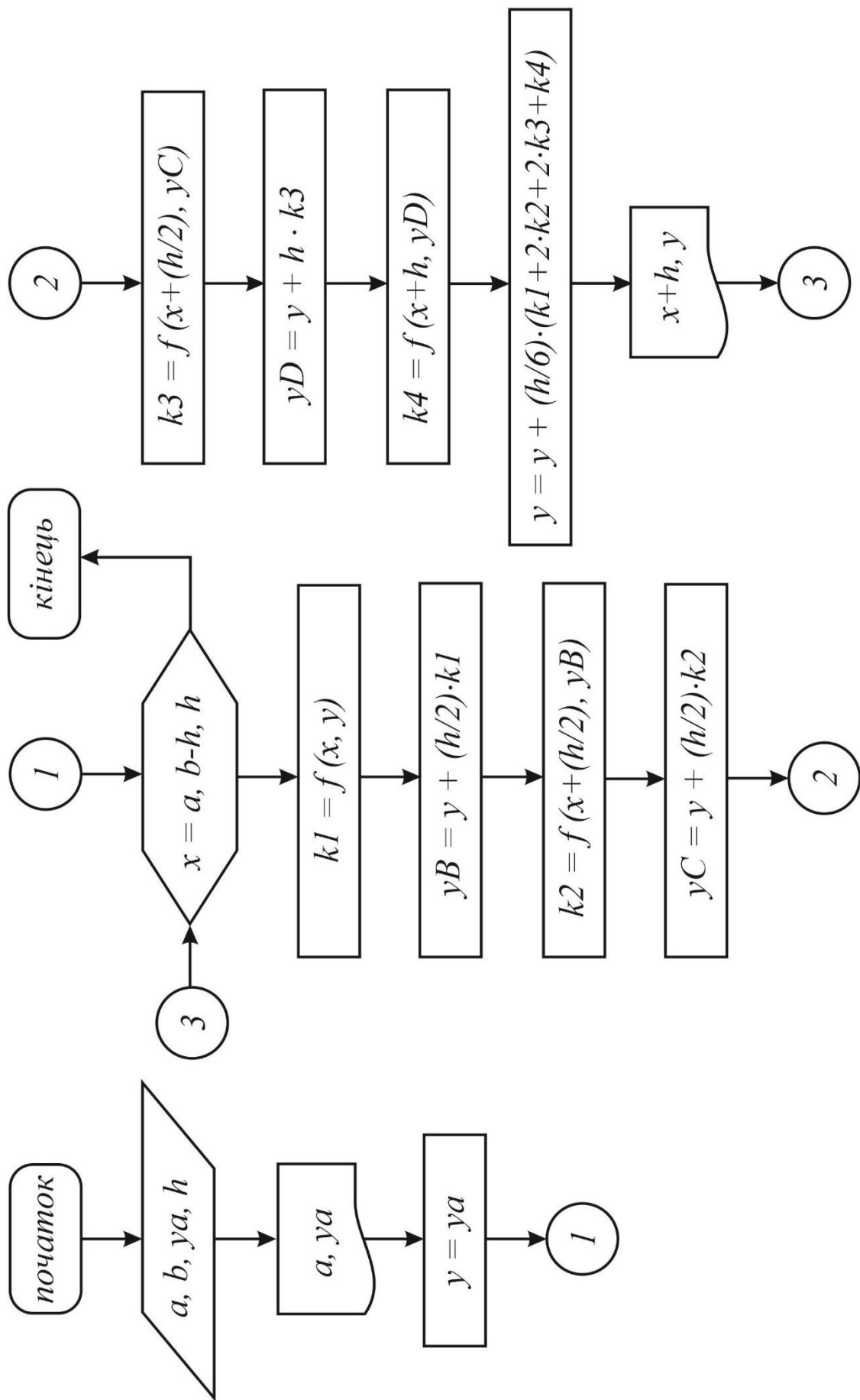


Рис. 6.2 –Блок-схема методу Рунге-Кутти

7. Через точку A проводимо результуючу пряму k , що усереднює 4 дотичні до перетину з $x=x_i+h$, тобто ординатою, відновленою на цілому кроці. Підсумок: отримуємо остаточне рішення у вигляді точки E координатами $(x_{i+1}; y_E)$ або $(x_{i+1}; y_{i+1})$ яке обчислено за зведеної формулою методу (6.1):

$$y_{i+1} = y_i + (h/6) \cdot [k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4]$$

Блок-схема методу наведена на рис. 6.2.

6.2 Удосконалений метод Ейлера-Коши з наступною ітераційною обробкою (метод прогнозу та корекції)

Відмінною рисою методів Рунге-Кута є те, що при обчислюванні наступної точки (x_{i+1}, y_{i+1}) використовується інформація тільки про точки (x_i, y_i) . У методах другого порядку і вище доводиться обчислювати значення функції в одній чи кількох проміжних точках. Це не завжди раціонально, оскільки, якщо процес інтегрування вже просунувся на декілька кроків, то маємо ту додаткову інформацію (про попередні точки рішення), для використання якої не потрібно обчислювати значення функції.

Методи прогнозу та корекції відрізняються тією властивістю, що за їх допомогою неможливо почати рішення диференційного рівняння, тому що в них необхідно використовувати інформацію про попередні точки рішення. Для початку рішення рівняння, маючи тільки одну точку, визначену початковою умовою, необхідно використовувати метод типу Рунге-Кута.

З назви метода зрозуміло, що спочатку «передбачається» значення $y^{(0)}_{i+1}$, а потім використовується той чи інший метод для «корегування» отриманого значення. Звичайно, після цього можна використовувати ту ж саму формулу для повторного корегування значення y_{i+1} . Цей ітераційний процес можна повторювати скільки завгодно разів, але з точки зору ефективності доцільно зменшувати число ітерацій, вибираючи відповідний крок інтегрування.

Для прогнозу значення y_{i+1} можна використовувати різні формули. Формула другого порядку точності має вигляд:

$$y^{(0)}_{i+1} = y_{i-1} + 2 \cdot h \cdot f(x_i, y_i), \quad (6.6)$$

де верхній індекс (0) означає первісне наближення до y_{i+1} , тобто передбачене значення.

З (6.6) видно, що за її допомогою неможливо обчислити y_i . Тому для обчислення y_i використовується метод Рунге-Кута. Всі наступні точки будуть обчислюватись з використанням інформації про попередні точки рішення без додаткових обчислень значення функції. Це дозволяє класифікувати методи прогнозу та корекції як багатоступінчаті методи рішення диференціальних рівнянь.

Алгоритм рішення рівняння методом прогнозу та корекції наступний. По виразу (6.6) обчислюється значення $y^{(0)}_{i+1}$, що передбачається. Геометрично прогноз зводиться до того, що знаходиться кут нахилу дотичної в точці (x_i, y_i) (пряма L_1 на рис. 6.3). Після цього через точку (x_{i-1}, y_{i-1}) проводиться пряма L'_1 ,

паралельна L_1 . Передбачене значення y_{i+1} буде розташоване там, де пряма L'_1 перетне ординату $x=x_{i+1}$ (точка F).

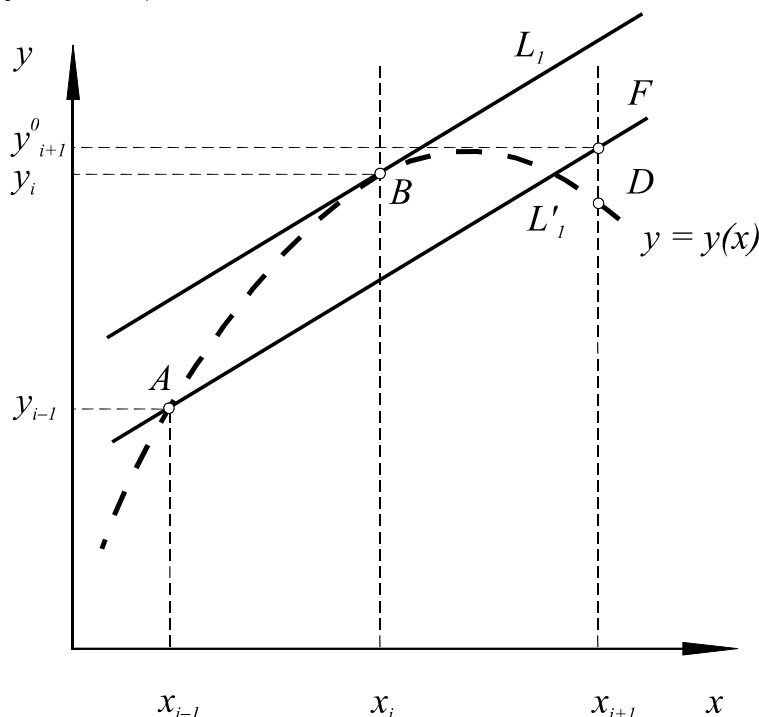


Рис. 6.3 – Графічна ілюстрація методу прогнозу та корекції. Стадія прогнозу

Тепер потребується деякий метод корекції передбаченого значення. Виходячи з того, що величина $y^{(0)}_{i+1}$ відома, можна обчислити нахил дотичної в точці (x_{i+1}, y_{i+1}) . Ця дотична відображена на рис. 6.4 і позначена L_2 . Пряма L'_1 на рис. 6.4 становить собою те ж саме, що й на рис. 6.3, і усереднюючи тангенси кутів нахилу ліній L'_1 і L_2 , отримуємо лінію \bar{L} . Через точку (x_i, y_i) проводимо пряму L , паралельну \bar{L} . Точка перетинання цієї лінії з ординатою $x=x_{i+1}$ дає нове наближення до y_{i+1} (точка P).

Назвемо це наближення скоректованим значенням $y^{(1)}_{i+1}$. Обчислити це скоректоване значення можливо по формулі:

$$y^{(1)}_{i+1} = y_i + h/2 \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y^{(0)}_{i+1})]. \quad (6.7)$$

Можна знайти нове, можливо, ще найкраще наближення до y_{i+1} , використовуючи знайдене значення $y^{(1)}_{i+1}$ і корегуючи знов. В загальному випадку, k -те наближення до y_{i+1} обчислюється по формулі:

$$y^{(k)}_{i+1} = y_i + h/2 \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y^{(k-1)}_{i+1})], \quad (6.8)$$

для $k=1, 2, 3, \dots$

Ітераційний процес завершується, коли

$$|y^{(k+1)}_{i+1} - y^{(k)}_{i+1}| < \varepsilon \quad (6.9)$$

Обираючи шаг для методу прогнозу та корекції необхідно користуватися таким емпіричним правилом: мінімальний об'єм обчислень досягається при числі ітерацій, що дорівнює 2. Іншими словами, крок інтегрування потрібно вибирати так, щоб умова (6.9) виконувалась після двох ітерацій. При більшому числі

ітерацій крок h необхідно зменшувати, в іншому випадку він може бути збільшений.

Блок-схема методу прогнозу і корекції приведена на рис. 6.5.

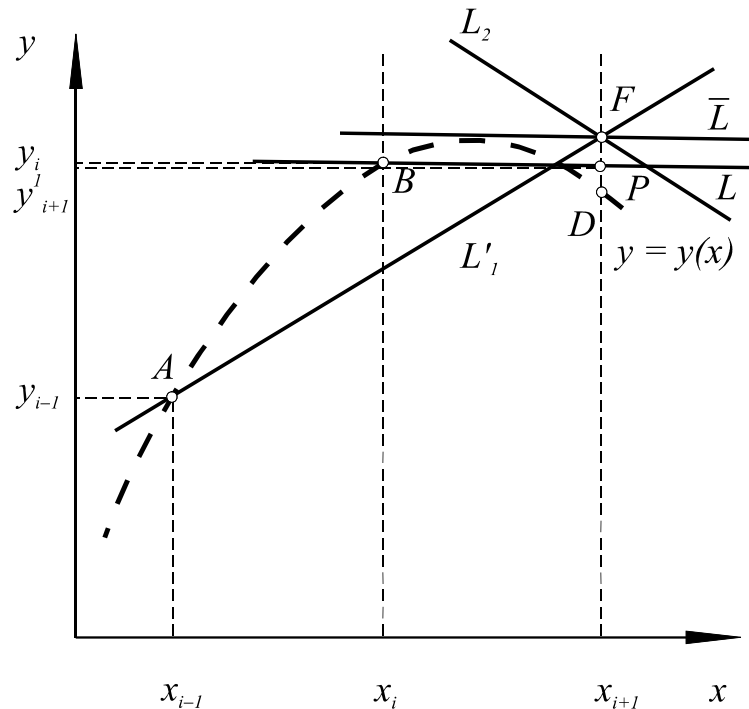


Рис. 6.4 – Графічна ілюстрація методу прогнозу та корекції. Стадія корекції

ПРИКЛАД. Використовуючи метод прогнозу та корекції, знайти з точністю $\varepsilon=0,02$ рішення $y=y(x)$ диференційного рівняння (4.7)

$$dy/dt = y' = -0,01y$$

з початковою умовою $y_0=100$, на відрізку $[0; 80]$, крок $h=20$.

РОЗВ'ЯЗОК. Формула прогнозу в загальному вигляді:

$$y^{(0)}_{i+1} = y_{i-1} + 2 \cdot h \cdot f(x_i, y_i).$$

Для нашої задачі буде виглядати наступним чином:

$$y^{(0)}_{40} = y_0 + 2 \cdot h \cdot f(x_{20}, y_{20}).$$

Тобто потрібна ще одна точка y_{20} , крім точки початкової умови, яку ми отримаємо за допомогою методу Ейлера-Коши (приклад попередньої лекції):

$$y'_0 = -k y_0 = -0,01 \cdot 100 = -1$$

$$t = 20: y^*_{20} = y_0 + h \cdot y'_0 = 100 + 20 \cdot (-1) = 80; (y^*_{20})' = -0,8;$$

$$y_{20} = y_0 + (h/2) \cdot [y'_0 + (y^*_{20})'] = 100 + 10 \cdot [-1 - 0,8] = 82;$$

$$y'_{20} = -0,82;$$

$$t = 40: y^{(0)}_{40} = y_0 + 2 \cdot h \cdot y'_{20} = 100 + 2 \cdot 20 \cdot -0,82 = 67,2$$

Після отримання прогнозованого значення для його корегування використаємо формулу (6.8)

$$y^{(k)}_{i+1} = y_i + h/2 \cdot [(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y^{(k-1)}_{i+1}))]$$

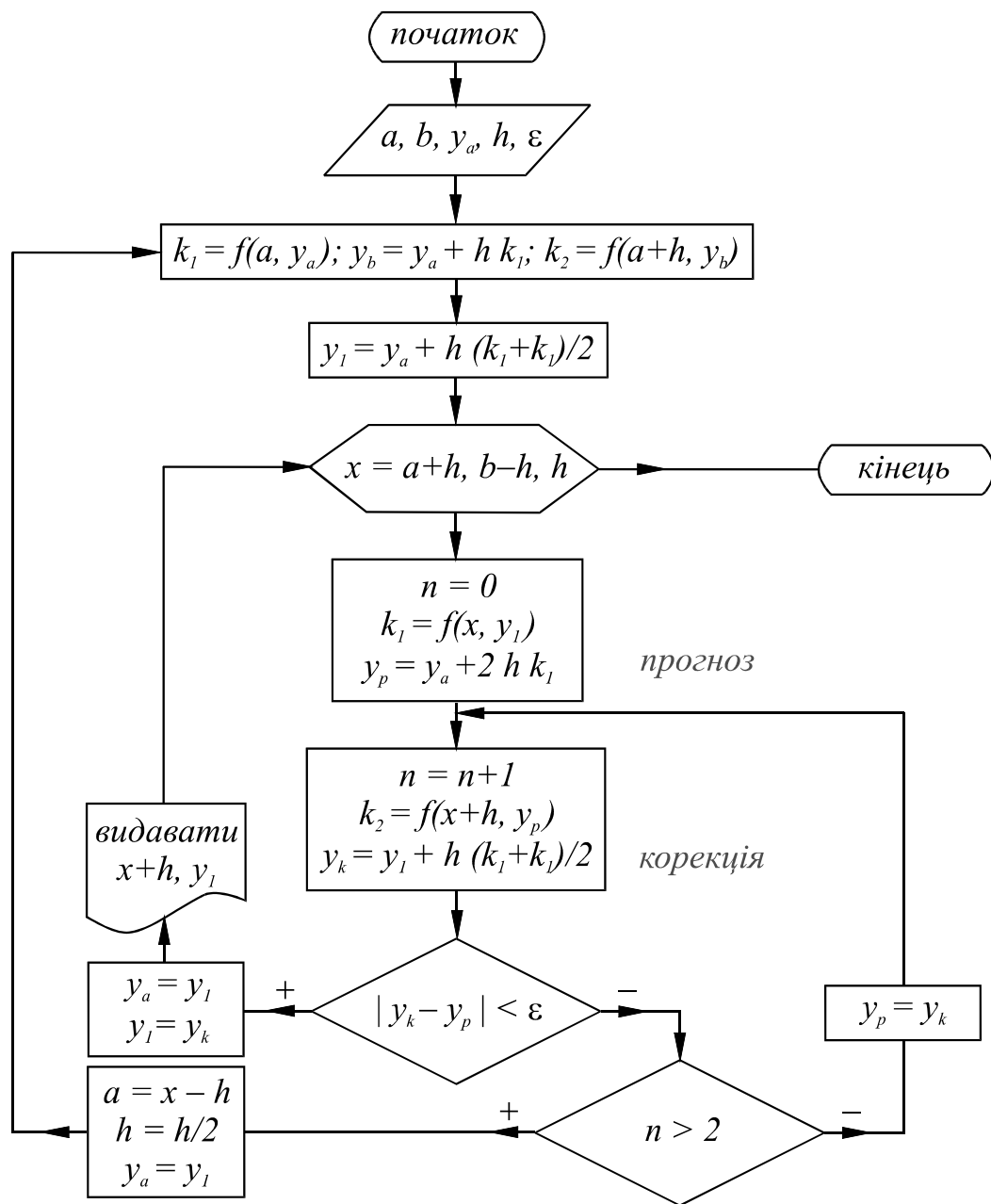


Рис. 6.5 – Блок-схема методу прогнозу і корекції

В нашому випадку вона буде виглядати наступним чином:

$$y^{(1)}_{40} = y_{20} + h/2 \cdot [y'_{20} + y'^{(0)}_{40}]$$

$$y'_{20} = -0,82; y'^{(0)}_{40} = -0,672.$$

$$y^{(1)}_{40} = 82 + 20/2 \cdot [-0,82 + (-0,672)] = \mathbf{67,08}$$

Ітераційний процес завершується, коли буде виконуватись умова:

$$|y^{(k+1)}_{i+1} - y^{(k)}_{i+1}| < \varepsilon$$

Для нашого прикладу

$$|y^{(1)}_{40} - y^{(0)}_{40}| < 0,02$$

$$|67,08 - 67,2| > 0,02$$

Умова не виконується, тому відшукаємо наступне скореговане значення:

$$y^{(2)}_{40} = y_{20} + h/2 \cdot [y'_{20} + y'^{(1)}_{40}]$$

$$y'^{(1)}_{40} = -0,6708$$

$$y^{(2)}_{40} = 82 + 20/2 \cdot [-0,82 + (-0,6708)] = 67,092$$

$$|67,092 - 67,08| < 0,02$$

Остаточне рішення у вигляді табличній функції

<i>i</i>	0	1	2			3			4		
<i>t</i>	0	20	40			60			80		
прогноз/ корекція			(0)	(1)	(2)	(0)	(1)	(2)	(0)	(1)	(2)
<i>y</i>	100	82	67,2	67,08	67,092	55,163	54,866	54,896	45,133	44,893	44,917

Питання до лекції 6

- 1) Сформулюйте основні особливості рішення за допомогою методу Рунге-Кути. Порядок точності методу.
- 2) Поясніть блок-схему методу Рунге-Кути.
- 3) Рішення диференційного рівняння за допомогою методу прогнозу та корекції.
- 4) Поясніть блок-схему методу прогнозу та корекції.

ЛЕКЦІЯ 7. НАБЛИЖЕНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЛІНІЙНОЇ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. МЕТОД СКІНЧЕННИХ РІЗНИЦЬ. МЕТОД ПРОГОНКИ

7.1. Постановка задачі

Нехай дано лінійне диференційне рівняння (ЛДР) другого порядку

$$y'' + p(x)y' + g(x)y = f(x), \quad (7.1)$$

де $p(x)$, $g(x)$, $f(x)$ – відомі неперервні на відрізку $[a, b]$ функції.

Лінійна крайова задача для рівняння (7.1) полягає в знаходженні функції $y = y(x)$, яка всередині відрізка $[a, b]$ задовольняє рівнянню (7.1), а на його кінцях – лінійним крайовим умовам.

$$\begin{aligned} \alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a) &= A \\ \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) &= B, \end{aligned} \quad (7.2)$$

де α_0 , α_1 , β_0 , β_1 – задані сталі, причому α_0 , α_1 , β_0 , β_1 не дорівнюють одночасно нулю ($|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0$; $|\beta_0| + |\beta_1| \neq 0$).

Якщо $A = B = 0$, то крайові умови (7.2) називаються *однорідними*.

Лінійна крайова задача називається *однорідною*, якщо однорідним є диференційне рівняння (7.1) ($f(x)=0$) і крайові умови (7.2).

У протилежному разі крайова задача (7.1), (7.2) називається *неоднорідною*. Оскільки умови (7.2) повинні виконуватись в двох точках – на кінцях інтервалу $[a, b]$, їх називають *двоточковими крайовими умовами*, а крайову задачу –

двоточковою крайовою задачею.

Точний розв'язок крайової задачі можливий у рідких випадках. Тому на практиці часто використовують наближені методи рішення, котрі можна поділити на дві групи: а) *аналітичні*; б) *різницеві*.

Розглянемо один із різницьових методів – *метод скінченних різниць*.

7.2. Метод скінченних різниць

Одним з найпростіших методів розв'язання лінійної крайової задачі (7.1–7.2) є зведення її до системи скінченнорізницьових рівнянь.

Розіб'ємо відрізок $[a, b]$ на n рівних частин довжиною h (крок), де

$$h = \frac{b - a}{n}$$

Позначимо точки поділу відрізка $[a, b]$

$$\begin{aligned} x_0 &= a; \quad x_n = b; \quad x_i = x_0 + ih \quad (i = 1, 2, \dots, n-1); \\ p_i &= p(x_i); \quad q_i = q(x_i); \quad f_i = f(x_i); \quad y_i = y(x_i); \\ y'_i &= y'(x_i); \quad y''_i = y''(x_i). \end{aligned}$$

Замінімо наближено в кожній внутрішній точці x_i відрізка $[a, b]$ похідні $y'(x_i)$ та $y''(x_i)$ скінченнорізницьовими відношеннями.

$$\begin{aligned} y'_i &= \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \\ y''_i &= \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2}, \quad (i = 1, 2, \dots, n-1). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Для межових точок $x_0 = a$ і $x_n = b$ візьмемо:

$$\begin{aligned} y'_0 &= \frac{y_1 - y_0}{h} \\ y'_n &= \frac{y_n - y_{n-1}}{h} \end{aligned} \quad (7.4)$$

Використовуючи формули (7.3) і (7.4), приблизно замінімо рівняння (7.1) і крайові умови (7.2) системою $n+1$ лінійних алгебричних рівнянь з $n+1$ невідомими $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$, які являють собою значення шуканої функції $y = y(x)$ в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$:

$$\begin{aligned} \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + q_i y_i &= f_i, \\ (i = 1, 2, \dots, n-2); \\ \alpha_0 y_0 + \alpha_1 \frac{y_1 - y_0}{h} &= A, \\ \beta_0 y_n + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} &= B. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Розв'язавши цю систему, якщо це можливо, одержимо таблицю наближених значень шуканої функції $y = y(x)$.

На практиці часто похідні $y'(x_i)$ та $y''(x_i)$ у внутрішніх точках x_i відрізка $[a, b]$ заміняють центрально-різницевими відношеннями:

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

$$y''_i = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$
(7.6)

а для межових точок $x_0=a$ і $x_n=b$ як і раніше слушні також формули (7.4). Тоді система рівнянь для визначення $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ набуває вигляду:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i,$$

$$(i = 1, 2, \dots, n-1);$$

$$\alpha_0 y_0 + \alpha_1 \frac{y_1 - y_0}{h} = A,$$

$$\beta_0 y_n + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B.$$
(7.7)

Для оцінки похибки методу скінченних різниць на практиці зазвичай використовують таку наближену нерівність:

$$|y_i^* - y(x_i)| \approx \frac{1}{3} |y_i^* - y_i|$$
(7.8)

де $y(x_i)$ – значення точного розв'язку крайової задачі в точці $x=x_i$; y_i – значення наближеного розв'язку, обчисленого в точці $x=x_i$ з кроком h ; y_i^* – значення наближеного розв'язку, обчисленого в точці $x=x_i$ з кроком $h/2$.

Щоб знайти наближений розв'язок крайової задачі із заданою точністю ε , потрібно обчислити з кроком h і $h/2$ і порівняти отримані результати. Якщо $|y_i^* - y_i| < 3\varepsilon$, то, отже, $|y_i^* - y(x_i)| < \varepsilon$ і значення y_i^* ($i=1, 2, \dots, n$) можна взяти за шуканий розв'язок крайової задачі.

7.3. Метод прогонки

За великого n безпосередній розв'язок систем (7.5) або (7.7) стає досить громіздким. Розглянемо метод, розроблений спеціально для розв'язування таких систем, який дістав назву *методу прогонки*.

Нехай маємо систему (7.5). Розглянемо перші $n-1$ рівняння:

$$\frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + q_i y_i = f_i,$$

$$(i = 1, 2, \dots, n-2);$$

Після найпростіших перетворень одержимо

$$y_{i+2} + (-2 + hp_i)y_{i+1} + (1 - hp_i + h^2 q_i)y_i = h^2 f_i,$$
(7.9)

Увівши позначення:

$$m_i = -2 + hp_i; \quad k_i = 1 - hp_i + h^2 q_i;$$

$$(i = 1, 2, \dots, n-2);$$
(7.10)

запишемо (7.9) у вигляді

$$y_{i+2} + m_i y_{i+1} + k_i y_i = h^2 f_i.$$
(7.11)

Розв'язуючи (7.11) відносно y_{i+1} , отримаємо:

$$y_{i+1} = \frac{h^2}{m_i} f_i - \frac{1}{m_i} y_{i+2} - \frac{k_i}{m_i} y_i.$$
(7.12)

Неважко переконатись в тому, що виключивши y_i з рівняння (7.12) за допомогою крайових умов системи (7.5), одержимо це рівняння у вигляді:

$$y_{i+1} = c_i(d_i - y_{i+2}), \quad (i = 1, 2, \dots, n-2), \quad (7.13)$$

де c_i, d_i – деякі коефіцієнти.

Нехай, наприклад $i=0$, тоді рівняння (7.12) матиме вигляд

$$y_1 = \frac{h^2}{m_0} f_0 - \frac{1}{m_0} y_2 - \frac{k_0}{m_0} y_0. \quad (7.14)$$

Знайдемо із крайової умови

$$\begin{aligned} \alpha_0 y_0 + \alpha_1 \frac{y_1 - y_0}{h} &= A \\ y_0 &= \frac{Ah}{\alpha_0 h - \alpha_1} - \frac{\alpha_1}{\alpha_0 h - \alpha_1} y_1 \end{aligned}$$

і підставимо цей вираз у (7.14). Після перетворень одержимо:

$$y_1 = \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1} \left[\left(\frac{k_0 Ah}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0 \right) - y_2 \right].$$

Позначимо

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1}, \\ d_0 &= \frac{k_0 Ah}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0 \end{aligned} \quad (7.15)$$

На підставі (7.13) запишемо:

$$y_i = c_{i-1}(d_{i-1} - y_{i+1}).$$

Підставимо цей вираз у рівняння (7.11), одержимо

$$y_{i+2} + m_i y_{i+1} + k_i c_{i-1}(d_{i-1} - y_{i+1}) = h^2 f_i,$$

звідки

$$y_{i+1} = \frac{(h^2 f_i - k_i c_{i-1} d_{i-1}) - y_{i+2}}{m_i - k_i c_{i-1}} \quad (7.16)$$

Порівнюючи (7.13) і (7.16), одержимо для визначення c_i, d_i (прогончні коефіцієнти) рекурентні формули:

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{1}{m_i - k_i c_{i-1}}; \quad d_i = h^2 f_i - k_i c_{i-1} d_{i-1}; \\ &(i = 1, 2, \dots, n-2). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Метод прогонки складається з двох етапів: прямого і зворотного ходу.

На підставі формул (7.15) визначаємо коефіцієнти c_0, d_0 , потім послідовно застосовуючи рекурентні формули (7.17), одержимо значення c_i, d_i ($i = 1, 2, \dots, n-2$) (прямий хід).

Зворотній хід починається з визначення y_n . Використовуючи другу

крайову умову системи (7.5) і формулу (7.13) при $i = n-2$, запишемо систему двох рівнянь:

$$\begin{aligned} \beta_0 y_n + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} &= B. \\ y_{n-1} &= c_{n-2}(d_{n-2} - y_n). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Розв'язавши цю систему відносно y_n , одержимо

$$y_n = \frac{\beta_1 c_{n-2} d_{n-2} + B h}{\beta_1 (1 + c_{n-2}) + \beta_0 h} \quad (7.19)$$

Підставивши в цю формулу вже знайдені прямим ходом значення c_{n-2}, d_{n-2} , визначимо y_n . Потім обчислимо $y_{n-1}, y_{n-2} \dots y_1$, послідовно застосовуючи рекурентну формулу (7.13):

$$\begin{aligned} y_{n-1} &= c_{n-2}(d_{n-2} - y_n); \\ y_{n-2} &= c_{n-3}(d_{n-3} - y_{n-1}); \\ &\dots\dots\dots \\ y_1 &= c_0(d_0 - y_2) \end{aligned} \quad (7.20)$$

Значення y_0 знаходимо за формулою

$$y_0 = \frac{\alpha_1 y_1 - A h}{\alpha_1 - \alpha_0 h}$$

одержаної з першої крайової умови системи (7.5).

Обчислення зручно розташовувати у вигляді таблиці (табл. 7.1).

Таблиця 7.1 – Схема методу прогонки

i	x_i	m_i	k_i	f_i	Прямий	Зворотний хід	
					хід	d_i	y_i
0	x_0	m_0	k_0	f_0	c_0	d_0	y_0
1	x_1	m_1	k_1	f_1	c_1	d_1	y_1
2	x_2	m_2	k_2	f_2	c_2	d_2	y_2
...
$n-2$	x_{n-2}	m_{n-2}	k_{n-2}	f_{n-2}	c_{n-2}	d_{n-2}	y_{n-2}
$n-1$	x_{n-1}						y_{n-1}
n	x_n						y_n

Однією з переваг методу прогонки є те, що помилки округлення не зумовлюють необмеженого зростання похибки розв'язання.

ПРИКЛАД. Методом скінченних різниць знайти розв'язок крайової задачі з точністю $\varepsilon = 0,001$:

$$\begin{cases} y'' + 2xy' - y = 4 \\ y(1,2) = 0,8 \\ y(1,5) + y'(1,5) = 3 \end{cases}$$

РОЗВ'ЯЗОК. Виберемо крок $h=0,1$ і поділимо відрізок $[1,2; 1,5]$ на частини. Одержимо чотири вузлові точки $x_0 = 1,2; x_1 = 1,3; x_2 = 1,4; x_3 = 1,5$. Дві точки ($x_1 = 1,3; x_2 = 1,4$) – внутрішні; дві інші – межові.

Задане рівняння у внутрішніх точках замінимо скінченорізницеvim рівнянням

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + 2x_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - y_i = 4, i = 1, 2.$$

У межових точках маємо:

$$\begin{cases} y_0 = 0,8 \\ y_3 + \frac{y_3 - y_2}{h} = 3 \end{cases}$$

Дана крайова задача зводиться до розв'язку системи рівнянь:

$$\begin{cases} y_0 = 0,8 \\ \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{0,01} + 2 \cdot 1,3 \frac{y_2 - y_0}{0,2} - y_1 = 4 \\ \frac{y_3 - 2y_2 + y_1}{0,01} + 2 \cdot 1,4 \frac{y_3 - y_2}{0,2} - y_2 = 4 \\ y_3 + \frac{y_3 - y_2}{0,1} = 3 \end{cases}$$

Виконавши перетворення, одержимо для визначення невідомих y_1, y_2, y_3 систему лінійних алгебричних рівнянь

$$\begin{cases} -0,402y_1 + 0,226y_2 = -0,1312 \\ 0,172y_1 - 0,402y_2 + 0,228y_3 = 0,008 \\ -y_2 + 1,1y_3 = 0,3 \end{cases}$$

Розв'яжемо цю систему, використовуючи схему єдиного ділення. Отже, розв'язок крайової задачі – це сукупність значень

$$\begin{aligned} y_0 &= 0,800 \\ y_1 &= 0,959 \\ y_2 &= 1,125 \\ y_3 &= 1,295. \end{aligned}$$

Питання до лекції 7

- 1) Сформулюйте лінійну крайову задачу.
- 2) В чому полягає метод скінченних різниць.
- 3) Розв'язок лінійної крайової задачі методом прогонки.

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я.* Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Підручник. – К: ІВЦ “Видавництво «Політехніка»”, 2004. – 220 с.
2. Математична обробка даних хімічного експерименту. Навчальний посібник/ Укладачі: *В.О Мінаєва, В.М. Бочарнікова, Т.А. Григоренко* – Черкаси, Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2003. – 208 с.
3. *Поршнев С.В.* Вычислительная математика. Курс лекций. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 320 с
4. *Березин Б.И., Березин С.Б.* Начальный курс C и C++. – М.: Диалог-МИФИ, 1998. – 288 с.
5. Математическая обработка результатов эксперимента / *Л.З. Румшинский* – М.: Наука, 1971. – 192 с.
6. *Хемминг Р.В.* Численные методы. – М.: Наука, 1972. – 400 с.
7. *Демидович Б.П., Марон И. А.* Основы вычислительной математики. – М.: Наука. 1970. – 664 с.
8. *Вентцель Е. С.* Теория вероятностей. – М.: Наука.1969. – 576 с.
9. *Медведев Р.Б., Брановицька С. В., Колесникова Р.Н.* Численные методы для инженеров химиков-технологов. – К.: КПИ, 1976. – 80 с.
10. *Краскевич В.Е., Зеленский К.Х., Гречко В.И.* Численные методы в инженерных исследованиях. – К.: Виша шк., 1986. – 263 с.
11. *Батунер Л.М., Позин М.Е.* Математические методы в химической технике. – Л.: Химия, 1971. – 823 с.
12. *Джонсон К.* Численные методы в химии. – М.: Мир. 1983 – 503 с.
13. *Вержбицкий В.М.* Основы численных методов - М.: Высш, шк., 2002. – 840 с.