



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ

Кондратов С.О., Іванов В.Г.

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

Частина 2

Чисельні методи аналізу. Диференціальні рівняння

Навчальний посібник

2026

УДК 519.6

Електронний навчальний посібник

УДК 519.6

Навчальний посібник з дисципліни «Чисельні методи. Частина 2. Чисельні методи аналізу. Диференціальні рівняння» для здобувачів першого (бакалаврського) рівня освіти за спеціальностей 121 «Інженерія програмного забезпечення», 126 «Інформаційні системи та технології»(Електронне видання)/ Уклад.: Кондратов С.О. Іванов В.Г. - Київ: Вид-во СНУ ім. В. Даля, 2026. – 263 с

У другій частині розглянуто базові наближені й чисельні методи диференціювання та інтегрування, розв'язання звичайних диференціальних рівнянь і рівнянь математичної фізики. Книга містить матеріали 7 лекцій другого семестру навчання двосеместрового курсу, разом із завданням для самостійної роботи і контрольними запитаннями з кожної теми. Матеріали лекцій ілюстровані прикладами розв'язання задач з використанням відкритих комп'ютерних систем: OOo Calc, Maxima, Scilab.

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА АВТОРА	5
ЛЕКЦІЯ 1. КОМП'ЮТЕРНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ.....	6
Мета лекції:.....	6
План лекції.....	6
1.1 Аналітичне диференціювання	7
1.2 Чисельне диференціювання функцій за допомогою	16
інтерполяційних поліномів – загальний підхід.....	16
1.3 Одержання похідних за допомогою інтерполяційних формул Ньютона	18
1.4 Використання інтерполяційного поліному Лагранжа для розрахунків похідних	23
1.5 Чисельний розрахунок частинних похідних	26
1.6 Чисельне диференціювання за допомогою сплайнів	32
1.7 Чисельне диференціювання експериментальних кривих	33
Контрольні запитання	37
Завдання для самостійної роботи.....	39
Завдання 1.1	39
Завдання 1.2	41
ЛЕКЦІЯ 2. КОМП'ЮТЕРНЕ ІНТЕГРУВАННЯ	44
Мета лекції.....	44
План лекції.....	44
2.1 Аналітичне інтегрування	45
2.2 Метод розкладання в ряд Тейлора-Маклорена.....	51
2.3 Загальні методи побудови квадратурних формул	55
2.4 Метод середніх прямокутників	56
2.5 Формула трапецій.....	58
2.6 Метод Симпсона.....	63
2.7 Збіжність квадратурних формул. Оцінка погрешності за правилом Рунге	70
2.8 Чисельний розрахунок невластних інтегралів.....	73
2.9 Кубатурні формули і проблема розрахунків кратних інтегралів	75
2.9 Розрахунок кратних інтегралів методом Монте-Карло	81
Контрольні запитання	85
Завдання для самостійної роботи.....	87
Завдання 2.1	87
Завдання 2.2	89
ЛЕКЦІЯ 3. НАБЛИЖЕНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ	91
Мета лекції:.....	91
План лекції.....	91
3.1 Основні визначення. Задача Коші.....	92
3.2 Комп'ютерне аналітичне інтегрування ЗДУ	94
3.3 Одержання наближених числових розв'язків. Метод Пікара.....	99
3.4 Наближені розв'язки. Розкладання в ряд	107
3.5 Метод малого параметру	109
Контрольні запитання	112
Завдання для самостійної роботи.....	114
ЛЕКЦІЯ 4. ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗДР ТА СИСТЕМ ЗДР	117
Мета лекції.....	117
План лекції.....	117
4.1 Класифікація чисельних методів розв'язку задачі Коші	118
4.2 Метод Ейлера.....	118
4.3 Модифіковані методи Ейлера. Методи корекції та прогнозу.....	125
4.4 Метод Рунге-Кути	131
4.5 Модифікації методу Рунге-Кути.....	138
4.6 Багатокрокові методи.....	146
4.7 Чисельне моделювання динамічних систем зі збуреною правою частиною	153
Контрольні запитання	155
Завдання для самостійної роботи.....	157
Завдання 4.1	157
Завдання 4.2	160
ЛЕКЦІЯ 5. ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЖОРСТКИХ СИСТЕМ І КРАЙОВИХ ЗАДАЧ.....	165
Мета лекції.....	165
План лекції.....	165
5.1 Поняття жорстких систем ЗДУ	166

5.2 Методи розв'язання жорстких систем. Неявний метод Ейлера	169
5.3 Метод Розенброка	173
5.4 Крайові задачі. Метод стрільби.....	178
Контрольні запитання	184
Завдання для самостійної роботи.....	184
Завдання 5.1	184
Завдання 5.2	188
ЛЕКЦІЯ 6 МЕТОД СІТОК ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ	193
Мета лекції.....	193
План лекції.....	193
6.1 Загальні відомості про рівняння математичної фізики	194
6.2 Початкові та крайові умови.....	199
6.3 Метод сіток	203
6.4. Задача Діріхле для рівняння Лапласа	208
6.5 Розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа методом сіток у прямокутній області.....	211
Контрольні запитання	219
Завдання для самостійної роботи.....	220
Завдання 6.1	220
ЛЕКЦІЯ 7. МЕТОДИ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ	223
Мета лекції.....	223
План лекції.....	223
7.1 Розв'язання першої крайової задачі для рівняння параболічного типу методом сіток	224
7.2 Неявна схема для розв'язання рівнянь параболічного типу	232
7.3 Розв'язання методом сіток першої крайової задачі для рівняння гіперболічного типу	239
7.4 Диференціально-різницевий метод (метод прямих)	244
7.5 Розв'язання задачі Діріхле методом випадкових блукань	247
Контрольні запитання	258
Завдання для самостійної роботи.....	259
Завдання 7.1	259
Завдання 7.2	262
Завдання 7.3	262

ПЕРЕДМОВА АВТОРА

У другій частині посібнику містяться матеріали, що вивчаються у другому семестрі двосеместрового курсу «Чисельні методи» студентам Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля. У другій частині, також, як у першій, наряду з традиційним підходом, що базується на використанні фундаментальних методів математичного і функціонального аналізу, використано підхід, що базується на комп'ютерному експерименті та математичному моделюванні, що є близьким для фахівців з інформатики. Матеріал книги містить матеріали 7 лекцій, що згруповані по темам, контрольні запитання, завдання для самостійної роботи, що можуть бути використані на практичних заняттях. Книга містить значну кількість гіперпосилань, що робить її зручною у використанні. У кожній лекції наведені приклади, що ілюстровані комп'ютерними програмами, переважно в середовищі відкритого пакету прикладної математики Scilab. Для розв'язання задач одержання наближених формул і комп'ютерного аналітичного інтегрування і диференціювання використано відкритий пакет Maxima. Для виконання оціночних і допоміжних розрахунків використано табличний процесор Calc, що входить до складу відкритого пакету Open Office.org. Усі програмні продукти вільно розповсюджуються через мережу Internet і мають ліцензії на вільне використання. Лістингі усіх програм, що наведені у посібнику, скопійовані безпосередньо після їх відладки і контрольних розрахунків.

ЛЕКЦІЯ 1. КОМП'ЮТЕРНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ

Мета лекції:

- 1 Ознайомити слухачів з методами аналітичного обчислення похідних за допомогою сучасних комп'ютерних пакетів прикладної математики.
- 2 Ознайомити слухачів з підходами і методами чисельного диференціювання, особливостями його програмної реалізації.
- 3 Ознайомити слухачів з окремими практичними задачами чисельного диференціювання зокрема розрахунків похідних від експериментальних кривих.

План лекції

[1.1 Аналітичне диференціювання](#)

[1.2 Чисельне диференціювання функцій за допомогою інтерполяційних поліномів – загальний підхід](#)

[1.3 Одержання похідних за допомогою інтерполяційних формул Ньютона](#)

[1.4 Використання інтерполяційного поліному Лагранжа для розрахунків похідних](#)

[1.5 Чисельний розрахунок частинних похідних](#)

[1.6 Чисельне диференціювання за допомогою сплайнів](#)

[1.7 Чисельне диференціювання експериментальних кривих](#)

[Контрольні запитання](#)

[Завдання для самостійної роботи](#)

[Список використаної літератури](#)

1.1 Аналітичне диференціювання

Операція диференціювання є основною у багатьох прикладних задачах різних галузей знань. У теперішній час за допомогою комп'ютеру можна організувати проведення:

- аналітичного диференціювання;
- чисельного диференціювання.

Уперше комп'ютерне аналітичне диференціювання за допомогою комп'ютеру було програмно реалізовано на початку 80-х років в рамках пакету Reduce, що працював на великих ЕОМ (типу БЕСМ-6). На теперішній час аналітичне диференціювання реалізовано на персональних комп'ютерах у багатьох пакетах прикладної математики: Maple, MathCAD, MathLab, Mathematica та інших, у тому числі, за допомогою вільного пакету wxMAXIMA.

Аналітичне комп'ютерне диференціювання, в залежності від задач, що ставляться, дозволяє:

- ✓ одержати *аналітичний вираз* для похідної;
- ✓ одержати *чисельне значення похідної у точці*, або у групі точок.

В основі комп'ютерного диференціювання покладені принципи штучного інтелекту. Найбільш просто комп'ютерне диференціювання виконується у пакеті MathCAD. Послідовність виконання розрахунків

- спочатку за допомогою оператора присвоєння ($:=$) визначають функцію;
- за допомогою оператора диференціювання $\frac{d}{dx}$ на панелі Calculus записують операцію диференціювання (безпосередньо, або шляхом присвоєння);
- за допомогою оператора символічних дій $\rightarrow$ викликають вираз для похідної;
- в разі необхідності розрахувати чисельне значення у вираз підставляються числові значення. Приклад розрахунків наведено на скриншоті (рис. 1.1). У верхній частині наведено функцію трьох змінних. Нижче наведено послідовно створення вектор-стовпця похідних і надання йому числових значень. Якщо вираз для похідної

не є необхідним – його одержання може бути опущено

Разом з першими похідними, можна аналітично розраховувати похідні високих порядків:

- для одержання повних похідних на панелі Calculus наявний відповідний оператор $\frac{d^n}{dx^n}$

- для одержання змішаних похідних слід послідовно використати диференціювання по декільком змінним. На скріншоті (рис. 1.2) наведено приклад одержання елементів матриці других похідних. При цьому на екрані друкується аналітичний вираз для повної похідної 2-го порядку:

$$z_{33} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2}$$

і числове значення змішаної похідної:

$$z_{12} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}$$

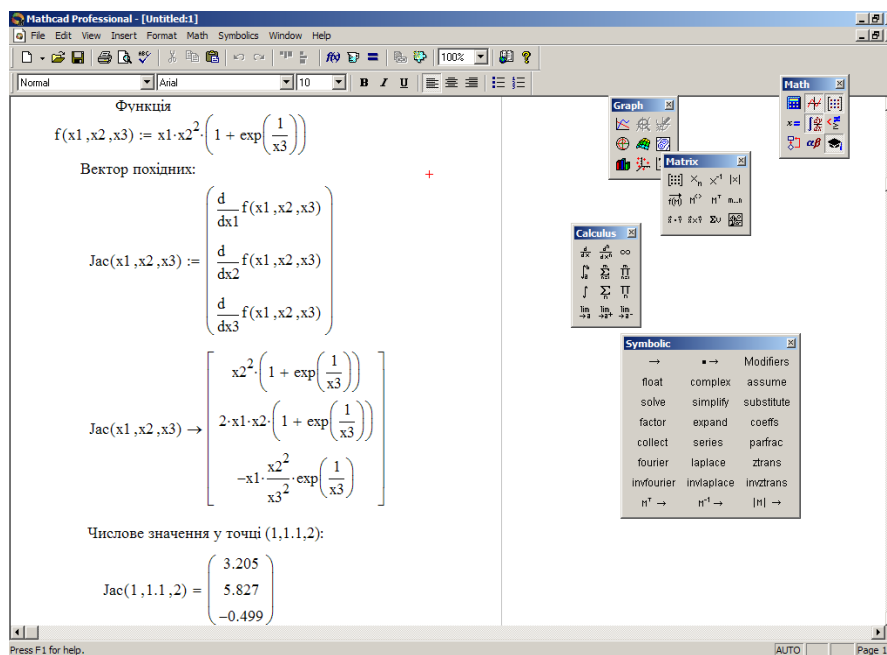


Рисунок 1.1 – Розрахунок похідних

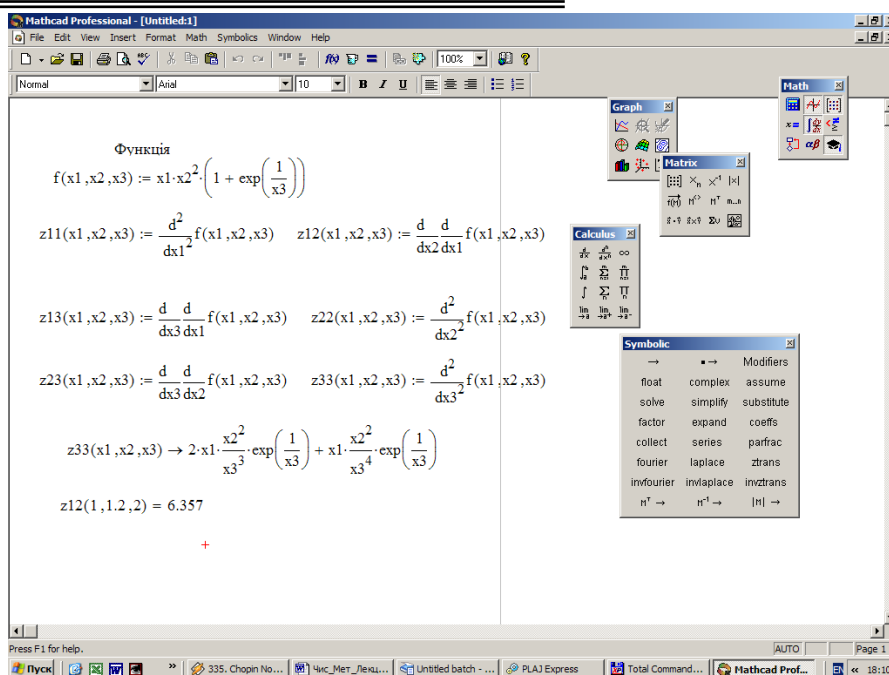


Рисунок 1.2 – Одержання других похідних

В середовищі wxMaxima для виконання аналітичного диференціювання використовують функцію `diff()`. Її можна використовувати:

- ✓ для визначення функції диференціювання,
- ✓ для аналітичного розрахунку похідної,
- ✓ для чисельного розрахунку похідної в заданій точці

Робота у wxMaxima відбувається у діалоговому або у програмному режимі.

Для роботи у *діалоговому режимі* команди вводяться у віконці «ВВОД» і далі, натисненням клавіші <Enter> виводиться у робоче вікно

Для роботи у *програмному режимі* укладається скрипт, краще окремо, наприклад, у Блокноті або в OOo Writer, і далі копіюється у вікно багаторядкового введення, що викликається натисненням клавіші  праворуч від віконця «ВВОД» (рис. 1.3).

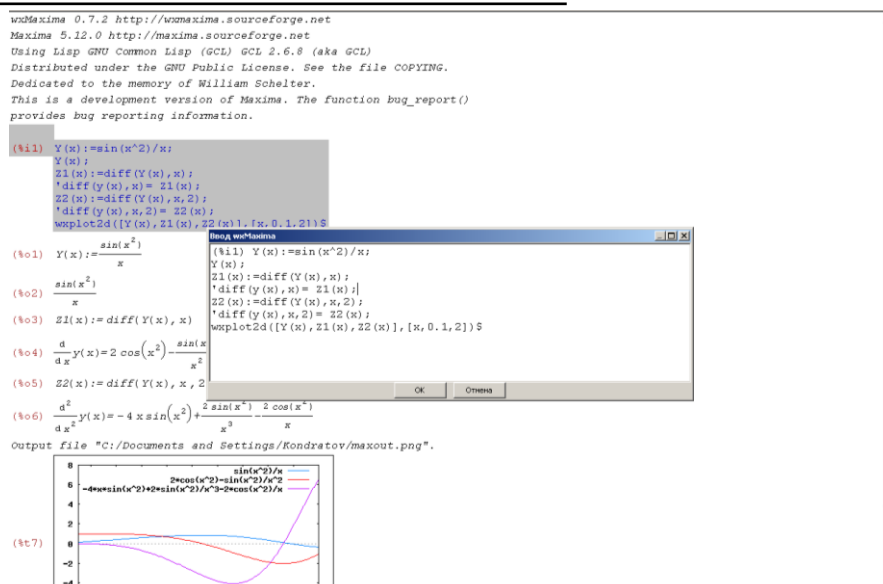


Рисунок 1.3 – Робоче вікно програми wxMaxima, разом з віконцем багаторядкового уведення.

За допомогою функції `diff()` можна розраховувати такі аналітичні вирази:

- ✓ перші *похідні* й похідні високих порядків від функцій *однієї змінної*. Для цього використовується конструкція:

$$\text{diff}(f(x), x, k),$$

де k – порядок похідної (якщо $k=1$ – його можна не вказувати);

$f(x)$ – функція, що визначається:

- як *зовнішня*, перед виконанням диференціювання, за допомогою оператора присвоєння `define()`;
- як *внутрішня*, у тілі оператора `diff`;
- ✓ часткові похідні першого і високих порядків від функції від декількох змінних. Для цього використовується конструкція:

$$\text{diff}(f(x_1, x_2, \dots, x_n), x_1, k_1, x_2, k_2, \dots, x_n, k_n),$$

де k_i – порядок змішаної часткової похідної по змінній x_i ;

- ✓ повний диференціал першого порядку. Для цього в `deff()` не вказуються змінні, по яких відбувається диференціювання;
- ✓ числового розрахунку похідних. Для цього задають координати точки, де

треба розрахувати похідну;

Приклад 1.1

У середовищі wxMaxima одержати аналітичні вирази для першої та другої похідної від функції:

$$y = \frac{\sin(x^2)}{x} \quad (1.1)$$

Побудувати графіки вхідної функції, її першої та другої похідних в діапазоні x від 0,1 до 2.

Розв'язання

а) укладаємо скрипт для розв'язання задачі, заносимо його у вікно багаторядкового вводу (виклик - у правій частині віконця «ВВОД»), натискаємо клавішу уведення. В робочому вікні у першому рядку з'являється лістинг (скрипт 1.1)

Скрипт 1.1

```
(%i1) Y(x):=sin(x^2)/x;  
      Y(x);  
      Z1(x):=diff(Y(x),x);  
      'diff(y(x),x)= Z1(x);  
      Z2(x):=diff(Y(x),x,2);  
      'diff(y(x),x,2)= Z2(x);  
      wxplot2d([Y(x),Z1(x),Z2(x)], [x,0.1,2])$
```

Далі з'являються результати роботи програми – формули (протокол 7.1)

Протокол 7.1

$$(\%01) \quad Y(x) := \frac{\sin(x^2)}{x}$$

$$(\%02) \quad \frac{\sin(x^2)}{x}$$

$$(\%03) \quad Z1(x) := \text{diff}(Y(x), x)$$

$$(\%04) \quad \frac{d}{dx} Y(x) = 2 \cos(x^2) - \frac{\sin(x^2)}{x^2}$$

$$(\%05) \quad Z2(x) := \text{diff}(Y(x), x, 2)$$

$$(\%06) \quad \frac{d^2}{dx^2} Y(x) = -4x \sin(x^2) + \frac{2 \sin(x^2)}{x^3} - \frac{2 \cos(x^2)}{x}$$

Далі, у відповідності до скрипту, з'являється графік функції, першої та другої похідної у заданих межах (рис. 1.4)

Приклад 1.2

Для функції (1.2) одержати вирази для:

- ✓ перших часткових похідних,
- ✓ других повних та змішаних часткових похідних,
- ✓ третіх змішаних часткових похідних.

$$f(x, y) = x \cdot e^{-x^2 - y^2} \quad (1.2)$$

Розрахувати значення третіх змішаних похідних у точці (1,2;2,3). Побудувати графік змішаної третій похідної $\frac{\partial^3 f(x, y)}{\partial^2 x \partial y}$.

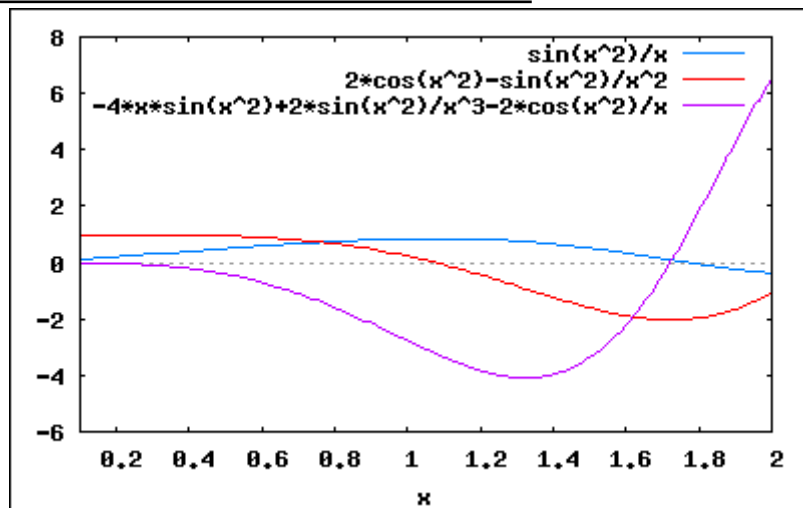


Рисунок 1.4 – Графіки до прикладу 1.1

Розв'язання

Укладаємо скрипт для виконання задачі (лістинг 1.2). У скрипті:

- ✓ визначаємо функції і похідні за допомогою оператора:

```
define(имя_ф-ції, ф-ла)
```

де `имя_ф-ції` – позначення функції разом з її аргументами (в круглих дужках),

`ф-ла` – формула для розрахунку значення функції;

- ✓ для друку результатів записуємо символ диференціювання за допомогою позначення:

```
'diff(f(x,y),x)
```

- ✓ Позначка апострофа перед оператором означає, що друкується символ операції, без її виконання. Виконання відбувається після знаку «`=`», тобто друкується функція, що міститься після цього знаку.
- ✓ Позначення, що використані, наведені у табл. 1.1:

Таблиця 1.1 – Позначення похідних у лістингу 1.2

Позначення	f_x	f_y	f_{x^2}	f_{y^2}	f_{xy}	f_{2xy}	f_{xy^2}
Похідна	$\frac{\partial f}{\partial x}$	$\frac{\partial f}{\partial y}$	$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$	$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$	$\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y}$	$\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y^2}$

- ✓ Для друку числових значень у відповідну функцію підставляємо потрібні числа і опцію «numer»

В операторі побудови трьохвимірної графіки додаємо опцію [gnuplot_pm3d,false], що вимикає забарвлення графіки різними кольорами.

Результати роботи програми наведено у протоколі 1.2. На рис. 1.5 наведено трьохвимірний графік змішаної похідної $\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y}$.

Лістинг 1.2

```
define(f(x,y), x*exp(-x^2-y^2));
'f=f(x,y);
define(fx(x,y), diff(f(x,y),x));
'diff(f(x,y),x)=fx(x,y);
define(fy(x,y), diff(f(x,y),y));
'diff(f(x,y),y)=fy(x,y);
define(fx2(x,y), diff(f(x,y),x,2));
'diff(f(x,y),x)=fx2(x,y);
define(fy2(x,y), diff(f(x,y),y,2));
'diff(f(x,y),y,2)=fy2(x,y);
define(fxy(x,y), diff(f(x,y),x,1,y,1));
'diff(f(x,y),x,1,y,1)=fxy(x,y);
define(f2xy(x,y), diff(f(x,y),x,2,y,1));
'diff(f(x,y),x,2,y,1)=f2xy(x,y);
define(fx2y(x,y), diff(f(x,y),x,1,y,2));
'diff(f(x,y),x,1,y,2)=fx2y(x,y);
```

```
f2xy(1.2,2.3), numer;
fx2y(1.2,2.3), numer;
plot3d(f2xy(x,y),[x,-2,2],[y,-2,2],[gnuplot_pm3d,false])
```

Протокол 1.2

```
(%o1) f(x,y):=x*%e^(-y^2-x^2)
(%o2) f = x*%e^(-y^2-x^2)
(%o3) fx(x,y):=%e^(-y^2-x^2)-2*x^2*%e^(-y^2-x^2)
(%o4) d/dx(x*%e^(-y^2-x^2))=%e^(-y^2-x^2)-2*x^2*%e^(-y^2-x^2)
(%o5) fy(x,y):=-2*x*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o6) d/dx(x*%e^(-y^2-x^2))=-2*x*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o7) fx2(x,y):=4*x^3*%e^(-y^2-x^2)-6*x*%e^(-y^2-x^2)
(%o8) d/dx(x*%e^(-y^2-x^2))=4*x^3*%e^(-y^2-x^2)-6*x*%e^(-y^2-x^2)
(%o9) fy2(x,y):=4*x*y^2*%e^(-y^2-x^2)-2*x*%e^(-y^2-x^2)
(%o10) d^2/dy^2(x*%e^(-y^2-x^2))=4*x*y^2*%e^(-y^2-x^2)-2*x*%e^(-y^2-x^2)
(%o11) fxy(x,y):=4*x^2*y*%e^(-y^2-x^2)-2*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o12) d^2/dxdy(x*%e^(-y^2-x^2))=4*x^2*y*%e^(-y^2-x^2)-2*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o13) f2xy(x,y):=12*x*y*%e^(-y^2-x^2)-8*x^3*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o14) d^3/dx^2dy(x*%e^(-y^2-x^2))=12*x*y*%e^(-y^2-x^2)-8*x^3*y*%e^(-y^2-x^2)
(%o15) fx2y(x,y):=-8*x^2*y^2*%e^(-y^2-x^2)+4*y^2*%e^(-y^2-x^2)+4*x^2*%e^(-y^2-x^2)-2*%e^(-y^2-x^2)
(%o16) d^3/dxdy^2(x*%e^(-y^2-x^2))=-8*x^2*y^2*%e^(-y^2-x^2)+4*y^2*%e^(-y^2-x^2)+4*x^2*%e^(-y^2-x^2)-2*%e^(-y^2-x^2)
(%o17) 0.0015825172629454
(%o18) -0.043028032778612
```

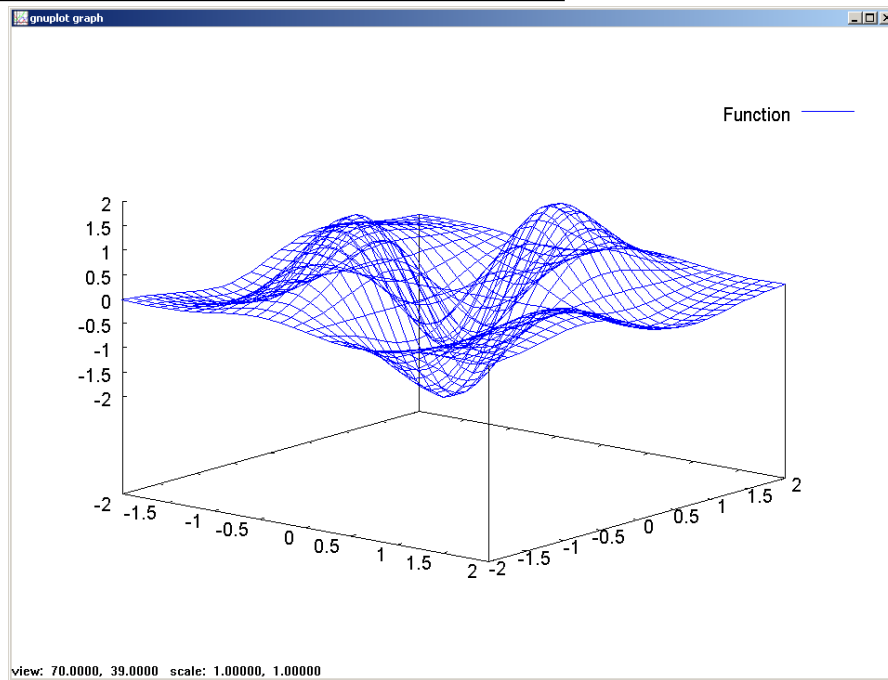


Рисунок 1.5 – Скріншот графіку похідної $\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y}$ у прикладі 1.2

1.2 Чисельне диференціювання функцій за допомогою інтерполяційних поліномів – загальний підхід

При розв'язанні прикладних задач часто виникає необхідність розрахувати значення похідних від функцій, що задані:

- ✓ табличне
- ✓ алгоритмічне, у вигляді послідовності дій,
- ✓ аналітичне у виді складного виразу.

У таких випадках використовують чисельне диференціювання.

Нехай функція $f(x)$ задана значеннями $y_i = f(x_i)$ в $(n+1)$ – й точці x_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) відрізка $[a, b]$. Загальний метод одержання формул чисельного диференціювання складається з таких етапів:

- ✓ в апроксимації табличних значень функції інтерполяційним поліномом $P_n(x)$;
- ✓ у приблизному вираженні шуканих значень похідної функції в будь-якій точці і відрізка $[a; b]$ через відповідні значення похідних цього поліному:

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x), 0 \leq k \leq n, x \in [a, b]. \quad (1.3)$$

Якщо відома погрішність інтерполяційної формули:

$$|R_n(x)| = |f(x) - P_n(x)|, \quad (1.4)$$

то погрішність похідних має вид:

$$|R_n^{(k)}(x)| = |f^{(k)}(x) - P_n^{(k)}(x)|, \quad (1.5)$$

Для розрахунків похідних використовують:

- ✓ інтерполяційні поліноми у формі Ньютона та Лагранжа;
- ✓ сплайни.

Відмітимо, що чисельне диференціювання є однією з *найменш точних* операцій серед чисельних методів. Це пов'язано з тим, що відбувається заміна знаходження границі *скінченими різницями*, що створює погрішність. При цьому близькість функції та інтерполяційного поліному не обов'язково тягне за собою близькість похідних. Це проілюстровано рис. 1.6. На ньому, незважаючи на близькість функції $f(x)$ та інтерполяційного поліному у точці A похідні $\tan \alpha$ і $\tan \beta$ суттєво відрізняються за величиною.

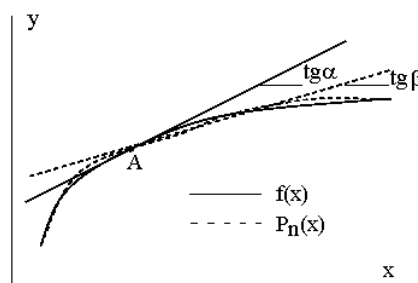


Рисунок 1.6 – Різниця похідних при інтерполяції

1.3 Одержання похідних за допомогою інтерполяційних формул Ньютона

Нехай функцію $f(x)$, що задана на відрізку $[a,b]$ таблицею значень у рівновіддалених точках x_i ($i=0,1,2,\dots,n$) з кроком:

$$h = x_{i+1} - x_i, \quad (1.6)$$

можна апроксимувати інтерполяційним поліномом Ньютона для інтерполяції уперед:

$$f(x) \approx y_0 + t \cdot \Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{t(t-1)(t-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots + \frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!} \Delta^n y_0, \quad (1.7)$$

де:

$$t = \frac{x - x_0}{h}. \quad (1.8)$$

Послідовно диференціюючи поліном (1.7) по x і враховуючи, що:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dt} \cdot \frac{dt}{dx} = \frac{df(x)}{dx} \cdot \frac{1}{h}, \quad (1.9)$$

отримаємо наступні формули для наближеного обчислення похідних функції:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \cdot \left[\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{3!} \Delta^3 y_0 + \frac{4t^3-18t^2+22t-6}{4!} \Delta^4 y_0 + \frac{5t^4-40t^3+105t^2-100t+24}{5!} \Delta^5 y_0 + \dots \right], \quad (1.10)$$

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2} \cdot \left[\Delta^2 y_0 + \frac{(t-1)}{1!} \Delta^3 y_0 + \frac{12t^2 - 36t + 22}{4!} \Delta^4 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{20t^3 - 120t^2 + 210t - 100}{5!} \Delta^5 y_0 + \dots \right], \quad (1.11)$$

В літературі наведені формули для похідних 3-го та більш високого порядку, але на практиці вони не використовуються *внаслідок різкого зростання погрішності*.

Формули (1.10) і (1.11) зручно застосовувати, якщо значення x розташовано *ближче до лівого кінця відрізка* $[a;b]$. Для обчислення значення похідній у точці, що *лежить ближче до правого кінця відрізка* $[a;b]$ можна скористатися інтерполяційним поліномом Ньютона для *інтерполяції назад* (див. част. 1, лекція 6):

$$f(x) \approx y_n + t\Delta y_{n-1} + \frac{t(t+1)}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \frac{t(t+1)(t+2)}{3!} \Delta^3 y_{n-3} + \\ + \frac{t(t+1)(t+2)(t+3)}{4!} \Delta^4 y_{n-4} + \dots + \frac{t(t+1)\dots(t+n-1)}{n!} \Delta^n y_0, \quad (1.12)$$

$$\text{де } t = \frac{x - x_n}{h}$$

Шляхом диференціювання (1.12) одержимо формули для наближеного обчислення похідних:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{2t+1}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \frac{3t^2 + 6t + 2}{3!} \Delta^3 y_{n-3} + \right. \\ \left. + \frac{4t^3 + 18t^2 + 22t + 6}{4!} \Delta^4 y_{n-4} + \dots \right]. \quad (1.13)$$

Найбільш важлива задача, що виникає на практиці – це *розрахунок похідних у вузлах інтерполяції*. Водночас це дозволяє сильно спростити формули. Оскільки будь-яку точку можна прийняти за початкову, то якщо покласти у (1.10) і (1.11) $x=x_0$, будемо мати $t=0$ і одержимо наступні формули для похідних 1 та 2 порядку:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 y_0 - \frac{1}{4} \Delta^4 y_0 + \dots \right], \quad (1.14)$$

$$f''(x_0) \approx \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 y_0 - \frac{5}{6} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (1.15)$$

Аналогічно можна у формулі (1.13) покласти $x=x_n$ ($t=0$) і отримати вираз для похідної при інтерполяції назад:

$$f'(x_n) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{1}{2} \Delta^2 y_{n-2} + \frac{1}{3} \Delta^3 y_{n-3} + \frac{1}{4} \Delta^4 y_{n-4} + \dots \right]. \quad (1.16)$$

Оцінка погрішності похідної:

а) якщо в інтерполяційному поліномі Ньютона (1.7) обмежитись різницями до k -го порядку, то його залишковий член має вид:

$$\begin{aligned} R_k(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_k)}{(k+1)!} f^{(k+1)}(\xi) = \\ &= h^{k+1} \cdot \frac{t(t-1)\dots(t-k)}{(k+1)!} f^{(k+1)}(\xi), \end{aligned} \quad (1.17)$$

де ξ - певне число, що лежить між вузлами інтерполяції $x_0, x_1, \dots, x_k$ та x ;

б) якщо:

- диференціювати (1.17),
- покласти $x=x_0$ ($t=0$),

те одержимо вираз для погрішності першої похідної:

$$|R'_k(x_0)| = \left| (-1)^k \cdot \frac{h^k}{(k+1)!} \cdot f^{(k+1)}(\xi) \right|; \quad (1.18)$$

в) на практиці користуватися формулою (1.16) незручно, оскільки рідко буває відомою величина похідної $f^{(k+1)}(x)$. При невеликих k можна наближено замінити похідну відношенням кінцевих різниць і записати оцінку для погрішності у виді:

$$|R'_k(x_0)| \approx \left| \frac{(-1)^k}{h} \cdot \frac{\Delta^{k+1}y_0}{k+1} \right|. \quad (1.19)$$

Формулу (1.17) частіше за все використовують для оцінки погрешностей.

На практиці для розрахунків похідних частіше за все використовують похідні 1 та 2 порядку. Зі збільшенням порядку похідної точність формул *різко падає*.

Приклад 1.3

Розрахувати чисельно величину похідної функції:

$$y = \exp(x^2) - 2x + 1 \quad (1.20)$$

у точці $x=0$, користуючись інтерполяційною формулою Ньютона. У процесі розрахунків перевірити, як впливає на результат величина кроку h і кількість врахованих членів інтерполяційного полінома. Точне значення похідної:

$$y'(0) = \left[2x \cdot \exp(x^2) - 2 \right]_{x=0} = -2. \quad (1.21)$$

Розв'язання

а) обираємо 2 значення кроку: $h = 0,1$ і $h = 0,01$

б) будуємо таблицю різниць для $h = 0,1$ (рис. 1.7):

1) у колонці x задаємо значення від 0 до 0,5 з кроком 0,1;

2) у колонці y розраховуємо значення заданої функції Формула комірки B5: $=\text{EXP}(A5^2)-2*A5+1$. Протягуємо її на наступні 5 комірок;

3) у колонці Δy розраховуємо перші різниці. Формула комірки C5: $=B6-B5$. Протягуємо її на наступні 4 комірки;

4) у колонці $\Delta^2 y$ розраховуємо другі різниці. Формула комірки D5: $=C6-C5$. Протягуємо її на наступні 3 комірки;

5) у колонці $\Delta^3 y$ розраховуємо треті різниці. Формула комірки E5: $=D6-D5$.

Протягуємо її на наступні 2 комірки;

б) у колонці $\Delta^4 y$ розраховуємо четверті різниці. Формула комірки F5: =E6-E5. Протягуємо її на наступну комірку;

7) у колонці $\Delta^5 y$ розраховуємо п'яту різницю. Формула комірки G5: =F6-F5;

в) у рядку 12 проводимо розрахунки похідної і погрішності для кількості членів $k=4$:

1) формула комірки D12 для похідної: =(C5-D5/2+E5/3-F5/4)/0,1;

2) формула комірки G12 для розрахунків погрішності (1.17):

=ABS(1/5/0,1*G5);

Розрахунок похідної функції $y = \exp(x^2) - 2x + 1$							
1) $h=0,1$							
X	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$	
0	2,00000	-0,18995	0,02071	0,00189	0,00148	0,00036	
0,1	1,81005	-0,16924	0,02260	0,00337	0,00183		
0,2	1,64081	-0,14664	0,02597	0,00520			
0,3	1,49417	-0,12066	0,03118				
0,4	1,37351	-0,08949					
0,5	1,28403						
	K=4	F'(0)=	-2,00044		R=	7,14E-04	
	K=3		-1,99674			3,69E-03	
	K=2		-2,00305			6,31E-03	
2) $h=0,01$							
X	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$	
0	2,00000	-0,01990	0,00020	0,00000	0,00000	0,00000	
0,01	1,98010	-0,01970	0,00020	0,00000	0,00000		
0,02	1,96040	-0,01950	0,00020	0,00000			
0,03	1,94090	-0,01930	0,00020				
0,04	1,92160	-0,01910					
0,05	1,90250						
	K=4	F'(0)=	-0,20000		R=	6,01E-10	
	K=3		-0,20000			3,01E-07	
	K=2		-0,20000			6,00E-07	

Рисунок 1.7 – Чисельний розрахунок похідних за допомогою інтерполяційної формули Ньютона

г) у рядку 13 проводимо розрахунки похідної і погрішності для кількості членів $k=3$:

1) формула комірки D13 для похідної: =(C5-D5/2+E5/3)/0,1;

2) формула комірки G13 для розрахунків погрішності (1.19):

=ABS(1/4/0,1*F5);

л) у рядку 14 проводимо розрахунки похідної і погрішності для кількості членів

k=2:

1) формула комірки D13 для похідної: =(C5-D5/2)/0,1;

2) формула комірки G13 для розрахунків погрішності (1.19):

=ABS(1/3/0,1*E5);

е) копіюємо рядки 2-14, влучаємо їх, починаючи з рядку 15, заміняємо кроки в усіх формулах з 0,1 на 0,01. Одержуємо результати для $h = 0,01$ (рис. 1.4)

Інтерпретація результатів:

- ✓ із зменшенням величини кроку точність розрахунків значно зростає (величина погрішності зменшується на 4-6 порядків);
- ✓ із зменшенням кількості членів інтерполяційного поліному погрішність зростає.

1.4. Використання інтерполяційного поліному Лагранжа для розрахунків похідних

Використання поліному Ньютона дозволяє розраховувати похідні за допомогою таблиці різниць. Це не дуже зручно, бо потрібні додаткові розрахунки різниць. Було б бажано розраховувати величини похідних через значення функцій. Це можна зробити, якщо використати поліном Лагранжа для рівновіддалених точок:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \cdot \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} \cdot y_i, \quad (1.22)$$

$$\text{де } t = \frac{x - x_0}{h}$$

Проведемо диференціювання (1.22) по x з врахуванням (1.9):

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \cdot y_i \cdot \frac{d}{dt} \left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} \right]. \quad (1.23)$$

В (1.23) похідна функції виражається через значення функції у вузлах інтерполяції.

Вираз для оцінки погрішності можна одержати шляхом диференціювання виразу для погрішності інтерполяційної формули Лагранжа. Формула для оцінки погрішності похідної:

$$|R'_n(x_i)| = \left| (-1)^{n-i} \cdot h^n \cdot \frac{i!(n-i)!}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(\xi) \right|, \quad (1.24)$$

де $\xi \in [a, b]$.

Випишемо окремі випадки формул для розрахунків похідних 1-го та 2-го порядку та оцінки їх погрішностей:

а) $n=2$ (задані значення функції у трьох вузлах інтерполяції):

- перші похідні:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} (-3y_0 + 4y_1 - y_2); \quad |R'| = \frac{h^2}{3} f'''(\xi); \quad (1.25)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h} (y_2 - y_0); \quad |R'| = \frac{h^2}{6} f'''(\xi); \quad (1.26)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{2h} (y_0 - 4y_1 + y_2); \quad |R'| = \frac{h^2}{3} f'''(\xi); \quad (1.27)$$

- другі похідні¹⁾:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2); \quad |R''| = hf'''(\xi); \quad (1.28)$$

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2); \quad |R''| = \frac{h^2}{12} f^{(IV)}(\xi); \quad (1.29)$$

$$f''(x_2) = \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2); \quad |R''| = hf'''(\xi); \quad (1.30)$$

б) $n=3$ (задані значення функції у 4-х вузлах інтерполяції):

¹⁾ Одинакові формули для похідних є наслідком того, що для інтерполяції по трьом точкам використовують поліном 2-го ступеня.

- перші похідні:

$$f'(x_0) = \frac{1}{6h}(-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3); \quad |R'| = \frac{h^3}{4}f^{(IV)}(\xi); \quad (1.31)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{6h}(-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3); \quad |R'| = \frac{h^3}{12}f^{(IV)}(\xi); \quad (1.32)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{6h}(y_0 - 6y_1 + 3y_2 + 2y_3); \quad |R'| = \frac{h^3}{12}f^{(IV)}(\xi); \quad (1.33)$$

$$f'(x_3) = \frac{1}{6h}(-2y_0 + 9y_1 - 18y_2 + 11y_3); \quad |R'| = \frac{h^3}{4}f^{(IV)}(\xi); \quad (1.34)$$

другі похідні:

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}(2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3); \quad |R''| = \frac{11}{12}h^2f^{(IV)}(\xi); \quad (1.35)$$

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}(y_0 - 2y_1 + y_2); \quad |R''| = \frac{1}{12}h^2f^{(IV)}(\xi); \quad (1.36)$$

$$f''(x_2) = \frac{1}{h^2}(y_1 - 2y_2 + y_3); \quad |R''| = \frac{1}{12}h^2f^{(IV)}(\xi); \quad (1.37)$$

$$f''(x_3) = \frac{1}{h^2}(-y_0 + 4y_1 - 5y_2 + y_3); \quad |R''| = \frac{11}{12}h^2f^{(IV)}(\xi). \quad (1.38)$$

З наведених формул випливає, що *найбільша точність* (найменша погрішність) спостерігаються для „внутрішніх” точок інтервалу. Для крайніх точок погрішність є більш високою.

З формул (1.25-1.38) випливають формули для чисельного диференціювання, що найбільш часто використовуються на практиці:

- для перших похідних:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}; \quad |R'| \sim \frac{(\Delta x)^2}{6}; \quad (1.39)$$

- для других похідних:

$$f''(x) = \frac{f(x - \Delta x) - 2f(x) + f(x + \Delta x))}{(\Delta x)^2}; \quad |R''| \sim \frac{(\Delta x)^2}{12}; \quad (1.40)$$

де Δx – обраний приріст (крок) відносно центральної точки.

Вплив величини кроку:

а) з одного боку, зі зменшенням кроку h для досить *гладкої функції* величина залишкового члена у формулах диференціювання (погрішність методу) *зменшується*. При цьому значення похідних *більше точні* у вузлах, розташованих посередині рівномірної сітки;

б) з іншого боку, при значному зменшенні кроку обчислювальна погрішність, що викликана:

- неточним завданням значень функції u_i ,
- помилками, , що виникають при обчисленні кінцевих різниць, *збільшується*

при зменшенні h і росту порядку похідній;

в) як видно з (1.39)-(1.40), при малих h значення функції в сусідніх вузлах майже рівні, тому при розрахунках *їхньої різниці губляться значущі цифри*;

д) ділення на h^k , якщо h мало, може *привести до великої абсолютної погрішності в значеннях k -ої похідної*.

Таким чином, задача апроксимації похідних за своєю природою є *нестійкою*.

1.5 Чисельний розрахунок частинних похідних

Формули (1.39), (1.40) можна пристосувати для розрахунків частинних похідних, що має практичне значення, наприклад, для розв'язання рівнянь математичної фізики методом сіток.

Найбільш просто розраховуються *перші частинні похідні*. У цьому випадку фіксуються усі змінні, крім однієї по якій відбувається диференціювання. Для розрахунків використовують формулу (1.39)

Приклад 1.4

Розрахувати у точці (1,2,0) компоненти якобіану - частинні похідні функції:

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{\exp(x_1 + \sqrt{x_2})}{1 + x_3} \quad (1.41)$$

Величина кроку по кожній із змінних $h = \Delta x_i = 0,01$.

Розв'язання

Результати розрахунків наведені у таблиці 1.2. Порядок проведення розрахунків:

- а) у першому рядку проводимо розрахунок значення функції у заданій точці;
- б) у другому рядку надаємо приріст змінної x_1 , залишаючи без змін величини інших змінних і розраховуємо значення функції;
- в) у третьому рядку надаємо негативний приріст змінної x_1 , залишаючи без змін величини інших змінних і розраховуємо значення функції. Далі у стовпці Δf розраховуємо приріст функції, а у стовпці f' – наближене значення часткової похідної по змінній x_1 по формулі (1.39).

Таблиця 1.2 – Розрахунки частинних похідних функції (1.41). Позначення: $\Delta f = f(x+h) - f(x-h)$

	x_1	x_2	x_3	f	Δf	f'
	1	2	0	11,18097		
x_1+h	1,01	2	0	11,29334	0,22362	11,181
x_1-h	0,99	2	0	11,06972		
x_2+h	1	2,01	0	11,22052	0,07906	3,953
x_2-h	1	1,99	0	11,14146		
x_3+h	1	2	0,01	11,07027	-	-
x_3-h	1	2	-0,01	11,29391	0,22364	11,182

Аналогічно проводимо розрахунки похідних по x_2 та x_3 . У наслідок розрахунків

отримуємо якобіан:

$$J = (11,181; 3,953; -11,182)$$

Для розрахунків змішаних похідних в точці (x_i^0, x_j^0) використовують так званий *метод сіток*:

а) роблять від цієї точки крок h_i вправо та вліво (вздовж осі змінної x_i) і крок h_j уверх і униз (вздовж осі змінної x_j) (рис. 1.8);

б) отримують 4 точки: $(x_i^0 - h_i, x_j^0 - h_j)$, $(x_i^0 + h_i, x_j^0 - h_j)$, $(x_i^0 - h_i, x_j^0 + h_j)$ і $(x_i^0 + h_i, x_j^0 + h_j)$, в яких розраховують значення функції;

в) розраховують наближене значення часткової похідної за формулою:

$$\frac{\partial^2 f(x_i^0, x_j^0)}{\partial x_i \partial x_j} \approx \frac{1}{4h_i h_j} \cdot [f(x_i^0 + h_i, x_j^0 + h_j) - f(x_i^0 - h_i, x_j^0 + h_j) - f(x_i^0 + h_i, x_j^0 - h_j) + f(x_i^0 - h_i, x_j^0 - h_j)] \quad (1.42)$$

В наведеному алгоритмі величини інших змінних, що не беруть участі у будівництві похідної, є *фіксованими*.

Другі повні похідні $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$ можна розглядати, як узагальнення поняття другої похідної. При цьому приріст відбувається тільки по одній змінній, і для розрахунків можна використовувати формули (1.43), що є аналогічними формулі (1.40):

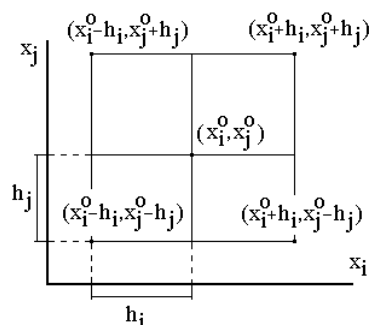


Рисунок 1.8 – Метод сіток для розрахунків других часткових похідних

$$\frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_i^2} \approx \frac{f(x_i^0 + h_i, \mathbf{x}_{-i}^0) - 2f(x_i^0, \mathbf{x}_{-i}^0) + f(x_i^0 - h_i, \mathbf{x}_{-i}^0)}{h_i^2}; \quad (1.43)$$

де $\mathbf{x}_{-i}^0$ означає незмінні координати точки, у якій відбувається диференціювання, по змінним, що не беруть участі у розрахунку похідної.

У формулах (1.42), (1.43) передбачається використання *різної величини приросту (кроку) по кожній змінній*. Це буває виправдано, коли масштаби величин по кожній змінній є різними. Якщо ці масштаби є близькими, безумовно, слід користуватися однаковою величиною кроку за усіма змінними.

Приклад 1.5

Розрахувати компоненти матриці Гесе других похідних:

$$H_e = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2} \end{bmatrix}. \quad (1.44)$$

для функції (1.41) в точці (1,2,0), користуючись кроком $h=0,01$ по кожній змінній.

Дослідити, як впливає величина h на другу похідну $\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}$

Розв'язання

Матриці Гесе є симетричною, тому для її повного визначення достатньо розрахувати діагональні та над діагональні елементи.

Скріншот проекту наведено на рис. 1.9. Порядок виконання розрахунків:

а) готуємо форму таблиці,

б) проводимо розрахунки повних похідних по формулі (1.40). Формули комірок:

- G9(розрахунок функції): =EXP(D9+E9^0,5)/(1+F9);

Розрахунок гесіану функції:

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{\exp(x_1 + \sqrt{x_2})}{1 + x_3}$$

h = 1,00E-02

		x1	x2	x3	f	f''
	x0	1	2	0	11,18097	
Чисті похідні						
f' x1x1	x1+h	1,01	2	0	11,29334	11,18107
	x1-h	0,99	2	0	11,06972	
f' x2x2	x2+h	1	2,01	0	11,22052	0,40935
	x2-h	1	1,99	0	11,14146	
f' x3x3	x3+h	1	2	0,01	11,07027	22,36418
	x3-h	1	2	-0,01	11,29391	
Змішані похідні						
f'' x1x2	x1+h, x2+h	1,01	2,01	0	11,33329	3,95314
	x1+h, x2-h	1,01	1,99	0	11,25344	
	x1-h, x2+h	0,99	2,01	0	11,10888	
	x1-h, x2-h	0,99	1,99	0	11,03060	
f'' x1x3	x1+h, x3+h	1,01	2	0,01	11,18153	-11,18228
	x1+h, x3-h	1,01	2	-0,01	11,40742	
	x1-h, x3+h	0,99	2	0,01	10,96012	
	x1-h, x3-h	0,99	2	-0,01	11,18154	
f'' x2x3	x2+h, x3+h	1	2,01	0,01	11,10943	0,00000
	x2+h, x3-h	1	1,99	-0,01	11,25400	
	x2-h, x3+h	1	2,01	0,01	11,10943	
	x2-h, x3-h	1	1,99	-0,01	11,25400	

Гесіан

	11,18107	3,95314	-11,18228
	3,95314	0,40935	0,00000
	-11,18228	0,00000	22,36418

вплив кроку h на a11

h	a11	δ
0,01	11,18107	9,32E-05
1,00E-03	11,18097	9,35E-07
1,00E-04	11,18097	6,08E-07
1,00E-05	11,18106	9,12E-05
1,00E-06	11,18394	2,97E-03
1,00E-07	11,72396	0,54298
1,00E-08	0,00000	11,18097

Рисунок 1.9 – Розрахунок гесіану

- об'єднаної комірки H9:H10 (похідна): $=(G9+G10-2*G7)/h^2$,

де h – ім'я комірки G3, де міститься значення кроку;

в) проводимо розрахунки змішаних похідних, проводячи відповідні зміни в координатах. Формула об'єднаної комірки H16:H19, де розраховується похідна: $=(G16-G17-G18+G19)/4/h^2$

г) копіюємо похідні у форму матриці Гесе (гесіану)

д) для дослідження впливу h у проекті змінюємо величину кроку від 0,1 до $1 \cdot 10^{-9}$, копіюємо значення похідної у таблицю. За міру точності обираємо абсолютну величину різниці між точним та наближеним значенням похідної. З формули (1.41) неважко бачити, що друга похідна по x_1 збігається з самою функцією, і точне значення наведено у комірці G7 (рис. 1.9).

Інтерпретація результатів:

- ✓ при зменшенні кроку до 10^{-4} - 10^{-3} відбувається наближення до точного рішення;
- ✓ подальше зменшення кроку, внаслідок зростання погрішності обчислень, приводить до видалення рішення від точного, при $h=10^{-8}$ і нижче відбувається

„зрив” значень похідної: різке зростання погрішності.

Це свідчить про наявність *оптимальної величини кроку h* , що має *мінімальну обчислювальну погрішність* при чисельному диференціюванні.

Для розрахунків похідних першого порядку, у тому числі часткових, у середовищі Scilab використовують функцію:

$$z = \text{numdiff}(\text{funk}, x),$$

де *funk* – зовнішня функція, що яку диференціюють по змінної *x*,
z – похідна,

Приклад 1.6

Розрахувати в Scilab часткові похідні функції (1.41) у точці (1;2;0).

Розв’язання

Скрипт для проведення розрахунків наведено у лістингу 1.6.

Лістинг 1.6

```
function y=fi(x)
    y=exp(x(1)+x(2)^0.5)/(1+x(3))
endfunction
x=[1,2,0]
z=numdiff(fi,x)
```

Протокол розрахунків:

x =

1. 2. 0.

z =

11.180974 3.9530712 - 11.180974

Результати, що одержані, збігаються з результатами [прикладу 1.4](#).

1.6 Чисельне диференціювання за допомогою сплайнів

Як відмічалось у першій частині курсу, сплайни забезпечують непогане наближення не тільки функції, що задана на сітці Δ , але також її похідних. Для розрахунків похідних необхідно диференціювати сплайн.

Для інтерполяційних кубічних сплайнів формули чисельного диференціювання, що виражені через нахили m_i та моменти M_i , мають вид:

$$S'_3(x) = 6t(1-t) \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + (1-4t+3t^2)m_i - (2t-3t^2)m_{i+1}; \quad (1.45)$$

$$S''_3(x) = (6-12t) \cdot \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{4-6t}{h_i} m_i - \frac{2-6t}{h_i} m_{i+1}; \quad (1.46)$$

$$S'''_3(x) = \frac{6}{h_i^2} \left(m_{i+1} + m_i - 2 \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} \right); \quad (1.47)$$

$$S'_3(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} (2M_i + M_{i+1}) + M_i(x - x_i) + \frac{M_{i+1} - M_i}{2h_i} (x - x_i)^2; \quad (1.48)$$

$$S''_3(x) = M_i + \frac{M_{i+1} - M_i}{h_i} (x - x_i); \quad (1.49)$$

$$S'''_3(x) = \frac{M_{i+1} - M_i}{h_i}; \quad (1.50)$$

де $x \in [x_i, x_{i+1}]$;

$h_i = x_{i+1} - x_i$ ($i=0, 1, \dots, N-1$);

$t = (x - x_i)/h_i$;

$m_i = S'(x_i)$ – нахил в i -ої точці;

$M_i = S''(x_i)$ – момент в i -ої точці.

Якщо $f(x) \in C^4[a, b]$, то погрішність наближення похідних $f'(x), f''(x), f'''(x)$ сплайнами

$S'(x), S''(x), S'''(x)$, відповідно складає $O(h^3), O(h^2), O(h)$.

1.7 Чисельне диференціювання експериментальних кривих

У багатьох прикладних задач різних галузей науки та техніки встає задача визначення похідних від набору експериментальних величин (експериментальних кривих), що *визначені з похибкою*. Похибка обумовлена:

- ✓ погрішностями експерименту,
- ✓ погрішностями вимірів
- ✓ погрішностями моделі

і може складати до декількох % відносних.

Для чисельного диференціювання таких кривих слід використовувати їх *згладжування методом найменших квадратів*. Але слід пам'ятати, що з близькістю даних до кривих не обов'язково впливає близькість їх похідних. Це може знаходити прояв вже при інтерполяції складних функцій (див. рис. 1.6), а при апроксимації експериментальних даних ці проблеми лише усугубляються. Тому, на наш погляд, якщо в даних наявна значна похибка, то диференціювання усій кривої для одержання надійних даних *неможливе*.

У багатьох випадках треба диференціювати не усю криву, а тільки її *початкову ділянку*, для одержання похідної у початкової точці. У цьому випадку, в умовах помірних похибок можна одержати надійну величину похідної у початковій точці, особливо, коли крива починається з нуля. Якщо початкові ділянка добре представлена, на ній процес, що спостерігається, тільки розгортається і тому може бути добре описаний простими емпіричними рівняннями – поліномами першого та другого ступеню з нульовими вільними членами

$$y = a_0 + a_1x = a_1x \quad (1.51)$$

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 = a_1x + a_2x^2 \quad (1.52)$$

У обох випадках похідна при $x=0$ дорівнює величині a_1 .

Ця величина може бути одержана за допомогою методу найменших квадратів,

описаному у частині 1. Практика показує, що ця величина визначається достатньо надійно на фоні поміркованих експериментальних похибок.

Приклад 1.7

. Наявні дані про ступінь денатурації ДНК^{1,2)} під впливом формальдегіду від тривалості його дії (табл. 1.3). Необхідно розрахувати початкову швидкість денатурації як похідну наведеної залежності у точці $t=0$.

Таблиця 1.3 – Залежність ступеню денатурації ДНК (х, %) від часу дії формальдегіду (t, хв.)

t	0	1	3	5	7	10	12	14	17	20
х	0	5,6	25, 6	39	51, 9	62, 5	70, 6	77, 5	82, 5	87, 5

Розв'язання

Будемо розв'язувати задачу у середовищі Scilab, користуючись методом найменших квадратів для згладжування (див. частину 1, лекцію 7).

Дослідження проведемо таким чином

а) будемо апроксимувати дані послідовно поліномами 2 го ступеня:

$$x = a_1 \cdot t + a_2 \cdot t^2, \quad (1.53)$$

і 3-го ступеня:

¹⁾ Дані для задачі взяті з книги: Березин И.В., Клесов А.А. Практический курс химической и ферментативной кинетики. – М.: изд-во МГУ, 1976 - С. 10.

²⁾ ДНК – дезоксирибонуклеїнова кислота, клітинна речовина, що відповідає за передачу спадкоємної інформації. Денатурація – це втрата структури і корисних властивостей ДНК під впливом хімічних речовин або фізичних факторів (температура, опромінювання).

$$x = a_1 \cdot t + a_2 \cdot t^2 + a_3 \cdot t^3. \quad (1.54)$$

Оскільки з умови задачі крива $x(t)$ проходить через початок координат, вільний член у всіх поліномом вважаємо таким, що *дорівнює нулю*;

б) за міру точності апроксимації обираємо коефіцієнт детермінації (див. частину 1, лекція 7):

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{\text{зал.}}}{SS_{\text{заг.}}}, \quad (1.55)$$

де $SS_{\text{зал.}} = \sum_{i=1}^n (x_i - \tilde{x}_i)^2$ - сума квадратів відхилень між експериментальними точками (x_i) і точками, що лежать на лінії апроксимації ($\tilde{x}_i$) по усій сукупності з n точок,

$SS_{\text{заг.}} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ - сума квадратів відхилень по виборці значень x відносно середнього значення $\bar{x} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i$.

В середовищі Scilab величину $SS_{\text{заг.}}$ зручно розраховувати через використання функції `st_deviation(x)` – стандартного відхилення вибірки x :

$$SS_{\text{заг.}} = [\text{st_deviation}(x)]^2 \cdot (n-1); \quad (1.56)$$

в) виходячи з рівнянь (1.53), (1.54), початкова швидкість буде:

$$w_0 = \left[\frac{dx}{dt} \right]_{t=0} = a_1. \quad (1.57)$$

Скрипт для розрахунків з коментарями для поліному 3-го ступеня наведено в лістингу 1.6. Для одержання результатів для поліному 2-го ступеня необхідно у цільової функції та `z1` виключити кубічний член.

Лістинг 1.6

```
// Метод найменших квадратів - цільова функція для поліному
3-го ступеня
function [zr]=G(c,z)
zr=z(2)-c(1)*z(1)-c(2)*z(1)^2-c(3)*z(1)^3
endfunction
// вхідні дані
t=[1,3,5,7,10,12,14,17,20];
x=[5.6,25.6,39,51.9,62.5,70.6,77.5,82.5,87.5];
z=[t;x]
c=[0;0;0];
//Розв'язання задачі, друк суми квадратів відхилень і
коефіцієнтів
[a,err]=datafit(G,z,c)
// Розрахунок точок на лінії апроксимації
for i=1:9
    z1(i)=a(1)*t(i)+a(2)*t(i)^2+a(3)*t(i)^3;
end
//друк результатів
[z',z1]
// Розрахунок коефіцієнту детермінації
SS=(st_deviation(x))^2*8;
R_2=1-err/SS
```

Результати розрахунків:

Поліном 2-го ступеня:

$$x = 8,5381248 \cdot x - 0,2121893 \cdot x^2$$

Характеристики: $ss_{\text{зал.}} = 29,047$, $R^2 = 0.9953$, $w_0 = 8,5$

Поліном 3-го ступеня:

$$x = 9.3645724 \cdot x - 0.3445152 \cdot x^2 + 0.0047373 \cdot x^3$$

Характеристики: $ss_{\text{зал.}} = 17,773$, $R^2 = 0.9971$, $w_0 = 9,4$

Як впливає з наведених даних, поліноми 2 і 3 ступеня добре описують експериментальні дані, але похідні у початковій точці суттєво відрізняються (більше, ніж на 20 %). Це показує, що оцінка похідної є дуже чутливою до невеликих збурень. Але це є єдиним, що можна отримати у ситуації, що розглянуто. Єдиним шляхом до одержання більш надійних оцінок є підвищення точності даних.

Контрольні запитання

- 1 У чому полягає процедура аналітичного диференціювання з використанням пакетів прикладної математики?
- 2 Як розрахувати частинні похідні в середовищі MathCAD?
- 3 Які етапи містить одержання формул чисельного диференціювання?
- 4 Які типи подання інтерполяційних поліномів використовуються для чисельних розрахунків похідних?
- 5 Які проблеми виникають при чисельних розрахунках похідних?
- 6 Алгоритм одержання виразів для чисельного диференціювання при використанні інтерполяційного поліному Ньютона з інтерполяцією уперед.
- 7 У якому випадку для розрахунків похідних слід використовувати інтерполяційний поліном Ньютона з інтерполяцією уперед, а в якому – з інтерполяцією назад?
- 8 У чому полягають розрахунки похідних за допомогою інтерполяційних формул у вузлах інтерполяції?
- 9 Як можна оцінити погрішність у розрахунках похідної?
- 10 Як можна отримати наближену формулу оцінки погрішності для похідних невисокого порядку?

11 Як на практиці на точність похідної впливає точність озрахунків і кількість членів інтерполяційного поліному?

12 У чому полягає незручність у використанні поліному Ньютона для розрахунків похідних? Який підхід можна використати, щоб виразити значення похідних через значення функцій у рівновіддалених вузлових точках?

13 Записати вирази для першої та другої похідних через вузлові точки для двох і трьох вузлів інтерполяції.

14 Як пов'язана точність розрахунків похідних з місцеположенням точки в середині інтервалу інтерполяції?

15 Як впливає крок інтерполяції на точність чисельних розрахунків похідних?

16 Наведіть алгоритм чисельного розрахунку частинної похідної першого порядку.

17 Як можна чисельно розрахувати змішані частинні похідні другого порядку?

18 Як можна чисельно розрахувати повні частинні похідні другого порядку? Що при цьому робиться зі змінними, які не входять до складу похідних?

19 Треба у точці (1;1) розрахувати чисельно часткові похідні від функції:

$$z = x^2 + 1000y$$

Яке співвідношення між кроками по кожній змінній доцільно використати?

20 У чому полягає перевага сплайнів для чисельних розрахунків похідних?

21 Алгоритм чисельного диференціювання за допомогою сплайнів.

22 Який порядок погрішності при чисельних розрахунках похідних за допомогою сплайнів?

23 Який метод апроксимації використовують при диференціювання кривих, що одержані експериментально?

24 У чому полягають особливості диференціювання експериментальних кривих у початкової точці?

25 На що вказує коефіцієнт детермінації при використанні методу найменших квадратів?

26 Як на практиці розрахувати похідну у середовищі Scilab?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 1.1

а) В середовищі wxMaxima скласти проект з одержання аналітичних виразів якобіану і гесіану функції трьох змінних, розрахувати їх значення у заданій точці.у заданій точці. Варіанти завдань наведені у табл. 1.4

б) В середовищі Scilab укласти програму для розрахунків якобіана і гесіана, провести розрахунки з задачею п. а), з різними величинами кроку h , порівняти результати з результатами, що одержані в п. а). Знайти, чи існує оптимальна величина кроку h .

Таблиця 1.4 – Варіанти завдання 1.1

Варіант	Функція	Координати точки
1	$\ln(x+y) + \sqrt{x+z^2}$	(2;2;1)
2	$\frac{x^{2/3} + y^{2/3} + z^{2/3}}{x \cdot y \cdot z}$	(1;2;1)
3	$\frac{x \cdot y \cdot z}{\sqrt{x+y+z}}$	(1;2;3)
4	$x \cdot \exp(-x-y-z)$	(1;0;1)
5	$x \cdot \exp(-x^2 - y^2) + y \cdot \exp(-y^2 - z^2)$	(1;1;1)
6	$\frac{\operatorname{ch}(x+y+z)}{\operatorname{sh}(x^2+y^2+z^2)}$	(0;0;1)

Продовження таблиці 1.4

Варіант	Функція	Координати точки
7	$\sin(x + y - z) \cdot \cos(2 \cdot x - z)$	$(0; 0; \pi/4)$
8	$\cos(2 \cdot \pi \cdot x \cdot y) + \sin(2 \cdot \pi \cdot y \cdot z)$	$(0,1; 0,1; 0,2)$
9	$\frac{\exp(x + y)}{\exp(x + z)}$	$(1; 1; 1)$
10	$\frac{\exp(x^2 + y^2 + z^2)}{\exp(x + y + z)}$	$(0; 1; 0)$
11	$\frac{\ln(x^2 + y^2 + z^2)}{\ln(x + y + z)}$	$(2; 2; 1)$
12	$\frac{\ln(x + y)}{\ln(x + z)}$	$(2; 1; 1)$
13	$\frac{\sqrt[3]{x^2 + y^2 + z^2}}{\ln(x + y + z)}$	$(2; 2; 1)$
14	$\frac{\cos(2 \cdot \pi \cdot x \cdot y) + \sin(2 \cdot \pi \cdot y \cdot z)}{x + y + z}$	$(0; 1; 1)$
15	$\frac{x \cdot \exp(-x^2 - y^2) + y \cdot \exp(-y^2 - z^2)}{z \cdot \exp(x + y + z)}$	$(1; 2; 1)$
16	$\frac{\operatorname{ch}(x + y + x)}{\sqrt[3]{x^2 + y^2 + z^2}}$	$(1; 2; 1)$
17	$\frac{\ln(x + y) + \sqrt{x + z^2}}{x + y + z}$	$(1; 1; 2)$
18	$\frac{x + y + z}{\exp(\sqrt{x + y + z})}$	$(2; 1; 1)$
19	$\frac{\sqrt{x \cdot y \cdot z}}{x \cdot y + y \cdot z + x \cdot z}$	$(2; 2; 4)$
20	$\frac{x^{2/3} + y^{2/3} + z^{2/3}}{x \cdot y + x \cdot z + y \cdot z}$	$(5; 3; 6)$
21	$\sin(2 \cdot \pi \cdot x \cdot y) + \sin(2 \cdot x \cdot z) + \sin(2 \cdot \pi \cdot y \cdot z)$	$(0,25; 0,25; 0,3)$

Продовження таблиці 1.4

Варіант	Функція	Координати точки
22	$\cos(2 \cdot \pi \cdot x \cdot y) + \cos(2 \cdot x \cdot z) + \cos(2 \cdot \pi \cdot y \cdot z)$	(0,25;1;1)
23	$\frac{\cos(2 \cdot \pi \cdot y)}{\sin(2 \cdot \pi \cdot x \cdot z)}$	(0,25;0,5;1)
24	$y \cdot \exp(\sin(x + z))$	(1;0;1)
25	$\sqrt{x \cdot y + \sqrt{x \cdot z + \sqrt{y \cdot z}}}$	(1;0;1)
26	$\frac{x + y + z}{\sqrt{x \cdot y + \sqrt{x \cdot z + \sqrt{y \cdot z}}}}$	(2;1;3)
27	$\frac{\sqrt{x \cdot y + \sqrt{x \cdot z + \sqrt{y \cdot z}}}}{x + y + z}$	(2;2;3)
28	$\ln(x + \sqrt[3]{y + z + x \cdot z})$	(1;2;3)
29	$\operatorname{ch}\left[\frac{1 + x \cdot y}{\sqrt{1 + x \cdot y \cdot z}}\right]$	(2;0;0)
30	$\operatorname{sh}\left[\frac{1 + x \cdot y}{\sqrt{1 + x \cdot y \cdot z}}\right]$	(0;0;2)

Завдання 1.2

Розробити в середовищі Scilab скрипт для розрахунків першої та другої похідних функції з варіанту завдань (табл. 1.5) методом сплайн-інтерполяції на інтервалі, що наведений у таблиці завдань.

Провести контрольні аналітичні і числові розрахунки похідних у середовищі wxMaxima, порівняти результати

Примітки:

а) при програмуванні Scilab використовувати функцію `splin()`, що розраховує моменти сплайну (див. частина 1, лекція 7), на основі яких побудувати формули, що наведені у [1.6](#).

б) для розрахунків похідних заданий відрізок розділити на 10 частин, похідні

розраховувати у вузлових точках.

Таблиця 1.5 – Варіанти завдань 1.2

№	Функція	Інтервал
1	$y = 2 \cdot \ln(e^x + 2)$	[0;3]
2	$y = \frac{\sin(2 \cdot x + 1)}{1 + \cos(3 \cdot x)}$	[-0,1;0,9]
3	$y = e^x \cdot \cos(x)$	[0;1]
4	$y = e^{-x} \cdot \cos(x)$	[0;1]
5	$y = e^x \cdot \sin(x)$	[0;1]
6	$y = e^{-x} \cdot \sin(x)$	[0;1]
7	$y = \operatorname{arctg}(x \cdot e^x)$	[0;1]
8	$y = \frac{1}{\operatorname{arctg}(e^x + 1)}$	[0;2]
9	$y = \operatorname{ch}(x) \cdot \cos(x)$	[0;2]
10	$y = \operatorname{ch}(x) \cdot \sin(x)$	[0;2]
11	$y = \operatorname{sh}(x) \cdot \cos(x)$	[0;2]
12	$y = \operatorname{sh}(x) \cdot \sin(x)$	[0;2]
13	$y = \operatorname{ash}(x) \cdot \sin(x)$	[0;2]
14	$y = \operatorname{ach}(x + 1) \cdot \sin(x)$	[0;2]
15	$y = \arcsin(x) \cdot e^{-x}$	[-1;1]
16	$y = \arccos(x) \cdot e^{-x}$	[-1;1]
17	$y = \operatorname{ch}(x) \cdot \operatorname{sh}(x)$	[-1;1]
18	$y = \operatorname{ch}(x) + \operatorname{sh}(x)$	[-1;1]
19	$y = \operatorname{ch}(x) - \operatorname{th}(x)$	[-1;1]
20	$y = \operatorname{ch}(x) \cdot \operatorname{th}^2(x)$	[-1;1]
21	$y = \operatorname{ch}(x) + \operatorname{th}^2(x)$	[-1;1]
22	$y = \operatorname{ch}^2(x) + \operatorname{th}^2(x + 1)$	[-1;1]

Продовження табл. 1.5

№	Функція	Інтервал
23	$y = 2 \cdot e^{-\frac{1}{x}}$	[1;11]
24	$y = 2 \cdot e^{-\frac{1}{x}} \cdot \cos(0,1 \cdot x)$	[1;11]
25	$y = 2 \cdot e^{-\frac{1}{x}} \cdot \sin(0,2 \cdot x)$	[1;11]
26	$y = \frac{2 \cdot e^{-\frac{1}{x}}}{\sin(0,2 \cdot x)}$	[1;11]
27	$y = \frac{\operatorname{ch}(x)}{1 + \sin(x)}$	[0;2]
28	$y = \frac{\operatorname{ch}(x) \cdot \cos(x)}{1 + \sin(x)}$	[0;2]
29	$y = \frac{\operatorname{ch}(x) \cdot \sin(x)}{1 + \cos^2(x)}$	[0;2]
30	$y = \frac{\operatorname{ch}(x) \cdot \cos(x)}{1 + \cos^2(x)}$	[0;2]

ЛЕКЦІЯ 2. КОМП'ЮТЕРНЕ ІНТЕГРУВАННЯ

Мета лекції

- 1 Ознайомити слухачів з особливостями комп'ютерного аналітичного інтегрування за допомогою пакетів програм прикладної математики.
- 2 Ознайомити слухачів з методами наближеного інтегрування шляхом розкладання в ряд, одержання рекурентних формул для проведення комп'ютерних розрахунків.
- 3 Ознайомлення слухачів з основними методами розрахунків визначених інтегралів, оцінки їх точності.
- 4 Ознайомлення слухачів з методами чисельних розрахунків багатовимірних інтегралів

План лекції

- 2.1 Аналітичне інтегрування
- 2.2 Основні принципи чисельного інтегрування. Метод розкладання в ряд Тейлора-Маклорена
- 2.3 Загальні методи побудови квадратурних формул
- 2.4 Метод середніх прямокутників
- 2.5 Формула трапецій
- 2.6 Метод Симпсона
- 2.7 Збіжність квадратурних формул. Оцінка погрішності за правилом Рунне
- 2.8. Кубатурні формули і проблема розрахунків кратних інтегралів
- 2.9 Розрахунок кратних інтегралів методом Монте-Карло

2.1 Аналітичне інтегрування

За допомогою сучасної комп'ютерної техніки можна розв'язувати задачі не тільки чисельного інтегрування, але й аналітичного інтегрування тощо, тобто, рішення задачі, оберненої до диференціювання: знаходження функції по її першій похідній. Безумовно, це можливо лише у обмеженій кількості випадків, коли вдається виразити інтеграл через елементарні або спеціальні функції. Аналітичне інтегрування вручну є дуже важкою і громіздкою операцією, і уведення до практики комп'ютерного інтегрування дозволяє суттєво полегшити цей процес.

У пакеті MathCAD для проведення аналітичного інтегрування використовується панель Calculus математичного аналізу, за принципом максимальної близькості до стандартної математичної нотації. На скріншоті (рис. 2.1) зображені можливі випадки проведення аналітичного інтегрування в середовищі MathCAD:

а) у першому випадку функція від x спочатку визначається за допомогою символу присвоєння ($:=$), а потім інтегрується. В усіх випадках довільна постійна інтегрування не додається;

б) у другому випадку функція безпосередньо записується під знаком інтегралу. Для обчислень необхідно після уводу формули перенести стрілку „символьні обчислення” з панелі Symbolic і клацнути мишею за межею формули;

в) третій випадок (рис. 2.1) – коли результат інтегрування є спеціальна функція, у даному випадку – інтеграл похибок:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt ; \quad (2.1)$$

г) четвертий випадок – коли результат інтегрування не можна виразити через елементарні або загальноприйняті спеціальні функції. У цьому випадку результат – це незмінний вираз із збереженням знаку інтегрування.

Аналогічно можна проводити символьне чисельне інтегрування методом

Ньютона-Лейбниці. Для цього використовується символ визначеного інтеграла з панелі Calculus і стрілка – позначка символічних обчислень (рис.2.2):

а) у першому випадку функція спочатку визначається, а потім інтегрується;

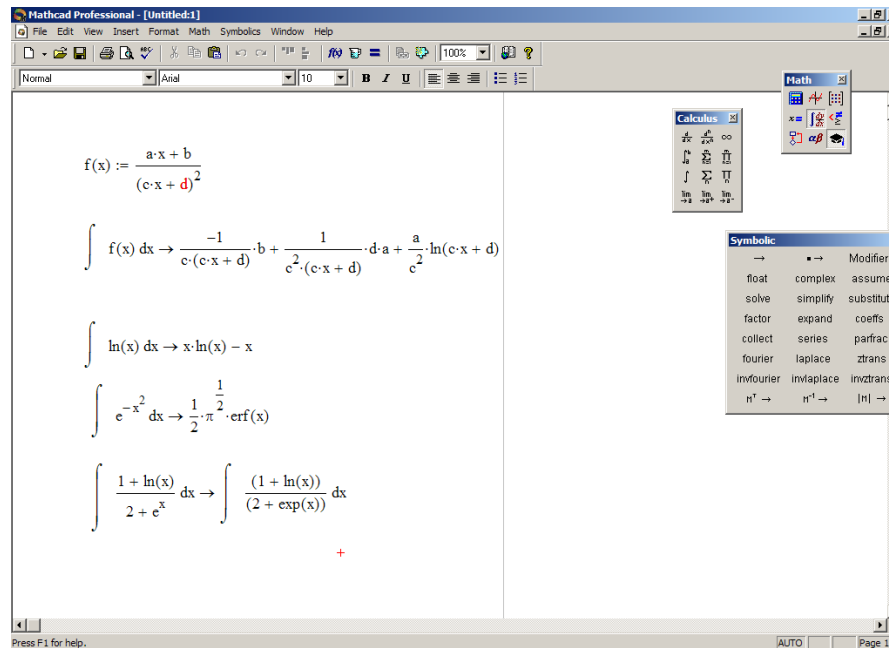


Рисунок 2.1 – Аналітичні обчислення невизначених інтегралів у середовищі MathCAD

б) у другому випадку функція безпосередньо ставиться під знаком інтеграла;

в) Якщо надати межами не символічні, а числові значення, в разі символічного інтегрування цифри, якщо вони цілі, будуть підставлені в аналітичні вирази для результатів інтегрування (приклад 3). Якщо цифри не цілі – відбудеться числовий розрахунок значень підсумкових функцій (приклад 4);

г) на відміну від обчислень невизначених інтегралів, у разі, коли неможливо обчислити визначний інтеграл аналітично, це завжди можливо зробити чисельно. Для цього замість стрілки слід поставити позначку „=” і одержати числове значення (приклад 5, рис.2.2).

Аналітичне інтегрування можна проводити й в середовищі wxMAXIMA, з використанням функції integrate().

При виконанні розрахунків невизначеного інтегралу структура функції є такою:

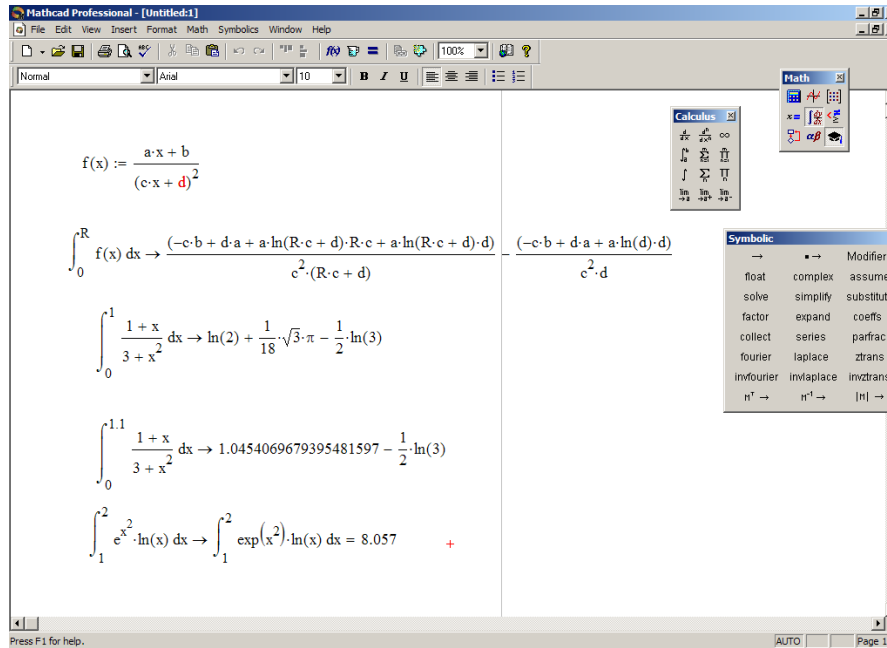


Рисунок 2.2 – Обчислювання визначених інтегралів в середовищі MathCAD

`integrate(funk(x),x),`

де `funk(x,a)` – підінтегральна функція від змінної `x`, по якій відбувається інтегрування.

Результати, що можливі при інтегруванні, наведені на рис. 2.3.

Якщо функція `funk(x)` є такою, що *не інтегрується* у квадратурах, то друкується тільки початкова вхідна функція.

Якщо підінтегральна функція *інтегрується в квадратурах* й не має літерних параметрів – після введення на екрані з'являється шуканий інтеграл (без свавільної константи інтегрування).

Підінтегральна функція може містити параметри у виді літер. Якщо результат інтегрування залежить від співвідношення або величини літер – на екрані з'являється запит, на який треба надати відповідь (увести перші літери відповідних ознак

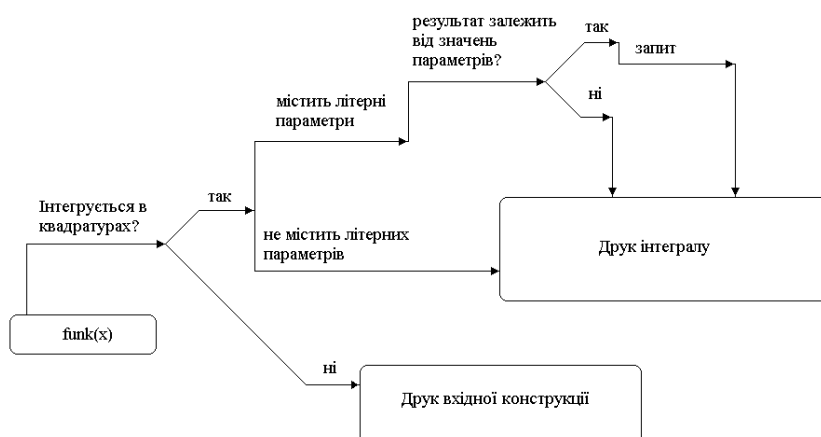


Рисунок 2.3 – Можливі випадки розрахунків невизначених інтегралів у wxMAXIMA

Після введення відповіді на запит на екрані з'являється шуканий інтеграл.

Якщо літерний запис результатів не залежить від співвідношення або знаків літер – запит не з'являється, а на екрані з'являється інтеграл.

Для виконання *визначених інтегралів* до складу функції `integrate` вводять нижню (a) та верхню (b) границі інтегралу:

$$\text{integrate}(\text{funkt}, x, a, b).$$

при цьому необхідно, щоб виконувалась умова: $b > a$.

Особливості, що характерні для розрахунків невизначених інтегралів (рис. 2.3), характерні для визначених інтегралів. На відміну від MathCAD, у середовищі wxMAXIMA не відбувається автоматичного числового розрахунку інтегралу в разі неможливості аналітичного інтегрування.

За допомогою функції `integrate()` можна:

- ✓ визначали інші функції (за допомогою оператора присвоєння `:=`),
- ✓ друкувати символи інтегрування (за допомогою використання апострофу, конструкція `'function()`),
- ✓ проводити числові розрахунки інтегралів (для функцій, що інтегруються у

квадратурах) шляхом додання опції `numer`.

Приклад 2.1

Необхідно розрахувати площу поверхні кришки апарата хімічного синтезу. . Кришка являє собою половину еліпсоїда обертання, висота $h = 0,9$ м, діаметр $d = 1,2$ м (рис. 2.3).

Розв'язання

а) помістимо половину еліпсоїда обертання центром основи в початок координат, так, щоб вісь симетрії збігалася з віссю OX (рис. 2.4);

б) для розрахунку площі поверхні можна використати формулу (2.2) для обчислення площ поверхні тіл обертання:

$$S_{\text{пов}} = 2\pi \int_a^b x(y) \cdot \sqrt{1 + \left[\frac{dx(y)}{dy} \right]^2} dy, \quad (2.2)$$

де $x(y)$ – рівняння кривої, що виражене у вигляді залежності y від x ,

a, b – межі інтегрування по осі y .

У даній задачі: $a = h$, $b = d/2$;

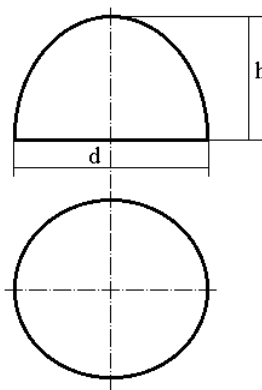


Рисунок 2.4 – Кришка апарату

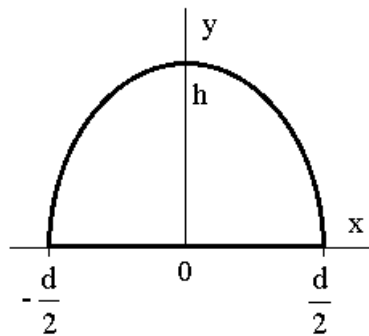


Рисунок 2.4 – До розрахунку площі поверхні у прикладі 2.1

в) у цій задачі крива обертання - це еліпс із півосями довжиною $d/2$ й h (рис. 2.4).

Рівняння цього еліпсу:

$$\frac{x^2}{\left[\frac{d}{2}\right]^2} + \frac{y^2}{h^2} = 1; \quad (2.3)$$

г) виразимо з рівняння (2.3) x через y :

$$x(y) = \frac{d}{2h} \sqrt{h^2 - y^2}. \quad (2.4)$$

д) подальші обчислення наведені на робочому аркуші MathCAD. Оскільки MathCAD оперує з символьними діями, немає необхідності у попередньому аналітичному диференціюванні вручну. Результати наведені у протоколі 2.1. Для того, щоб одержати числове значення, потрібно замість квадратного кореня використати зведення в дробовий ступінь.

Відмітимо, що аналогічні розрахунки в wxMAXIMA є більш громіздкими й менш наочними. Це пов'язано з різними концепціями і організацією цих двох пакетів.

wxMAXIMA побудована на основі мови LISP й не дуже добре пристосована для виконання чисельних розрахунків, але її можливості для символьних розрахунків є більш високими, ніж у MathCAD.

Протокол 2.1

Розрахунок площі еліптичної кришки
Вхідні дані

$d := 0.6$ діаметр кришки

$h := 0.9$ висота еліптичної частини

Рівняння кривої обертання

$$f(y) := \frac{d \cdot \sqrt{h^2 - y^2}}{2h}$$

Розрахункова формула

$$S := \int_0^h 2\pi \cdot f(y) \cdot \left[1 + \left(\frac{d}{dy} f(y) \right)^2 \right]^{0.5} dy$$

$$S = 1.39$$

2.2 Метод розкладання в ряд Тейлора-Маклорена

На практиці найчастіше для вирішення задач інтегрування використовується чисельне інтегрування. Його доводиться влучати, як модуль, до складу комп'ютерних програм рішення багатьох прикладних задач у різних галузях науки та техніки. У цьому розділі будуть розглянуті загальні підходи до чисельного інтегрування.

Для наближених обчислень визначених інтегралів використовують 2 типи методів:

- розкладання функції в ряд Тейлора-Маклорена з наступним інтегруванням поліному що одержаний,
- використання наближених формул.

Перший з цих методів використовується на практиці для комп'ютерних розрахунків спеціальних функцій. Другий – для розв'язання широкого кола задач інтегрування.

Приклад 2.2

Побудувати таблицю значень і графік функції

$$f(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (2.5)$$

шляхом розкладання у ряд з точністю до 10^{-6}

Розв'язання

Шляхом прямих розрахунків можна показати, що її розклад до ряду Тейлора-Маклорена має вид:

$$e^{-t^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{(k+1)} t^{2(k-1)}}{(k-1)!}. \quad (2.6)$$

Проводимо інтегрування поліному(2.6):

$$\begin{aligned} \int_0^x e^{-x^2} dx &= \int_0^x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{(k+1)} t^{2(k-1)}}{(k-1)!} dt = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \left[\int_0^x \frac{(-1)^{(k+1)} t^{2(k-1)}}{(k-1)!} dt \right] = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{(k+1)} x^{2k-1}}{(2k-1) \cdot (k-1)!} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Для укладання комп'ютерної програми розрахунків суми нескінченного збіжного ряду (2.7) одержимо рекурентну формулу для зв'язку двох сусідніх членів ряду:

$$a_k = \frac{(-1)^{(k+1)} x^{2k-1}}{(2k-1) \cdot (k-1)!}; \quad a_{k+1} = \frac{(-1)^{(k+2)} x^{2k+1}}{(2k+1) \cdot k!}; \quad (2.8)$$

звідси:

$$a_{k+1} = -a_k \cdot \frac{(2k-1)x^2}{k \cdot (2k+1)}. \quad (2.9)$$

Перший член ряду (2.7): $a_1 = x$. Звідси одержуємо алгоритм для розрахунків суми ряду із заданою точністю ε при конкретних значеннях x :

- а) задаємо значення x ; точність ε ;
- б) присвоюємо $a=x$; $k=1$ початкове значення суми $S=a$
- в) розраховуємо a_1 по формулі (2.9);
- г) дорвемо до суми: $S=S+a_1$, присвоюємо $k=k+$
- г) перевіряємо умови кінця розрахунків: $\text{abs}(a_1) < \varepsilon$
 - 1) якщо виконується – кінець розрахунків і друк S ;
 - 2) якщо ні – присвоюємо $a=a_1$ і повертаємось на крок в)

Скрипт Scilab для проведення розрахунків наведений в лістингу 2.2

Лістинг 2.2

```
function y=Sum(x)
    eps=1e-8
    a=x;
    a1=1;
    s=a;
    k=1;
    while abs(a1)>eps
        a1=-a.*(2*k-1).*x^2/k./(2*k+1);
        a=a1;
        s=s+a1;
        k=k+1;
    end
    y=s
```

```
endfunction
for i=1:11
    x(i)=0.5*(i-1);
    y(i)=Sum(x(i));
end
disp('    x        y')
[x,y]
```

У підпрограмі розраховується інтеграл у заданій точці. Цикл з переадресуванням організовано за допомогою конструкції while – end.

В основній програмі відбувається генерація значень x, розрахунок y, друк таблиці. Результати розрахунків наведені у протоколі 2.2

Протокол 2.2

x	y
0.	0.
0.5	0.4612810
1.	0.7468241
1.5	0.8561884
2.	0.8820814
2.5	0.8858663
3.	0.8862073
3.5	0.8862263
4.	0.8862269
4.5	0.8862269
5.	0.8862270

Розглянутий підхід має свої позитивні й негативні риси. З одного боку оскільки для кожної функції підбирається свій оптимальний за збіжністю ряд – процес швидко збігається і вимагає відносно невеликої кількості розрахунків. З іншого боку цей підхід вимагає значної аналітичної роботи, що попереджає складанню комп'ютерної програми. Тому його використовують основному для виконання розрахунків спеціальних функцій де такі розклади дуже добре вивчені. Для виконання масових розрахунків частіше використовується метод, що заснований на наближених, так званих квадратурних формулах.

2.3 Загальні методи побудови квадратурних формул

Нагадаємо, що визначеним інтегралом функції $f(x)$, узятому в інтервалі від a до b , називається межа, до якої прагне інтегральна сума:

$$S = \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x_i, \quad (2.10)$$

при прагненні всіх проміжків Δx_i до нуля:

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x_i \quad (2.11)$$

2.3.2 Геометричний зміст: визначений інтеграл - площа під кривій $y = f(x)$ на відрізку $[a, b]$. На рис. 2.5 це - заштрихована область.

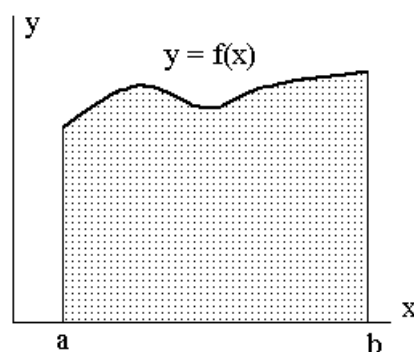


Рисунок 2.5 – Геометричний зміст визначеного інтеграла

При наближеному обчисленні визначеного інтеграла крок інтегрування $h=\Delta x$ вибирається кінцевим:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(x_i)\Delta x_i \approx \sum_{i=1}^n I_i, \quad (2.12)$$

де I_i - елемент інтегральної суми.

2.3.4 Заміняючи підінтегральну функцію на кожному кроці відрізками ліній нульового, першого й другого порядків, одержуємо наближені формули для обчислення інтеграла відповідно, методами:

- а) середніх прямокутників;
- б) трапецій;
- в) Сімпсона.

Формули для обчислення інтегралів називають квадратурними формулами. Для підвищення їхньої точності:

- ✓ відрізок інтегрування розділяють на ряд часткових інтервалів,
- ✓ усередині кожного з яких розраховують площу (інтеграл),
- ✓ загальний інтеграл знаходять підсумовуванням.

2.4 Метод середніх прямокутників

Розіб'ємо відрізок $[a,b]$ на n частин. Будемо вважати, що довжини всіх частин однакові. Одержуємо серію відрізків $[x_i, x_{i+1}] \subset [a,b]$ довжиною:

$$h = [x_{i+1} - x_i] = \frac{b-a}{n}. \quad (2.13)$$

Позначимо середини кожного відрізка:

$$x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2}, \quad (2.14)$$

і побудуємо на кінцях кожного із часткових відрізків прямокутники, верхні сторони яких проходять через середини цих відрізків (рис. 2.6)

Площа довільного i -го прямокутника дорівнює:

$$S_i = h \cdot f(x_{i+\frac{1}{2}}), \quad (2.15)$$

Інтеграл приблизно дорівнює сумі площ кожного із цих "середніх" прямокутників

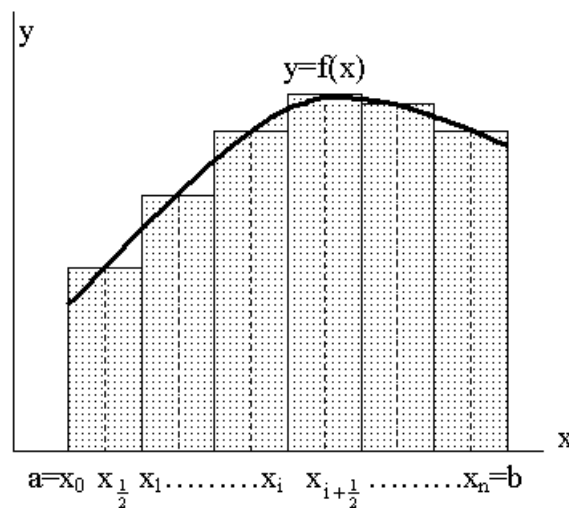


Рисунок 2.6 – Метод середніх прямокутників

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_{i+\frac{1}{2}}) \cdot h. \quad (2.16)$$

Формула (2.16) називається *квадратурною формулою середніх прямокутників*. Показано, що погрішність цієї формули для двічі диференційованої функції пропорційна h^2 , тобто, зі збільшенням кількості кроків (і відповідно, зменшення розміру кроку h) точність зростає за квадратичним законом

Загальний прийом встановлення досягнення необхідної точності при інтегруванні в практичних розрахунках:

а) Проводять процедуру інтегрування з n кроками, розраховують значення інтеграла S_1 .

б) Збільшують кількість кроків в 2 рази й знову проводять інтегрування, одержують значення S_2 .

в) Перевіряють умову :

$$|S_2 - S_1| < \varepsilon, \quad (2.17)$$

де $\varepsilon > 0$ - мале позитивне число, що обрано як міра точності.

✓ Якщо нерівність (2.17) виконується - необхідна точність досягнута, кінець обчислень.

✓ Якщо нерівність (2.17) не виконується - кількість кроків збільшується у 2 рази й знову відбуваються обчислення й перевірка (повернення на крок б) з попередньою заміною: $S_1 = S_2$)

2.5 Формула трапецій

Виконаємо наступні дії:

а) розіб'ємо відрізок інтегрування $[a,b]$ на n частин однакового розміру з відстанню між сусідніми точками $h = \frac{b-a}{n}$;

б) розрахуємо значення підінтегральної функції в точках розбивки: $y_0 = f(x_0 = a)$, $y_1 = f(x_1)$, ..., $y_n = f(x_n)$;

в) з'єднаємо точки $y_0, \dots, y_n$ ламаною лінією. Одержимо багатокутник, що наближає область під кривою (рис 2.7, заштрихована область). Площа цього багатокутника приблизно дорівнює шуканому інтегралу;

г) цій багатокутник можна розглядати, як *сукупність трапецій* однакової висоти, з'єднаних загальними основами (рис. 2.7). У цих трапеціях:

✓ основами є відрізки $[0; y_i]$,

✓ висотами є відрізки $[x_i, x_{i+1}] = h$

Площа багатокутника дорівнює сумі площ трапецій:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{y_0 + y_1}{2} \cdot h + \frac{y_1 + y_2}{2} \cdot h + \dots + \frac{y_{n-2} + y_{n-1}}{2} \cdot h + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} \cdot h = h \cdot \left(\frac{y_0}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{y_n}{2} \right). \quad (2.18)$$

Оскільки у загальній сумі, що складає площу:

- ✓ складові $\frac{y_i}{2}$ для $i = 1, \dots, n-1$ зустрічаються два рази,
- ✓ складові $\frac{y_0}{2}, \frac{y_n}{2}$ зустрічаються по одному разу,

формула (2.18) здобуває свій кінцевий вид, наведений вище.

Формула (2.18) носить назву формули трапецій. Вона широко використовується в чисельному інтегруванні. Теоретично доведено, що погрішність для підінтегральної функції, що двічі здиференційована на $[a, b]$, є пропорційною h^2 .

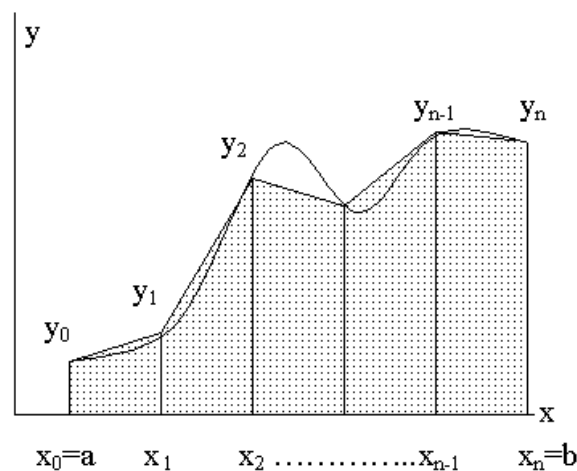


Рисунок 2.7 – Метод трапецій

Приклад 2.3

Методом комп'ютерного моделювання встановити закон, за яким змінюється погрішність розрахунку методом трапецій інтегралу (2.19) в залежності від кроку h

$$S = \int_0^1 e^x dx \quad (2.19)$$

Точне значення інтегралу $S = \exp(1)-1$

Розв'язання

Для моделювання складемо скрипт Scilab (лістинг 2.3)

Лістинг 2.3

```
//Підпрограма для розрахунків підінтегральної функції
function y=fi(x)
y=exp(x)
endfunction
// початок
n=2;// кількість інтервалів
a=0;// нижня границя інтегрування
b=1;// верхня границя інтегрування
h=(b-a)/n;//крок інтегрування
s=(fi(a)+fi(b))/2
for i=1:n-1;// цикл розрахунків суми
    x=a+h*i;
    s=s+fi(x);
end
s=s*h ;//інтеграл
s
h
f=exp(1)-1;// точне значення інтегралу
d=abs(f-s)// погрішність розрахунків
```

Порядок виконання розрахункова:

а) користуючись скриптом, проводимо серію розрахунків, змінюючи кількість

інтервалів n від 2 до 128. Дані (величини h і погрішності d) заносимо в таблицю (рис. 2.8),

б) розраховуємо логарифми величин, будуємо графік залежності $\ln(h)$ і $\ln(d)$, аналізуємо його (рис. 2.8)

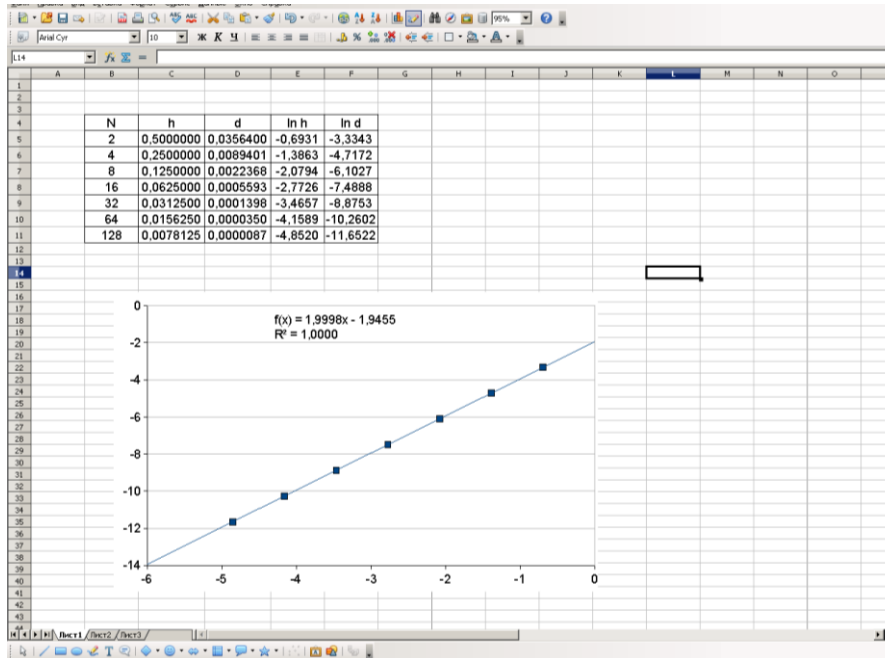


Рисунок 2.8 – Моделювання залежності погрішності від кроку інтегрування (до прикладу 2.3)

Як впливає з графіку (рис. 2.8), залежність $\ln(d)$ від $\ln(h)$ є лінійною і, після округлення, має вид:

$$\ln(d) = -1.945 + 2 \cdot \ln(h). \quad (2.20)$$

Після потенціювання:

$$d = 0.143 \cdot h^2, \quad (2.21)$$

Тобто, дійсно, погрішність інтегрування методом трапецій є пропорційною квадрату

від кроку інтегрування.

Принципово, вимога постійності кроку інтегрування не є обов'язковою, і формулу (2.18) легко перетворити до випадку різних h . При цьому, однак, користування комп'ютерною програмою становиться незручним внаслідок необхідності введення великої кількості кроків. Тому цей прийом використовують рідко.

В середовищі Scilab інтегрування методом трапецій можна виконувати за допомогою функції `inttrap(x,y)`. Для користування цей функцією необхідно попереднє створити масиви точок x і $y(x)$.

Приклад 2.4

За допомогою функції `inttrap(x,y)`, розрахувати інтеграл:

$$S = \int_1^5 \frac{x^2 + 1}{x^3 + 2x + 1} dx. \quad (2.22)$$

Розв'язання

Задаємо точність розрахунків $\varepsilon = 10^{-6}$. Скрипт для розрахунків наведено в лістингі 2.4. У скрипті в циклі з переадресацією відбуваються розрахунки інтегралу при різних кроках доти, доки різниця між двома послідовними значеннями s , що одержані при зростанні кількості кроків у 2 рази, не стане меншою за ε .

Листінг 2.4

```
a=1;
b=5;
n=10;
s1=0;
s=1;
while abs(s1-s)>1e-6
    s1=s;
```

```

h=(b-a)/n;
x=a:h:b;
y=(x.^2+1)./(x.^2+2*x+1);
s=inttrap(x,y);
n,s
n=2*n;
end

```

З результатів розрахунків, що наведені у табл. 2.1, випливає, що при кількості кроків 320 і 160 різниці в інтегралах, що розраховані, не перевищує 10^{-6} . Звідси шукане значення інтегралу складає 2,469442.

Таблиця 2.1 – Розрахунок інтегралу (2.22) при різній кількості кроків n

n	s
10	2,4699101
20	2,4695639
40	2,4694728
80	2,4694498
160	2,469444
320	2,4694426
640	2,4694422

2.6 Метод Симпсона

Виконаємо наступні дії:

а) розіб'ємо інтервал інтегрування $[a;b]$ на $2n$ частин однакової довжини $h = \frac{b-a}{2n}$;

б) на кожному відрізку $[x_i; x_{i+2}]$ довжиною $2h$ замінимо функцію $f(x)$ квадратичною параболою:

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2, \quad (2.23)$$

що інтерполуює $f(x)$ у вузлах x_i, x_{i+1}, x_{i+2} ;

в) можна довести, що для відрізка $[x_i; x_{i+2}]$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+2}} (a_0 + a_1x + a_2x^2) dx = \frac{h}{3} \cdot (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})); \quad (2.24)$$

г) підсумовуючи формули (2.24) для всіх відрізків, що складають відрізок інтегрування $[a, b]$, одержимо:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx \approx & \frac{h}{3} (f(x_0) + 4 \cdot [f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{2n-1})] + \\ & + 2 \cdot [f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{2n-2})] + f(x_{2n})) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Формула (2.25) має назву формули Сімпсона. Вона є точною для підінтегральної функції, що є поліномом третього ступеня. Для довільної функції $f(x)$, що має на $[a, b]$ неперервну похідну четвертого порядку, погрішність пропорційна h^4 . Це свідчить, що метод Сімпсона є більше точним у порівнянні з методами трапецій і середніх прямокутників.

Приклад 2.5

За допомогою пакету wxMAXIMA вивести формулу (2.24)

Розв'язання

Запишемо інтерполяційне рівняння (2.23) у формі поліному Лагранжа 2-го ступеня:



СІМПСОН ТОМАС (1710-1764)

Англійський математик, член Королівської спілки. Відомий роботами з інтерполяції і чисельного інтегрування, тригонометрії, оптики.

$$\varphi(x) = P_2(x) = \frac{(x-x_1) \cdot (x-x_2)}{(x_0-x_1) \cdot (x_0-x_2)} \cdot y_0 + \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_2)}{(x_1-x_0) \cdot (x_1-x_2)} \cdot y_1 + \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_1)}{(x_2-x_0) \cdot (x_2-x_1)} \cdot y_2 \quad (2.26)$$

У (2.26) позначено: $x_0 = x_i$, $x_1 = x_{i+1} = x_0 + h$, $x_2 = x_{i+2} = x_0 + 2h$, $y_j = f(x_j)$ ($j = 0, 1, 2$).

Подальший хід розв'язання наведено у скрипті (лістинг 2.5) і протоколі 2.5 його виконання.

Лістинг 2.5

```
x1:x0+h;
x2:x0+2*h;
define(f1(x), (x-x1)*(x-x2)/((x0-x1)*(x0-x2))*y0);
define(f2(x), (x-x0)*(x-x2)/((x1-x0)*(x1-x2))*y1);
define(f3(x), (x-x0)*(x-x1)/((x2-x0)*(x2-x1))*y2);
define(f(x), f1(x)+f2(x)+f3(x));
s:integrate(f(x), x, x0, x0+2*h);
factor(radcan(s));
```

Структура скрипту:

- ✓ у рядках 1 і 2 визначають змінні x_1 , x_2 через x_0 ;
- ✓ у рядках 3-5 визначають функції – складові поліному Лагранжа (2.26);
- ✓ у рядку 6 визначають поліном Лагранжа;

- ✓ у рядку 7 відбувається інтегрування поліному Лагранжа (результат наведено у рядку (%o7) протоколу);
- ✓ у рядку 8 відбувається спрощення й факторизація (уявлення у виді добутку) результатів інтегрування.

Як випливає з результату (рядок (%o8) протоколу 2.5), одержана формула з точністю до позначень збігається з (2.24).

Цей приклад демонструє можливості пакету wxMAXIMA для полегшення суто математичної праці – виконання складних і громіздких аналітичних обчислень, пов'язаних із виведенням корисних формул.

Метод Сімпсона використовується в середовищі Scilab за допомогою функції:

$$[I, err] = \text{intg}(a, b, \text{name} [, er1 [, er2]]),$$

де I – величина шуканого інтегралу,

err – погрішність розрахунків,

a, b – нижня й верхня границі інтегрування,

name – ім'я підінтегральної функції, яка може бути:

- ✓ зовнішньою функцією,
- ✓ таблицею значень функції в точках;

$er1, er2$ – абсолютна та відносна погрішність розрахунків (необов'язкові параметри)

У функції $\text{intg}()$ відбувається автоматичний контроль точності й підбір кількості кроків. За мовчки точність вважається на рівні 10^{-12} .

Протокол 2.5

$$(\%01) \quad x0 + h$$

$$(\%02) \quad x0 + 2 \, h$$

$$(\%03) \quad f1(x) := \frac{(-x0 + x - 2 \, h)(-x0 + x - h) \, y0}{2 \, h^2}$$

$$(\%04) \quad f2(x) := -\frac{(x - x0)(-x0 + x - 2 \, h) \, y1}{h^2}$$

$$(\%05) \quad f3(x) := \frac{(x - x0)(-x0 + x - h) \, y2}{2 \, h^2}$$

$$(\%06) \quad f(x) := \frac{(x - x0)(-x0 + x - h) \, y2}{2 \, h^2} - \frac{(x - x0)(-x0 + x - 2 \, h) \, y1}{h^2} +$$

$$\frac{(-x0 + x - 2 \, h)(-x0 + x - h) \, y0}{2 \, h^2}$$

$$(\%07) \quad \left((2 \, x0^3 + 3 \, h \, x0^2 + 4 \, h^3) \, y2 + (-4 \, x0^3 - 12 \, h \, x0^2 + 16 \, h^3) \, y1 + \right. \\ \left. (2 \, x0^3 + 9 \, h \, x0^2 + 12 \, h^2 \, x0 + 4 \, h^3) \, y0 \right) / (12 \, h^2) - \\ \frac{(2 \, x0^3 + 3 \, h \, x0^2) \, y2 + (-4 \, x0^3 - 12 \, h \, x0^2) \, y1 + (2 \, x0^3 + 9 \, h \, x0^2 + 12 \, h^2 \, x0) \, y0}{12 \, h^2}$$

$$(\%08) \quad \frac{h \, (y2 + 4 \, y1 + y0)}{3}$$

Приклад 2.6

Користуючись функцією `intg()`, розрахувати $\int_0^5 f(x) dx$, де:

$$f(x) = \begin{cases} e^{x-1}, & 0 \leq x \leq 1; \\ \frac{1}{x}, & 1 \leq x \leq 5. \end{cases} \quad (2.27)$$

Розв'язання

Графік функції (2.27) наведено на рис. 2.9

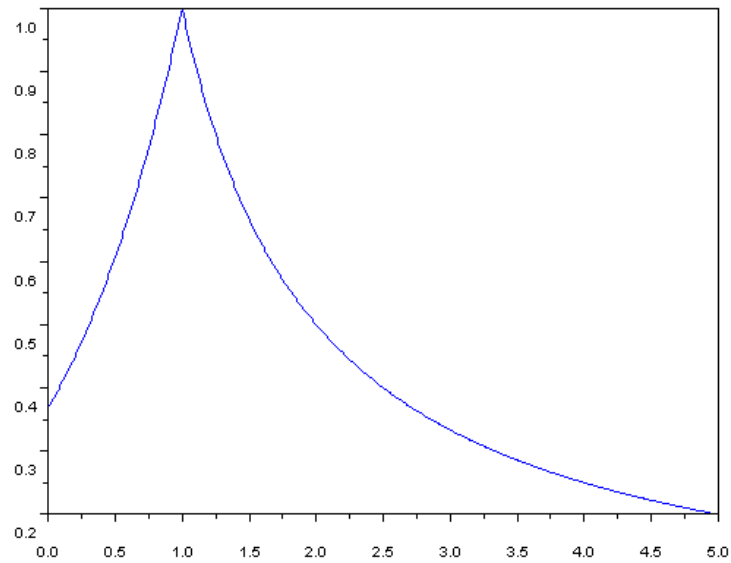


Рисунок 2.9 – Графік функції (2.27)

Скрипт для проведення розрахунків наведено в лістингу 2.6.

Лістинг 2.6

```
function y=fi(x)
    if x<=1
        y=exp(x-1)
    else
        y=1/x
    end
endfunction
[s,err]=intg(0,5,fi)
s1=intg(0,1,fi)
s2=intg(1,5,fi)
summa=s1+s2
```

У скрипті передбачено:

- ✓ розрахунок значень функції (2.27) у зовнішній підпрограмі,
- ✓ розрахунок інтегралу по усій області інтегрування (s),
- ✓ розрахунок інтегралів s1, s2 на відрізках [0;1] і [1;5] та їх суми

Результати розрахунків наведені у протоколі 2.6

Протокол 2.6

err =

7.041D-09

s =

2.2415585

err =

7.041D-09

s =

2.2415585

s1 =

0.6321206

err =

7.041D-09

s =

2.2415585

s1 =

0.6321206

s2 =

1.6094379

summa =

2.2415585

Як випливає з результатів розрахунків, інтеграл з усій області інтегрування дорівнює сумі інтегралів, тобто, розрахунки проведені вірно.

2.7 Збіжність квадратурних формул. Оцінка погрішності за правилом Рунге

Формула прямокутників (2.16) приблизно виражає визначений інтеграл через інтегральну суму при рівномірній розбивці відрізка $[a;b]$ на частині із кроком h . Формула трапецій (2.18) також є інтегральною сумою для функції $f(x)$, якщо відрізок $[a;b]$ розбити на частині:

$$\left[x_0; x_0 + \frac{h}{2}\right], \left[x_0 + \frac{h}{2}; x_1 + \frac{h}{2}\right], \dots, \left[x_i - \frac{h}{2}; x_i + \frac{h}{2}\right], \dots, \left[x_n + \frac{h}{2}; x_n\right] \quad (2.28)$$

2.7.2 Формула Сімпсона (2.25) є лінійною комбінацією формул прямокутників і трапецій:

$$I_3 = \frac{2}{3}I_1 + \frac{1}{3}I_2. \quad (2.29)$$

де I_1, I_2, I_3 – наближені значення інтегралу $\int_a^b f(x)dx$, що одержані, відповідно, по формулам прямокутників, трапецій і Сімпсона.

Внаслідок цього для будь-якої функції $f(x)$, неперервної на $[a,b]$, наближені значення інтегралу, що одержані трьома описаними методами, *прагнуть до точного значення при $h \rightarrow 0$* .

Оцінки погрішностей зазначених квадратурних формул дозволяють зробити такі висновки:

- а) для досить гладкої функції $f(x)$ більш точною є квадратурна формула Сімпсона;
- б) Для недостатньо гладкої функції доцільніше застосовувати найбільш просту квадратурну формулу, наприклад прямокутників, що вимагає мінімального обсягу обчислень.

Оцінка погрішності залишкових членів квадратурних формул вимагає знання оцінок похідних високого порядку від підінтегральних функцій і тому часто виявляється малоефективною через труднощі, що пов'язані з одержанням таких оцінок. Тому на практиці часто користуються при оцінці погрішності прийомом,

запропонованим Рунге:

а) позначимо:

- через I точне значення інтегралу $\int_a^b f(x)dx$

- через I_h наближене значення інтегралу, розраховане за допомогою квадратурних формул з кроком h ;

- через $I_{h/2}$ наближене значення інтегралу, розраховане за допомогою квадратурних формул з кроком $h/2$;

б) залишковий член кожної квадратурної формули із кроком h і $h/2$ можна записати відповідно у вигляді:

$$R_h = h^k M, \quad R_{h/2} = \left(\frac{h}{2}\right)^k \cdot M; \quad (2.30)$$

де k - порядок точності формули;

M - добуток постійної на похідну $f^{(k)}(\xi)$,

ξ - деяка точка всередині відрізка $[a,b]$;

в) обчислимо наближене значення інтеграла по одній і тій же квадратурній формулі спочатку із кроком h , а потім із кроком $h/2$. Одержимо:

$$I = I_h + h^k M, \quad I = I_{h/2} + \left(\frac{h}{2}\right)^k \cdot M; \quad (2.31)$$

г) віднімемо ці рівності:

$$I_{h/2} - I_h = M \left(\frac{h}{2}\right)^k \cdot (2^k - 1); \quad (2.32)$$

д) одержимо оцінку погрішності по методу Рунге:

$$|R_{h/2}| = |M| \cdot \left(\frac{h}{2}\right)^k = \frac{|I_{h/2} - I_h|}{2^k - 1}. \quad (2.33)$$



РУНГЕ КАРЛ ДАВІД ТОЛЬМЕ
(1856-1927)

Німецький математик, професор університетів у Геттінгені, Берліні, Ганновері. Головні праці в галузі чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь

Користуючись формулою (2.33), можна уточнити наближене значення інтегралу, додав до інтегралу оцінку погрішності:

$$I = I_{h/2} + R_{h/2} = I_{h/2} + \frac{I_{h/2} - I_h}{2^k - 1}. \quad (2.34)$$

Вираз (2.33) називають формулою *екстраполяції по Річардсону*¹⁾.

Порядок точності методів прямокутників і трапецій складає $k = 2$, а метода Сімпсона: $k=4$. Звідси одержуємо наближену оцінку погрішності по методу Рунге для формул середніх прямокутників і трапецій:

$$R_{h/2} \approx \frac{I_{h/2} - I_h}{3}; \quad (2.35)$$

і для формули Сімпсона:

$$R_{h/2} \approx \frac{I_{h/2} - I_h}{15}. \quad (2.36)$$

¹⁾ Річардсон Л'юїс Фрай (1861-1953) – англійський геофізик. В сатематиці основні праці – в галузі математичної фізики. Формула екстраполяції була запропонована їм у 1910 р.

Прийом багаторазового зменшення кроку й оцінки погрішності (2.29) можна запрограмувати й одержати алгоритм автоматичного вибору кроку h для наближеного обчислення інтеграла із заданою точністю.

2.8 Чисельний розрахунок невластних інтегралів

У практичній роботі нерідко виникає необхідність чисельних розрахунків невластних інтегралів, у першу чергу – з нескінченними границями. При цьому, якщо інтеграл збігається, те підінтегральна функція повинна мати *нульові границі* при нескінченному зростанні або зменшенні аргументу.

Принциповий підхід до розрахунків невластних інтегралів полягає у виконанні інтегрування із зростаючими границями інтегрування. Але при цьому виникає проблема зростання кількості кроків.

На рис. 2.10 на прикладі залежності $y = \exp(-x^2/2)$ наведено типовий графік підінтегральної функції для невластного інтегралу, що збігається. На залежностях такого типу можна умовно виділити області сильних змін і області слабких змін. Тоді при виконанні інтегрування достатньо в області сильних змін підібрати достатній крок інтегрування, а в області слабких змін можна використовувати значно більші кроки. При цьому відбуваються зміни верхньої та нижньої границь

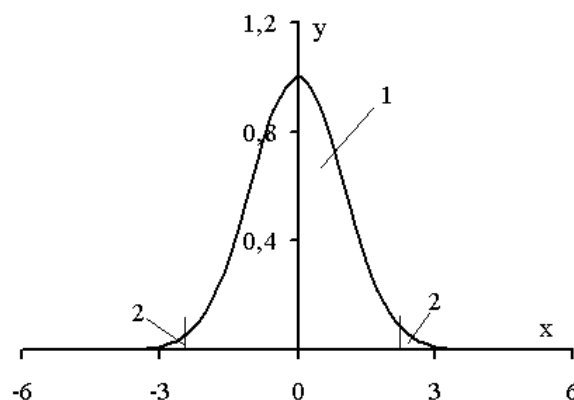


Рисунок 2.10 – Графік залежності $y = \exp(-x^2/2)$. 1 – область сильних змін, 2 – область слабких змін.

Приклад 2.7

Розрахувати чисельно невластний інтеграл Пуассона:

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx. \quad (2.37)$$

Розв'язання

Скрипт для виконання розрахунків наведено у лістингі 2.7.

У скрипті передбачено:

- ✓ визначення підінтегральної функції, як зовнішньої,
- ✓ завдання постійних границь $c1$ і $c2$;
- ✓ завдання змінних верхньої та нижньої границь інтегралу a і b ;
- ✓ виконання інтегрування в інтервалах: $[a, c1]$, $[c1, c2]$, $[c2, b]$;
- ✓ розрахунок інтегралу як суми інтегралів по трьох інтервалах.

Лістинг 2.7

```
function y=fi(x)
    y=exp(-x^2/2)
endfunction
a=-10
b=10
c1=-3
c2=3
[s1,err]=intg(c1,c2,fi)
[s2,err]=intg(a,c1,fi)
[s3,err]=intg(c2,b,fi)
s=s1+s2+s3
```

В результаті зміни границь від -10 до 10 і від -20 до 20 одержали одно й то ж

значення інтегралу $s=2.5066283$. Це свідчить про швидку збіжність інтегралу. Точне значення інтегралу Пуассона складає: $\sqrt{2 \cdot \pi} = 2,5066283$. Тобто розглянутий алгоритм дозволяє одержати значення інтегралу Пуассона з точністю до 10^{-7} .

2.9 Кубатурні формули і проблема розрахунків кратних інтегралів

Кубатурні формули або формули чисельних кубатур використовуються для чисельного обчислення двократних інтегралів.

Одним з найпростіших шляхів для одержання формул для наближеного обчислення двократних інтегралів є *повторне застосування формул інтегрування* для однократних інтегралів. Проілюструємо це на прикладі обчислення двократного інтегралу:

$$I = \iint_{(\sigma)} f(x_1, x_2) \cdot dx_1 dx_2, \quad (2.38)$$

де область σ - прямокутник $\{a \leq x_1 \leq b, c \leq x_2 \leq d\}$.

Інтеграл (2.38) можна записати у виді:

$$I = \iint_{(\sigma)} f(x_1, x_2) \cdot dx_1 dx_2 = \int_a^b dx_1 \int_c^d f(x_1, x_2) dx_2 \quad (2.39)$$

Використаємо формулу Сімпсона у трьох точках: a , $(a+b)/2$, b для обчислення зовнішнього інтеграла:

$$I = \frac{b-a}{6} \cdot \left[\int_c^d f(a, x_2) dx_2 + 4 \int_c^d f\left(\frac{a+b}{2}, x_2\right) dx_2 + \int_c^d f(b, x_2) dx_2 \right] + R_1, \quad (2.40)$$

Кожний з інтегралів всередині квадратних дужок обчислимо по формулі Сімпсона:

$$\int_c^d f(a, x_2) dx_2 = \frac{d-c}{6} \left[f(a, c) + 4f\left(a, \frac{c+d}{2}\right) + f(a, d) \right] + R_2; \quad (2.41)$$

$$\int_c^d f\left(\frac{a+b}{2}, x_2\right) dx_2 = \frac{d-c}{6} \left[f\left(\frac{a+b}{2}, c\right) + 4f\left(\frac{a+b}{2}, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, d\right) \right] + R_3; \quad (2.42)$$

$$\int_c^d f(b, x_2) dx_2 = \frac{d-c}{6} \left[f(b, c) + 4f\left(b, \frac{c+d}{2}\right) + f(b, d) \right] + R_4 \quad (2.43)$$

Підставимо (2.41)-(2.43) у (2.38), одержимо формулу Сімпсона для прямокутної області:

$$I = \frac{(b-a)(d-c)}{36} \left\{ f(a, c) + f(a, d) + f(b, c) + f(b, d) + 4 \left[f\left(a, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(b, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, c\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, d\right) \right] + 16f\left(\frac{a+b}{2}, \frac{c+d}{2}\right) \right\} + R \quad (2.44)$$

Остаточний член цей формули:

$$R = R_1 + \frac{b-a}{6} [R_2 + 4R_3 + R_4]. \quad (2.45)$$

дорівнює нулю, якщо під знаком інтегралу знаходиться свавільний поліном ступенем не вище 3.

Для R одержано оцінку через значення похідних високого порядку, яке із-зі громіздкості ми не приводимо.

Якщо область інтегрування не є прямокутною, то можна розбити цю область на часткові області, деякі з яких є прямокутні, а інші – ні (рис. 2.11). При цьому інтеграл наближено буде дорівнювати сумі інтегралів по прямокутним областям, а інтегралами від інших областей (на рис. 2.11 вони заштриховані) зневажаємо.

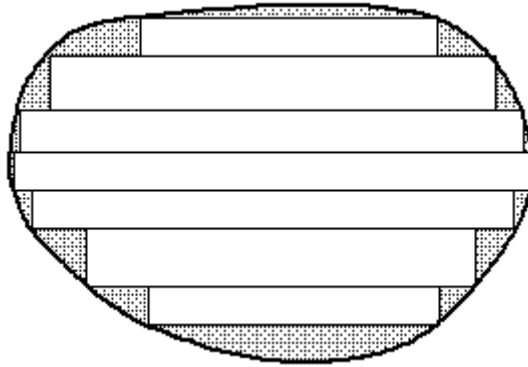


Рисунок 2.11 – Розподіл непрямокутної області

Використання комп'ютерних обчислювальних систем, зокрема Scilab, дозволяє реалізувати такий алгоритм розрахунків двократних інтегралів по свавільної зв'язної області D :

а) область ділять по осі ординат на $2n$ частин однакової висоти h_y ;
б) через кожну точку розподілу проводять серію прямих, паралельних осі абсцис
в) вздовж кожної прямої проводять інтегрування, наприклад, за допомогою функції `intg()`, одержують серію значень інтегралів при фіксованих значеннях ординат: $I(y_0), I(y_1), \dots, I(y_{2n})$;

г) до одержаної послідовності використовують будь яку формулу чисельного інтегрування (середніх прямокутників або трапецій або формулу Сімпсона) і розраховують двократний інтеграл.

Приклад 2.8

Розрахувати двократний інтеграл:

$$S = \iint_D \ln(x^2 + y^2) dx dy, \quad (2.46)$$

де область D обмежена колом, що описується рівнянням:

$$(x-2)^2 + (y-3)^2 = 1. \quad (2.47)$$

Дослідити, як оцінка погрішності по Рунге залежить від кількості точок розподілу по y .

Розв'язання

З рис. 1.12 для ординат області інтегрування: $y_{\min} = 2$, $y_{\max} = 4$. Розділимо область інтегрування по осі ординат на $k = 2n$ частин і проведемо прямі, що паралельні осі абсцис (рис. 2.12). З рівняння (2.47) знаходимо на кожній з прямої координати точок, що лежать на границі кола:

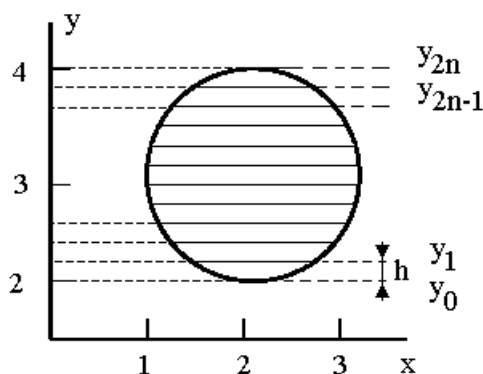


Рисунок 2.12 – Область інтегрування (до прикладу 2.8)

$$a1_i = (x_{\min})_{y_i} = 2 - \sqrt{1 - (y_i - 3)^2} \quad (2.48)$$

$$a2_i = (x_{\max})_{y_i} = 2 + \sqrt{1 - (y_i - 3)^2} . \quad (2.49)$$

Далі проводимо інтегрування вздовж усіх $n-1$ прямих по x при фіксованих y_i . У точках з номерами 0 і $2n$, за визначенням, інтеграли дорівнюють 0 .

Після цього розраховуємо двократний інтеграл по формулі Сімпсона.

Скрипт для виконання розрахунків наведено у лістингу 2.8

Лістинг 2.8

```
clear
function z=fi(x,y)//цільова функція
    z=log(x.^2+y.^2)
endfunction
function z=psi(x)// функція від 1 змінної при фіксованих y
    z=fi(x,y)
endfunction

k=20// кількість точок (змінюється)
a=2;
b=4;
h=(b-a)/k;
I=zeros(k+1,1);
for j=2:k;
    y=a+(j-1)*h;
    c=(1-(y-3).^2)^0.5;
    a1=2-c;
    a2=a+c;
    [I(j),err]=intg(a1,a2,psi);
end
```

```

S=I(1)+I(k+1);
for i = 2:2:k;
    S=S+4*I(i);
end
for i=3:2:k-1;
    S=S+2*I(i);
end
S=S*h/3;
disp('Integral')
S//друк інтегралу

```

Змінюємо k від 20 до 5120, кожного разу збільшуючи k у 2 рази. Розраховуємо різниці $\Delta I = I_{2k} - I_k$, логарифми різниць і k , будуємо графік залежності між $\ln(\Delta I)$ і $\ln(k)$. Результати наведені на скріншоті (рис. 2.13)

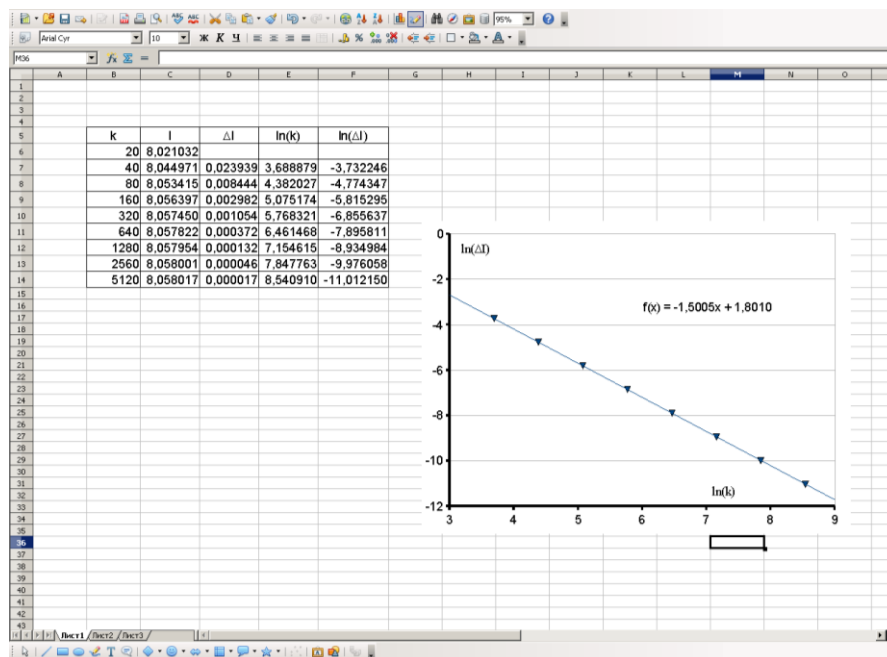


Рис. 2.13 – Залежність $\ln(\Delta I)$ від $\ln(k)$ для прикладу 2.8

З рис. 2.18 можна зробити висновок, що погрішність змінюється пропорційно k у ступені $3/2$, тобто, повільніше, шіж «одновимірний» метод Сімпсона. Значення

інтегралу з 3-ма вірними знаками: 8,058.

2.9 Розрахунок кратних інтегралів методом Монте-Карло

Як впливає з розділу 2.8, вже у випадку двократних інтегралів кубатурні формули і розрахунки становляться громіздкими. У випадку трьох- і більше кратних інтегралів ця проблема ще більш усугубляється.

У разі, коли треба розрахувати кратний інтеграл з невисокою точністю, можна скористуватися методом Монте-Карло, на основі якого можна побудувати універсальний і компактний алгоритм.

Метод Монте-Карло можна використовувати для кратних інтегралів виду:

$$\iint_G \dots \int dx_1 \dots dx_n, \quad (2.50)$$

де G – свавільна область в n -вимірному просторі. Як відомо з курсу математичного аналізу, будь-який кратний інтеграл можна привести до виду (2.41).

В алгоритмі методу:

- а) область інтегрування поміщають у прямокутну область D , так, що $G \subset D$;
- б) генерують велику кількість (N_w) випадкових чисел, які є рівномірно розподілені в середині області D ;
- в) підраховують N_p - кількість випадкових чисел, що опинилася всередині області G ;
- г) відношення

$$P = \frac{N_p}{N_w} \quad (2.51)$$

вказує наближено (асимптотичне вірно), яку частку від багатовимірного об'єму V_D області D складає область G . Оскільки багатовимірний об'єм області G – суть шукане значення інтегралу то:

$$\iint_G \dots \int dx_1 \dots dx_n \approx P \cdot V_D \quad (2.52)$$

Співвідношення (2.43) виконується тим точніше, чим більше випадкових випробувань проведено. Але точність пропорційна кореню квадратному від числа випробувань, тобто для збільшення точності у 10 разів треба збільшити кількість випробувань в 100 разів. Тому метод не забезпечує дуже високої точності, але, як правило, достатній для практики точності вдається досягнути навіть для задач великої розмірності (з декількома десятками змінних).

Приклад 2.9

Розрахувати об'єм еліпсоїду, що описується рівнянням:

$$x_1^2 + 4x_2^2 + 9x_3^2 = 1 \quad (2.53)$$

Ця задача є еквівалентної обчисленню трьохвимірного інтегралу (2.50), де область G :

$$G: x_1^2 + 4x_2^2 + 9x_3^2 \leq 1 \quad (2.54)$$

Розв'язання

а) розрахуємо параметри прямокутної області D . Очевидно, її розміри визначаються піввісями еліпсоїда, які, відповідно, дорівнюють $1,1/2$ і $1/3$. Тоді розміри складуть:

- по осі x_1 – від -1 до 1
- по осі x_2 – від $-0,5$ до $0,5$
- по осі x_3 – від $-1/3$ до $1/3$

б) Скрипт для проведення розрахунків наведено в лістингі 2.9

Лістинг 2.9

```
NW = 100000
NP = 0;

a(1) = -1;
b(1) = 1;
a(2) = -0.5;
b(2) = 0.5;
a(3) = -1 / 3;
b(3) = 1 / 3;
for i = 1:NW
    for j = 1:3
        x(j) = a(j) + (b(j) - a(j)) * rand();
    end
    s = x(1) ^ 2 + 4 * x(2) ^ 2 + 9 * x(3) ^ 2;
    if s <= 1
        NP = NP + 1;
    end
end
V_D = 1;
for i = 1:3
    V_D = V_D * (b(i) - a(i));
end
VG = V_D * NP / NW
```

в) результати розрахунків при кількості випробувань 10000 і 1000000 наведені у таблиці 2.2

Таблиця 2.2 – Результати інтегрування методом Монте-Карло у 10 паралельних випробуваннях при $NW=10000$ і $NW=1000000$, середні значення і

середньоквадратичні відхилення (СКВ)

i	NW=10000 00 NW=10000	NW=10000 00
1	0,68947	0,696361
2	0,69653	0,697996
3	0,70453	0,698533
4	0,70013	0,698329
5	0,69067	0,697503
6	0,6852	0,697663
7	0,6964	0,697681
8	0,70707	0,698909
9	0,69853	0,698876
10	0,69907	0,698619
Середнє	0,69676	0,698047
СКВ	0,00675	0,000781

З наведених результатів випливає:

а) результати розрахунків стійки: середні значенні при кількості випробувань 10000 і 1000000 відрізняються незначно,

б) точність у паралельних розрахунках є достатньо високою, але для кількості випробувань 100000 похибка суттєво нижче, ніж при NW=10000.

Точне значення об'єму еліпсоїду, розраховане за формулою:

$$V = \frac{4}{3} \pi \cdot a \cdot b \cdot c, \quad (2.55)$$

при заданих значеннях піввісей складає 0,698132, тобто, різниця – тільки у 4-му

знаку.

Контрольні запитання

- 1 Які є випадки аналітичного інтегрування в середовищі пакету MathCAD?
- 2 Які методи наближених обчислень інтегралів використовують на практиці?
- 3 Описати алгоритм одержання рекурентних формул для наближеного інтегрування
- 4 Чому при розкладанні в ряд Тейлора для розрахунків інтегралів необхідно користуватися рекурентними формулами?
- 5 Надати визначення поняття «визначений інтеграл». У чому полягає його геометричний зміст?
- 6 Що називають квадратурними формулами? Як можна підвищити їх точність?
- 7 Вивести формулу середніх прямокутників
- 8 При інтегрування методом середніх прямокутників збільшили кількість кроків у 3 рази. У кілька разів зміниться погрішність інтегрування?
- 9 Алгоритм методу середніх прямокутників
- 10 Вивести формулу трапецій
- 11 При інтегрування методом трапецій збільшили кількість кроків у 4 рази. У кілька разів зміниться погрішність інтегрування?
- 12 Алгоритм методу трапецій
- 13 Які припущення покладені до основи методу Сімпсона?
- 14 Записати формулу Сімпсона. Як можна її вивести за допомогою пакету wxMAXIMA?
- 15 При інтегрування методом Сімпсона збільшили кількість кроків у 3 рази. У кілька разів зміниться погрішність інтегрування?
- 16 Сутність методу Рунге для оцінки погрішності інтегрування
- 17 Алгоритм одержання оцінки погрішності методом Рунге
- 18 Сутність методу екстраполяції Річардсона
- 19 Який порядок точності у методів середніх прямокутників, трапецій і

Сімпсона?

20 Як можна шляхом комп'ютерного моделювання встановити точність того чи іншого методу інтегрування?

21 Для чого використовують кубатурні формули?

22 Сутність методу повторного застосування формул інтегрування.

23 Схема виведення формули Сімпсона для розрахунків подвійного інтегралу методом повторного застосування інтегрування у прямокутної області

24 Як можна розрахувати подвійний інтеграл для області, що не є прямокутною?

25 Алгоритм методу Монте-Карло для обчислення кратних інтегралів

26 Кількість випробувань методу Монте-Карло збільшити у 4 рази. Як зміниться точність розрахунків інтегралу?

27 Що може бути прийнято за міру точності розрахунків кратних інтегралів методом Монте-Карло?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 2.1

Для заданої підінтегральної функції від однієї змінної (табл.2.3), користуючись пакетом wxMAXIMA:

- а) розрахувати невизначений інтеграл;
- б) побудувати графіки підінтегральної функції та її первісної;
- в) розрахувати визначений інтеграл з зазначеними межами інтегрування, склавши програму методу Сімпсона з екстраполяцією по Річардсону
- г) Перевірити результати чисельного інтегрування за допомогою пакету Scilab.

Таблиця 2.3 – Варіанти завдання 2.1

Номер вар.	Інтеграл	Номер вар.	Інтеграл
1	$\int_{-2}^0 (x^2 + 5x + 6) \cos 2x dx.$	16	$\int_{-2}^0 (x^2 - 4) \cos 3x dx.$
2	$\int_{-1}^0 (x^2 + 4x + 3) \cos x dx.$	17	$\int_{-2}^0 (x + 2)^2 \cos 3x dx.$
3	$\int_{-4}^0 (x^2 + 7x + 12) \cos x dx.$	18	$\int_0^{\pi} (2x^2 + 4x + 7) \cos 2x dx.$
4	$\int_0^{\pi} (9x^2 + 9x + 11) \cos 3x dx.$	19	$\int_0^{\pi} (8x^2 + 16x + 17) \cos 4x dx.$

Продовження табл. 2.3

Номер вар.	Інтеграл	Номер вар.	Інтеграл
5	$\int_0^{2\pi} (3x^2 + 5) \cos 2x dx.$	20	$\int_0^{2\pi} (2x^2 - 15) \cos 3x dx.$
6	$\int_0^{2\pi} (3 - 7x^2) \cos 2x dx.$	21	$\int_0^{2\pi} (1 - 8x^2) \cos 4x dx.$
7	$\int_{-1}^0 (x^2 + 2x + 1) \sin 3x dx.$	22	$\int_0^3 (x^2 - 3x) \sin 2x dx.$
8	$\int_0^{\pi} (x^2 - 3x + 2) \sin x dx.$	23	$\int_0^{\frac{\pi}{2}} (x^2 - 5x + 6) \sin 3x dx.$
9	$\int_{-3}^0 (x^2 + 6x + 9) \sin 2x dx.$	24	$\int_0^{\frac{\pi}{4}} (x^2 + 17,5) \sin 2x dx.$
10	$\int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - 5x^2) \sin x dx.$	25	$\int_{\frac{\pi}{4}}^3 (3x - x^2) \sin 2x dx.$
11	$\int_1^2 x \ln^2 x dx.$	26	$\int_1^{e^2} \frac{\ln^2 x dx}{\sqrt{x}}.$
12	$\int_1^8 \frac{\ln^2 x dx}{\sqrt[3]{x^2}}.$	27	$\int_0^1 (x+1) \ln^2 (x+1) dx.$
13	$\int_2^3 (x-1)^3 \ln^2 (x-1) dx.$	28	$\int_{-1}^0 (x+2)^3 \ln^2 (x+2) dx.$
14	$\int_0^2 (x+1)^2 \ln^2 (x+1) dx.$	29	$\int_1^e \sqrt{x} \ln^2 x dx.$
15	$\int_{-1}^1 x^2 e^{-\frac{x}{2}} dx.$	30	$\int_0^1 x^2 e^{3x} dx.$

Завдання 2.2

Для заданого двократного інтегралу (табл. 2.4):

- а) скласти програму розрахунків інтегралу методом Монте-Карло;
привести інтеграл до виду, здатного для інтегрування;
- б) виконати розрахунки, вивчити залежність точності розрахунків від кількості оцінених, якою повинна бути кількість випробувань, щоб досягнути середнє квадратичного відхилення не менше, ніж 10^{-7}
- в) у Scilab скласти скрипт інтегрування методом Сімпсона, порівняти результати чисельного інтегрування методом Монте-Карло з величиною, що одержана методом Сімпсона

Таблиця 2.4 – Варіанти завдання 2.2

№ вар	Інтеграл	№ вар	Інтеграл
1	$\iint_D ye^{xy/2} dx dy;$ $D: y = \ln 2, y = \ln 3, x = 2, x = 4.$	16	$\iint_D (9x^2 y^2 + 48x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt{x}, y = -x^2.$
2	$\iint_D (36x^2 y^2 - 96x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt[3]{x}, y = -x^3.$	17	$\iint_D (18x^2 y^2 + 32x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^3, y = -\sqrt[3]{x}.$
3	$\iint_D y \cos xy dx dy;$ $D: y = \pi/2, y = \pi, x = 1, x = 2.$	18	$\iint_D y^2 e^{-xy/4} dx dy;$ $D: x = 0, y = 2, y = x.$
4	$\iint_D (27x^2 y^2 + 48x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^2, y = -\sqrt[3]{x}.$	19	$\iint_D (18x^2 y^2 + 32x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt[3]{x}, y = -x^2.$
5	$\iint_D y \sin xy dx dy;$ $D: y = \pi/2, y = \pi, x = 1, x = 2.$	20	$\iint_D y^2 \cos \frac{xy}{2} dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{\pi/2}, y = x/2.$
6	$\iint_D (18x^2 y^2 + 32x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^3, y = -\sqrt{x}.$	21	$\iint_D (27x^2 y^2 + 48x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt{x}, y = -x^3.$

Продовження табл. 2.4

№ вар	Інтеграл	№ вар	Інтеграл
7	$\iint_D 4ye^{2xy} dx dy;$ $D: y = \ln 3, y = \ln 4, x = \frac{1}{2}, x = 1.$	22	$\iint_D 4y^2 \sin xy dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{\frac{\pi}{2}}, y = x.$
8	$\iint_D (4xy + 3x^2 y^2) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^2, y = -\sqrt{x}.$	23	$\iint_D (12xy + 9x^2 y^2) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt{x}, y = -x^2.$
9	$\iint_D 12y \sin 2xy dx dy;$ $D: y = \frac{\pi}{4}, y = \frac{\pi}{2}, x = 2, x = 3.$	24	$\iint_D y^2 \cos xy dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{\pi}, y = x.$
10	$\iint_D \left(\frac{4}{5}xy + \frac{9}{11}x^2 y^2 \right) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^3, y = -\sqrt{x}.$	25	$\iint_D \left(\frac{4}{5}xy + \frac{9}{11}x^2 y^2 \right) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^3, y = -\sqrt{x}.$
11	$\iint_D 12y \sin 2xy dx dy;$ $D: y = \frac{\pi}{4}, y = \frac{\pi}{2}, x = 2, x = 3.$	26	$\iint_D y^2 \cos xy dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{\pi}, y = x.$
12	$\iint_D (44xy + 16x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^2, y = -\sqrt[3]{x}.$	27	$\iint_D (4xy + 176x^3 y^3) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt[3]{x}, y = -x^3.$
13	$\iint_D ye^{xy/4} dx dy;$ $D: y = \ln 2, y = \ln 3, x = 4, x = 8.$	28	$\iint_D y^2 \sin 2xy dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{2\pi}, y = 2x.$
14	$\iint_D \left(6x^2 y^2 + \frac{25}{3}x^4 y^4 \right) dx dy;$ $D: x = 1, y = x^2, y = -\sqrt{x}.$	29	$\iint_D (9x^2 y^2 + 25x^4 y^4) dx dy;$ $D: x = 1, y = \sqrt{x}, y = -x^2.$
15	$\iint_D 2y \cos 2xy dx dy;$ $D: y = \frac{\pi}{4}, y = \frac{\pi}{2}, x = 1, x = 2.$	30	$\iint_D y^2 e^{-xy/2} dx dy;$ $D: x = 0, y = \sqrt{2}, y = x.$

ЛЕКЦІЯ 3. НАБЛИЖЕНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

Мета лекції:

1 Ознайомити слухачів з базовими поняттями, що стосуються розв'язання звичайних диференціальних рівнянь, з класифікацією методів розв'язання.

2 Ознайомити слухачів з базовими методами наближеного розв'язання ЗДР методом Пікара, шляхом розкладання в ряд і методом малого параметру, їх алгоритмами і методами реалізації з використанням пакетів MathCAD і MAXIMA

План лекції

[3.1 Основні визначення. Задача Коші](#)

[3.2 Комп'ютерне аналітичне інтегрування ЗДУ](#)

[3.3 Одержання наближених числових розв'язків. Метод Пікара](#)

[3.4 Наближені розв'язки. Розкладання в ряд](#)

[3.5 Метод малого параметру](#)

[Контрольні запитання](#)

[Завдання для самостійної роботи](#)

3.1 Основні визначення. Задача Коші

Нагадаємо, що диференціальним рівнянням першого порядку називається співвідношення виду:

$$F\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) = 0, \quad (3.1)$$

де y – невідома функція від x .

Надалі будемо вважати, що рівняння (3.1) розв'язано відносно похідній і має вигляд:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (3.2)$$

Диференціальні рівняння з однієї незалежної змінної називаються *звичайними диференціальними рівняннями* (ЗДР).

Розв'язком диференціального рівняння називається функція $y(x)$, що, будучи підставлена в рівняння обертає його в тотожність.

Загальний розв'язок диференціального рівняння визначено з точністю до довільної постійної.

Рішення диференціального рівняння, що проходить через задану точку (x_0, y_0) , називається *частковим розв'язком*.

Справедлива наступна теорема: якщо в рівнянні (7.5) функція $f(x, y)$ та її частинна похідна по y є неперервними в деякій області D на площині OXY , що містить деяку точку (x_0, y_0) , то існує *єдиний розв'язок* цього рівняння $y = \varphi(x)$, що задовольняє умовам:

$$y = y_0 \text{ при } x = x_0. \quad (3.3)$$

де $M_0(x_0; y_0) \in D$;

$D = \{(x, y) | x_0 \leq x \leq x_0 + \ell, |y - y_0| \leq a\}$ – обмежена область значень x і y .

3.1.6 Умови (3.3) називаються початковими умовами, а задачу знаходження рішення рівняння (3.2), тобто функції, що задовольняє умовам (3.3) називаються *задачею Коші*.

Функція, що є частковим рішенням диференціального рівняння, називається інтегральною кривою, а процес знаходження розв'язку – інтегруванням диференціального рівняння.

Геометрична трактовка: графік часткового рішення $y = y(x)$ є інтегральною кривою, що проходить через точку $M_0(x_0, y_0)$, яка задана в області D .

Відомо, що рішення задачі Коші на відрізку $[x_0; x_0 + h]$:

✓ існує;

✓ є єдиним,

якщо функція $f(x, y)$ водночас:

➤ є *неперервною* в області D ;

➤ у цій області задовольняє *умові Ліпшиця*:

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq N \cdot |y_1 - y_2|, \quad (3.4)$$

де N – константа Ліпшиця,

$$h = \min \left\{ \ell, \frac{1}{N}, \frac{a}{M} \right\};$$

$$M = \max_D |f(x, y)|$$

Для одержання розв'язків звичайних диференціальних рівнянь використовують наступні методи:

а) *точний аналітичний розв'язок* – коли рішення одержують у виді точної аналітичної залежності за допомогою методів математичного аналізу;

б) *наближений аналітичний розв'язок* – коли рішення одержують у вигляді наближеної аналітичної залежності;

в) *чисельний розв'язок* – коли рішення одержують у вигляді табличної залежності у від x .

В наступних підрозділах будуть розглянути методи отримання табличних і чисельних розв'язків ЗДУ за допомогою сучасних комп'ютерних технологій.

3.2 Комп'ютерне аналітичне інтегрування ЗДУ

Сучасні комп'ютерні системи дозволяють одержувати аналітичні розв'язки звичайних диференціальних рівнянь (безумовно, у тих випадках, коли рівняння є таким, що інтегрується у квадратурах). Це є великою підмогою для фахівців у розв'язанні прикладних задач, що пов'язані з розв'язанням ЗДУ.

У системі wxMAXIMA можна аналітично розв'язувати:

- ✓ рівняння першого ступеня,
- ✓ рівняння 2-го ступеня
- ✓ системи ЗДУ 1 та 2 ступеня

Для одержання розв'язків ЗДУ використовуються 2 функції: `desolve()` і `ode2()`.

Функція `desolve()` (від слів *differential equation solve* розв'язання диференціальних рівнянь) дозволяє знайти частковий розв'язок лінійних диференціальних рівнянь та їх систем. Ця функція містить 2 аргументи:

- перший аргумент – рівняння або список рівнянь,
- другий аргумент – змінна або список змінних.

Перед використанням цієї функції необхідно:

1) задати рівняння у виді:

- для *першої похідної*: `'diff(f(x),x) = <права частина>`
- для *другої похідної*: `'diff(f(x),x,2) = <права частина>`

2) задати початкові умови за допомогою функції `atvalue(f(x), x=a,b)`. Для рівнянь 2-го порядку початкове значення похідної задається у виді:

$$\text{atvalue}('diff(f(x),x), x=a,b),$$

де a – початкове значення x , b – початкове значення шуканої функції при $x = a$

Характерні особливості: похідні в рівняннях слід записувати з *обов'язковим показом аргументу у функціях*, тобто, 'diff(f(x),x), а не просто 'diff(f, x), або f(x) а не просто f.

Друга функція з цієї групи називається ode2 й призначається для розв'язання звичайних диференціальних рівнянь першого або другого порядку (знаходження загального розв'язку). Її назва призведена з англійського виразу "ordinary differential equations of 1st or 2nd order» (звичайні диференціальні рівняння 1 та 2-го ступеня). Структура функції:

Ode2(рівняння, залежна змінна, незалежна змінна)

Свавільна константа в загальному розв'язку рівняння 1-го ступеня позначається через %c. У розв'язку рівняння 2-го ступеня таких констант – дві, вони позначаються, як %k1 і %k2.

Для одержання часткових рішень додатково задаються початкові або граничні умови.

Початкові умови для рівняння 1-го порядку задаються за допомогою функції[^]

$$ic1(z, x=a, y=b),$$

де z – ім'я функції – диференціального рівняння.

Початкові умови для рівняння 2-го порядку задаються функцією:

$$ic2(, 'diff(y,x)=d)$$

Для рівнянь 2-го ступеня можна задавати *граничні умови* – значення функції у 2-х точках (див. [5.4](#)). Для цього використовується функція:

$$bc2(z, x=a, y=b, x=p, y=q)$$

Приклад 3.1

Розв'язати систему рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{df}{dx} = f - 2 \cdot g - x, & f(0) = 1; \\ \frac{dg}{dx} = -f + g, & g(0) = 2. \end{cases} \quad (3.5)$$

Розв'язання

Для розв'язання використовуємо функцію `desolve`. Текст скрипта `wxMAXIMA` для розв'язання задачі наведено в лістингі 3.1. Результати розрахунків наведені у протоколі 3.1. У останньому рядку наведено результати перевірки шляхом диференціювання



ЛІПШЦЬ РУДОЛЬФ ОТТО
(1832-1903)

німецький математик. Основні праці в галузі теорії функцій і диференціальних рівнянь. Найбільш значуще відкриття – умова Ліпшиця – обмеження на поведінку приросту функції, що визначає існування і єдність розв'язків для багатьох задач теорії функцій, диференціальних рівнянь, нелінійної оптимізації.

Лістинг 3.1

```

z: ['diff(f(x), x) =
f(x) - (2*g(x) + x),
'diff(g(x), x) = -
f(x) + g(x)'];

atvalue(f(x), x=0, 1);
atvalue(g(x), x=0, 2);
desolve(z, [f(x), g(x)]);

```

Протокол 3.1

```

(%i1)
z: ['diff(f(x), x) = f(x) - (2*g(x) + x), 'diff(g(x), x) = -f(x) + g(x)];
atvalue(f(x), x=0, 1);
atvalue(g(x), x=0, 2);
desolve(z, [f(x), g(x)]);

(%o1)  $\left[ \frac{d}{dx} f(x) = -2 g(x) + f(x) - x, \frac{d}{dx} g(x) = g(x) - f(x) \right]$ 

(%o2) 1
(%o3) 2

(%o4)  $\left[ f(x) = -2 e^x \cosh(2^{1/2} x) - x + 3, g(x) = \frac{2 e^x \sinh(2^{1/2} x)}{\sqrt{2}} - x + 2 \right]$ 

(%i8) %o4, %, diff;
(%o8)  $\left[ -2 e^x \cosh(2^{1/2} x) - x + 3 = -2 e^x \cosh(2^{1/2} x) - x + 3, \right.$ 
 $\left. \frac{2 e^x \sinh(2^{1/2} x)}{\sqrt{2}} - x + 2 = \frac{2 e^x \sinh(2^{1/2} x)}{\sqrt{2}} - x + 2 \right]$ 

```

Приклад 3.2

Для диференціального рівняння:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + 3 \cdot \frac{dy}{dx} = \frac{9 \cdot e^{3x}}{1 + e^{3x}} \quad (3.6)$$

знайти:

- ✓ загальний розв'язок,
- ✓ розв'язок задачі Коші при початкових умовах: $y(0)=\ln(4)$, $y'(0)=3\cdot(1-\ln(2))$
- ✓ розв'язок крайової задачі при $y(0)=\ln(4)$, $y(1)=2$

Розв'язання

Для розв'язання використовуємо функцію `ode2()`, разом з функціями `ic2` й `bc2`. Розрахунки проводимо у безпосередньому режимі, шляхом послідовного введення у командний рядок операторів та їх виконання. Результати виконання наведені у протоколі 3.2.

У протоколі 3.2 у рядку %o3 був одержаний розв'язок, який є громіздким, але, судячи по вигляду, його можна спростити. Спрощення виконано у рядку %i4, шляхом виконання функції `radcan(%)` (за допомогою кнопки «спростити (рац)» на панелі інструментів). Останній рядок, розв'язок крайової задачі, має вид:

$$\begin{aligned}
 y = & (e^{-3x} ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \log(e^{2x} - e^x + 1) + \\
 & ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \log(e^x + 1) + \\
 & ((-e^3 - 1) \log(e^2 - e + 1) + (-e^3 - 1) \log(e + 1) + 2e^3) e^{3x} + \\
 & (e^3 + 1) \log(e^2 - e + 1) + (e^3 + 1) \log(e + 1) - 2e^3) / (e^3 - 1) \\
 & (e^{-3x} ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \log(e^{2x} - e^x + 1) + \\
 & ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \log(e^x + 1) + \\
 & ((-e^3 - 1) \log(e^2 - e + 1) + (-e^3 - 1) \log(e + 1) + 2e^3) e^{3x} + \\
 & (e^3 + 1) \log(e^2 - e + 1) + (e^3 + 1) \log(e + 1) - 2e^3) (\\
 & ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \log(e^{2x} - e^x + 1) + ((e^3 - 1)e^{3x} + e^3 - 1) \\
 & \log(e^x + 1) + \\
 & ((-e^3 - 1) \log(e^2 - e + 1) + (-e^3 - 1) \log(e + 1) + 2e^3) e^{3x} + \\
 & (e^3 + 1) \log(e^2 - e + 1) + (e^3 + 1) \log(e + 1) - 2e^3)) / (e^3 - 1)
 \end{aligned}$$

Протокол 3.2

```
(%i1) r: 'diff(y,x,2)+3*'diff(y,x)=9*exp(3*x)/(1+exp(3*x));
```

```
(%o1) 
$$\frac{d^2}{dx^2}y + 3\left(\frac{d}{dx}y\right) = \frac{9e^{3x}}{e^{3x} + 1}$$

```

```
(%i2) r1: ode2(r,y,x);
```

```
(%o2) 
$$y = e^{-3x} \left( (e^{3x} + 1) \log(e^{3x} + 1) - e^{3x} \right) - \frac{-3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)}{3e^{3x} + 3} - 3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)$$

```

```
(%i3) ic2(r1,x=0,y=log(4),'diff(y,x)=3*(1-log(2)));
```

```
(%o3) 
$$y = e^{-3x} \left( (e^{3x} + 1) \log(e^{3x} + 1) - e^{3x} \right) - \frac{-3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)}{3e^{3x} + 3} + (\log(4) - 2 \log(2) + 1) e^{-3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)}$$

```

```
(%i4) radcan(%);
```

```
(%o4) 
$$y = e^{-3x} \left( (e^{3x} + 1) \log(e^{2x} - e^x + 1) + (e^{3x} + 1) \log(e^x + 1) \right)$$

```

```
(%i5) bc2(r1,x=0,y=log(4),x=1,y=2);
```

```
(%o5) 
$$y = e^{-3x} \left( (e^{3x} + 1) \log(e^{3x} + 1) - e^{3x} \right) + \left( (6e^6 + 12e^3 + 6) \log(e^3 + 1) + (e^3 + 1)(3e^3 + 3) \log(4) + (-6e^3 - 6)(e^3 + 1) \log(2) - 18e^6 + (e^3 + 1)(3e^3 + 3) - 18e^3 \right) e^{-3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)} / \left( (e^3 - 1)(e^3 + 1)(3e^{3x} + 3) \right) - \left( (e^6 + 2e^3 + 1) \log(e^3 + 1) + (e^3 + 1) \log(4) - 2(e^3 + 1) \log(2) - 3e^6 - 2e^3 + 1 \right) e^{-3 \left( x - \frac{\log(e^{3x} + 1)}{3} \right)} / \left( (e^3 - 1)(e^3 + 1) \right)$$

```

3.3 Одержання наближених числових розв'язків. Метод Пікара

Для багатьох задач моделювання у природничих і технічних науках часто виникає необхідність отримати аналітичне рішення ЗДР при заданих початкових умовах. Оскільки точний розв'язок задачі Коші є можливим у обмеженій кількості випадків, для знаходження часткового розв'язку використовують наближені методи. Нижче будуть розглянуті 3 найбільш популярні методи: метод Пікара (метод ітерацій), метод розкладання у ряд і метод малого параметру.

Розглянемо ЗДУ 1-го порядку $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ з заданими початковими умовами $y = y_0$

при $x = x_0$. Використаємо наступні дії:

а) візьмемо інтеграли від обох частин диференціального рівняння:

$$\int_{x_0}^x \frac{dy}{dx} dx = y - y_0 = \int_{x_0}^x f(s, y(s)) ds ; \quad (3.7)$$

б) звідси:

$$y = y_0 + \int_{x_0}^x f(s, y(s)) ds . \quad (3.8)$$

Рівняння (3.8) є основою для методу послідовних наближень (ітерацій), аналогічного методу простих ітерацій Якобі для розв'язання алгебраїчних рівнянь:

а) обираємо за нульове наближення деяку функцію $y_0(x)$;

б) підставляємо її у (3.7), отримуємо перше наближення:

$$y_1(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(s, y_0(s)) ds \quad (3.9)$$

в) підставимо перше наближення у (3.8), одержимо друге наближення, і т.д.

Отримуємо ітераційний процес:

$$y_{k+1}(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(s, y_k(s)) ds \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.10)$$

Можна довести: якщо ітераційний процес (3.10) збігається (тобто, із зростанням k послідовні наближення прагнуть до деякої граничної функції), то вона є рішенням диференціального рівняння (3.2). Даний ітераційний процес носить ім'я Ш. Пікара

Проблемним у методі є вибір початкового наближення. Як завжди в ітераційних методах, чим ближче початкове наближення до рішення, тим краще воно буде збігатися до нього. Але інформація про таке рішення буває наявна рідко. На практиці, якщо про рішення нічого невідомо, за початкове наближення обирають функцію $y = y_0$.

Позитивною властивістю методу ітерацій Пікара є збіжність для усіх x , що знаходяться поблизу для початкового наближення. Це пов'язано з тим, що при розрахунках наступних наближень необхідно інтегрувати попереднє. При послідовному інтегруванні функції у цілому згладжуються, і будь-які погрішності, що пов'язані з вибором нульового наближення, округлення та інших, нівелюються.

Метод Пікара вимагає виконання значного обсягу аналітичних розрахунків. Але сучасні технології з використанням сучасних пакетів символьної та прикладної математики дозволяють автоматизувати ці розрахунки.

Приклад 3.3.

За допомогою методу Пікара знайти наближений розв'язок після 5 ітерацій рівняння:

$$\frac{dy}{dx} = -x, \quad y(0)=1. \quad (3.11)$$



ПІКАР ШАРЛЬ ЕМІЛЬ

1856-1941

Французький математик, член Французької академії. Основні роботи — в галузі теорії диференціальних рівнянь, теорії функцій комплексних змінних, по теорії алгебраїчних функцій та їх застосуванню в загальній теорії кривих і поверхонь.

Розв'язання

Неважко бачити, що аналітичний розв'язок рівняння (3.11) при згаданих початкових умовах: $y = \exp(-x)$. Це надає можливості перевірки якості наближеного рішення.

Розв'язання проведемо у середовищі wxMAXIMA . Скрипт для проведення розрахунків наведено у лістингу 3.3. , а результати – у протоколі 3.3.

Лістинг 3.3

```

y0(x) := 1 $ 'y0(x) = y0(x);
y1(x) := 1 - integrate(y0(x), x, 0, x) $ 'y1(x) = y1(x);
y2(x) := 1 - integrate(y1(x), x, 0, x) $ 'y2(x) = y2(x);
y3(x) := 1 - integrate(y2(x), x, 0, x) $ 'y3(x) = y3(x);
y4(x) := 1 - integrate(y3(x), x, 0, x) $ 'y4(x) = y4(x);
y5(x) := 1 - integrate(y4(x), x, 0, x) $ 'y5(x) = y5(x);
y(x) := exp(-x);
plot2d([y(x), y1(x), y2(x), y3(x), y4(x), y5(x)], [x, 0, 5], [y, -
2, 2]);

```

Протокол 3.3

```

(%o2)  y0(x) = 1
(%o4)  y1(x) = 1 - x
(%o6)  y2(x) =  $\frac{x^2 - 2x}{2} + 1$ 
(%o8)  y3(x) =  $1 - \frac{x^3 - 3x^2 + 6x}{6}$ 
(%o10) y4(x) =  $\frac{x^4 - 4x^3 + 12x^2 - 24x}{24} + 1$ 
(%o12) y5(x) =  $1 - \frac{x^5 - 5x^4 + 20x^3 - 60x^2 + 120x}{120}$ 
(%o13) y(x) := exp(-x)

```

До основи розрахунків покладено рекурентну формулу (3.У першому рядку

задаємо нульове наближення, що збігається з початковими умовами. Оператор, що стоїть у першому рядку після значка \$, дозволяє друкувати на екрані вираз для $y_0(x)$ у «звичайному математичному виді». У наступних рядках послідовно будемо рекурентні формули для одержання 1, 2, ..., 5 –го наближень. Наведена конструкція дозволяє друкувати формули усіх наближень. У останньому рядку наведено формулу для побудови графіку функцій, що одержані, а також істинного розв'язку $y = \exp(-x)$. Графіки наведено на рис. 3.1.

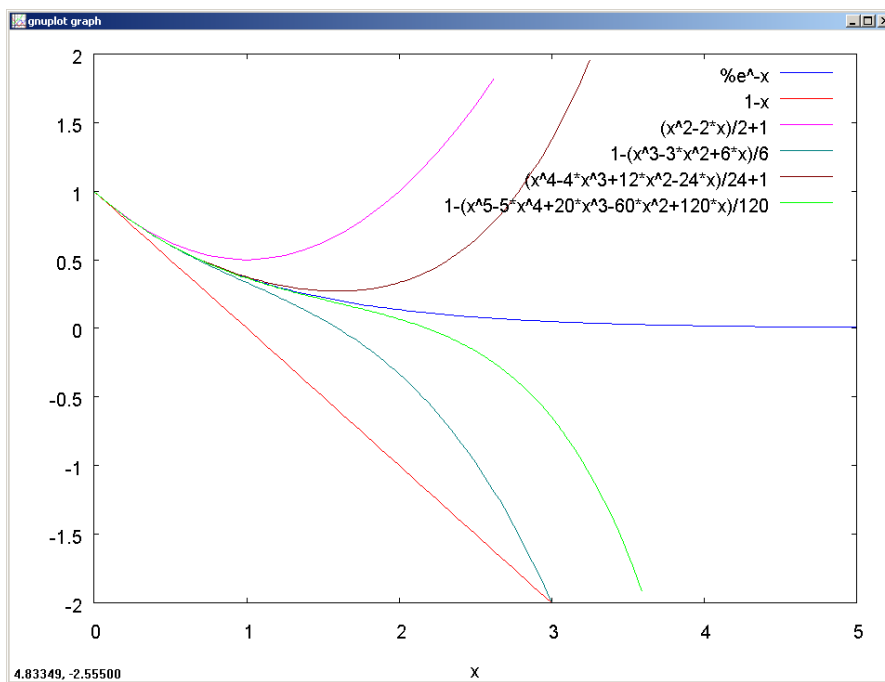


Рисунок 3.1 – Графіки справжнього розв'язку і його 1-го до 5-го наближень по методу Пікара (до прикладу 3.1)

На основі одержаних наближень розрахуємо значення y в точці $x = 1$:

$$y_1(1) = 0$$

$$y_2(1) = 0.5$$

$$y_3(1) = 0.333$$

$$y_4(1) = 0.375$$

$$y_5(1) = 0.367$$

$$\exp(-1) = 0.368$$

Як впливає з цих даних, п'яте наближення добре збігається з експонентою. Це також можна ілюструвати залежністю $y(x)$ для різних наближень (рис. 3.1): спостерігається практичне збіжність для кривих $y_4(x)$ і $y_5(x)$ на ділянці від 0 до 1.

На подальших ділянках графіків відповідність між справжнім розв'язком та його наближеннями погіршується. Як впливає з рис. 3.1, до точки $x = 2$ відповідність між $y_5(x)$ і $y = \exp(x)$ можна вважати непоганою. Але при подальшому зростанні аргументу характер поведінки експоненти та її наближення принципово змінюється: експонента прагне до межі, а її наближення починає необмежено зменшуватися. Це свідчить, що:

- ✓ будь-яке кінцеве наближення завжди носить обмежений характер,
- ✓ існують області, де це наближення становиться *поганим*.

Кінець кінцем властивість абсолютної збіжності має лише розкладання у нескінченний ряд.

Можна показати, що метод ітерацій привів для задачі (3.11) до розкладання експоненти $y = \exp(x)$ у ряд Тейлора в околі початкової умови $x=0$. Для цього слід провести необхідні розрахунки, наприклад, скористувавшись символьною функцією `taylor` пакету `wxMAXIMA`:

```
(%i16)  taylor(y(x), x, 0, 8);
(%o16)   $1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} - \frac{x^5}{120} + \frac{x^6}{720} - \frac{x^7}{5040} + \frac{x^8}{40320} + \dots$ 
```

Використано за мовчки розкладання в ряд до 8-го члену.

Метод ітерацій Пікара можна використовувати також для розв'язання:

- ✓ систем диференціальних рівнянь;
- ✓ рівнянь високого порядку.

При розв'язанні систем рівнянь по черзі в кожне з рівнянь системи підставляються нульові наближення – початкові умови, на їх основі одержують перші наближення, з яких далі одержують наближення високих порядків.

Приклад 3.4

Методом Пікара одержати наближений розв'язок системи:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_1 - x_2; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = x_1 + x_2^2; & x_2(0) = 0; \end{cases} \quad (3.12)$$

Розв'язання

а) на нульовій ітерації проводимо інтегрування, підставив за нульове наближення початкові рішення:

$$x_{10} = x_1(0) + \int_0^t [x_1(0) - x_2(0)] ds = 1 + \int_0^t [1 - 0] ds = 1 + t; \quad (3.13)$$

$$x_{20} = x_2(0) + \int_0^t (1 + 0^2) dt = t; \quad (3.14)$$

б) Далі по черзі підставляємо результати і одержуємо наближення високих порядків. Скрипт для проведення розрахунків до 4-го порядку наближення наведено у лістингі 3.4. Результати розрахунків наведені у протоколі 3.4

Лістинг 3.4

```
x10(t) := 1 $ 'x10(t) = x10(t);
x20(t) := 0 $ 'x20(t) = x20(t);
x11(t) := 1 + integrate((x10(t) - x20(t)), t, 0, t) $ 'x11(t) = x11(t);
x21(t) := integrate((x10(t) - x20(t)^2), t, 0, t) $ 'x21(t) = x21(t);
x12(t) := 1 + integrate((x11(t) - x21(t)), t, 0, t) $ 'x12(t) = x12(t);
x22(t) := integrate((x11(t) - x21(t)^2), t, 0, t) $ 'x22(t) = x22(t);
x13(t) := 1 + integrate((x12(t) - x22(t)), t, 0, t) $ 'x13(t) = x13(t);
```

```
x23(t):=integrate((x12(t)-x22(t)^2),t,0,t)$'x23(t)=x23(t);
x14(t):=1+integrate((x13(t)-x23(t)),t,0,t)$'x14(t)=x14(t);
x24(t):=integrate((x13(t)-x23(t)^2),t,0,t)$'x24(t)=x24(t);
```

Протокол 3.4

```
(%o2) x10(t)=1
(%o4) x20(t)=0
(%o6) x11(t)=t+1
(%o8) x21(t)=t
(%o10) x11(t)=t+1
(%o12) x22(t)=- $\frac{2t^3-3t^2-6t}{6}$ 
(%o14) x13(t)= $\frac{t^4-2t^3+12t}{12}+1$ 
(%o16) x23(t)=- $\frac{4t^7-14t^6-21t^5+63t^4+84t^3-126t^2-252t}{252}$ 
(%o18) x14(t)= $\frac{5t^8-20t^7-35t^6+168t^5+105t^4-420t^3+2520t}{2520}+1$ 
(%o20) x24(t)=- ( 4576 t15 - 34320 t14 + 9240 t13 + 390390 t12 -
253890 t11 - 2576574 t10 + 930930 t9 + 12297285 t8 + 1081080 t7 -
37837800 t6 - 27243216 t5 + 79459380 t4 + 90810720 t3 - 136216080
t2 - 272432160 t ) / 272432160 ( 4576 t15 - 34320 t14 + 9240 t13 +
390390 t12 - 253890 t11 - 2576574 t10 + 930930 t9 + 12297285 t8 +
1081080 t7 - 37837800 t6 - 27243216 t5 + 79459380 t4 + 90810720 t3 -
136216080 t2 - 272432160 t ) / 272432160
```

Застосування методу Пікара для розв'язання рівнянь високого порядку базується на їх зведенні до системи рівнянь першого порядку. Наприклад, треба одержати рішення рівняння 2-го порядку:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 2y \frac{dy}{dx} = 3xy, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 2. \quad (3.15)$$

Позначимо: $z = \frac{dy}{dx}$; $\frac{dz}{dx} = \frac{d^2y}{dx^2}$ і підставимо у рівняння (3.15). Одержимо систему рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dz}{dx} + 2yz = 3xy, & z(0) = y'(0) = 2; \\ \frac{dy}{dx} = z, & y(0) = 1. \end{cases} \quad (3.16)$$

Подальше розв'язання системи методом Пікара відбувається, як описано у [прикладі 3.4](#)

3.4 Наближені розв'язки. Розкладання в ряд

Інший наближений спосіб одержання розв'язків ЗДУ заснований на тому, що з диференціального рівняння шляхом диференціювання можна знайти похідні високого порядку у точці x_0 , *тобто коефіцієнти розкладання у ряд Тейлора*. Необхідна кількість членів визначається за допомогою їх послідовного обчислення і порівняння з обраним ступенем точності

Розглянемо загальну процедуру на прикладі отримання розв'язку рівняння:

$$\frac{dy}{dx} = x^2 + y^2, \quad y(0) = 1 \quad (3.17)$$

а) будемо шукати рішення у вигляді поліному 4-го ступеня:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4, \quad (3.18)$$

де коефіцієнти $a_0 \dots a_4$ підлягають визначенню.

б) підставимо у (3.24) $x = 0$ і початкову умову:

$$y(0) = a_0 = 1. \quad (3.19)$$

в) Розрахуємо похідні 1-4 порядку від виразу (3.17) при $x = 0$:

	ТЕЙЛОР БРУК (1685-1731) Англійський математик, член Королівської спілки. Знайшов загальну формулу розкладання функцій в ряд, поклав початок працям з теорії коливань, зробив внесок у теорію скінчених приростів
---	---

$$\left[\frac{dy}{dx} \right]_{x=0} = [a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3]_{x=0} = a_1 = 0^2 + 1 = 1; \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2y}{dx^2} \right]_{x=0} &= [2a_2 + 3a_3x + 12a_4x^2]_{x=0} = 2a_2 = \frac{d}{dx}(x^2 + y^2)_{x=0} = \\ &= \left(2x + 2y \frac{dy}{dx} \right)_{x=0} = 2 \cdot 0 + 2 \cdot 1 \cdot 1 = 2; \quad a_2 = 1; \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^3y}{dx^3} \right]_{x=0} &= [3a_3 + 24a_4x]_{x=0} = 3a_3 = \frac{d}{dx} \left(2x + 2y \frac{dy}{dx} \right)_{x=0} = \\ &= \left(2 + 2 \left[\frac{dy}{dx} \right]^2 + 2y \frac{d^2y}{dx^2} \right)_{x=0} = 2 + 2 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot 2 = 8; \quad a_3 = \frac{4}{3}; \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{d^4 y}{dx^4} \right]_{x=0} &= 24a_4 = \frac{d}{dx} \left(2 + 2 \left[\frac{dy}{dx} \right]^2 + 2y \frac{d^2 y}{dx^2} \right)_{x=0} = \\
 &= \left(4 \cdot \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d^2 y}{dx^2} + 2 \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d^2 y}{dx^2} + 2y \frac{d^3 y}{dx^3} \right)_{x=0} = 4 \cdot 1 \cdot 2 + 2 \cdot 1 \cdot 2 + 2 \cdot 1 \cdot 8 = \\
 &= 28; \quad a_4 = \frac{28}{24} = \frac{7}{6}
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

Звідси отримуємо наближене рішення:

$$y \approx 1 + x + x^2 + \frac{4}{3}x^3 + \frac{7}{6}x^4, \tag{3.24}$$

що непогано апроксимує дійсне рішення на невеликій відстані від початкового наближення.

Асимптотичне ітераційний метод і метод розкладання у ряд приводять до одного й того ж розкладання до ряду Тейлора, однак метод Пікара є *більш привабливим*, оскільки він у середовищі wxMAXIMA він вимагає значено менше зусиль і дозволяє отримати рішення з більшою точністю у порівнянні з розкладанням у ряд.

3.5 Метод малого параметру

Цей метод широко використовується у наближеному розв'язанні диференціальних рівнянь у фізиці та технічних науках. Сутність методу полягає у наступному:

а) нехай наявне звичайне диференціальне рівняння виду $y'(x) = f(x, y, \alpha)$, яке при заданих початкових умовах $y(0) = y_0$ і при $\alpha = 0$ має точне аналітичне рішення $y = y(x)$;

б) про величину параметру α відомо, що:

- ✓ вона є невеликою,
- ✓ але при $\alpha \neq 0$ точне розв'язання становиться *неможливим*.

Треба одержати наближений розв'язок „збуреної” задачі.

Приклад – рівняння:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x}{1 + \alpha xy}, \quad y(0) = 0 \quad (3.25)$$

Ця задача легко розв'язується при $\alpha = 0$:

$$\frac{dy}{dx} = x; \quad y = \int_0^x s ds = \frac{x^2}{2}. \quad (3.26)$$

Загальний підхід: „збурений” розв'язок шукають у вигляді суми, що містить такі складові:

- ✓ «незбурений» розв'язок (при $\alpha=0$);
- ✓ ряд по степеням параметру α .

У випадку задачі (3.25) розв'язок має вигляд:

$$y = \frac{x^2}{2} + \alpha u_1(x) + \alpha^2 u_2(x) + \alpha^3 u_3(x) + \dots, \quad (3.27)$$

де $u_1(x), u_2(x), \dots$ - деякі невідомі функції від x , що *підлягають визначенню*.

Для знаходження невідомих функцій:

а) підставимо (3.27) у (3.25):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[\frac{x^2}{2} + \alpha u_1(x) + \alpha^2 u_2(x) + \alpha^3 u_3(x) + \dots \right] = \\ = \frac{x}{1 + \alpha \cdot x \cdot \left[\frac{x^2}{2} + \alpha u_1(x) + \alpha^2 u_2(x) + \alpha^3 u_3(x) + \dots \right]}; \end{aligned} \quad (3.28)$$

б) проведемо диференціювання і помножимо на знаменник, отримуємо:

$$(x + \alpha u_1'(x) + \alpha^2 u_2'(x) + \dots) \cdot \left(1 + \frac{\alpha}{2} x^3 + \alpha^2 x u_1(x) + \alpha^3 x u_2(x) + \dots \right) = x; \quad (3.29)$$

в) підставимо у (3.34) початкові умови, одержимо:

$$\alpha u_1(0) + \alpha^2 u_2(0) + \alpha^3 u_3(0) + \dots = 0; \quad (3.30)$$

г) з (3.29) випливає, що:

$$u_1(0) = u_2(0) = u_3(0) = \dots = 0; \quad (3.31)$$

д) розкриємо дужки в (3.29) і прирівняємо до 0 коефіцієнти при степенях α , отримаємо послідовність диференціальних рівнянь:

$$\frac{du_1}{dx} + \frac{1}{2}x^4 = 0; \quad u_1(0) = 0; \quad (3.32)$$

$$\frac{du_2}{dx} + \frac{x^3}{2} \cdot \frac{du_1}{dx} + x^2 u_1 = 0; \quad u_2(0) = 0; \quad (3.33)$$

$$\frac{du_3}{dx} + \frac{x^3}{2} \frac{du_2}{dx} + x u_1 \frac{du_1}{dt} + x^2 u_2 = 0; \quad u_3(0) = 0, \dots; \quad (3.34)$$

е) розв'язуємо рівняння (3.32):

$$u_1(x) = -\frac{x^5}{10}; \quad (3.35)$$

ж) підставляємо (3.35) у (3.33) і розв'язуємо:

$$\frac{du_2}{dx} + \frac{x^3}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}x^4\right) + x^2 \cdot \left(-\frac{x^5}{10}\right) = \frac{du_2}{dx} - \frac{7x^7}{20} = 0; \quad (3.36)$$

$$u_2 = \frac{7x^8}{160}; \quad (3.37)$$

з) аналогічно знаходимо:

$$u_3 = -\frac{71x^{11}}{1760}. \quad (3.38)$$

Підставив у (3.26), одержимо наближений розв'язок:

$$y \approx \frac{x^2}{2} - \frac{\alpha x^5}{10} + \frac{7\alpha^2 x^8}{160} - \frac{71\alpha^3 x^{11}}{1760}, \quad (3.39)$$

яке при $\alpha \leq 0,1$ і $|x| \leq 1$ є близьким до істинного.

Метод малого параметру є одним з різновидів важливого чисельного методу прикладної математики – *методу збурень*. Його суть полягає у побудові наближеного рішення задач, що містять невеликі збурення у порівнянні з базовими задачами, що добре розв'язуються аналітично. У складних випадках метод обурень дозволяє знайти хоча б перший член розкладання і одержати інформацію про поведінку розв'язку у околі початкових умов.

Контрольні запитання

- 1 Надати визначення понять «звичайне диференціальне рівняння», «загальний розв'язок ЗДР»
- 2 У чому полягають особливості загального розв'язку ЗДР?
- 3 Зміст поняття «частковий розв'язок ЗДР»
- 4 Зміст теореми про єдиний розв'язок ЗДР
- 5 Зміст поняття «початкові умови»
- 6 Зміст задачі Коші для ЗДР.
- 7 Геометричне трактування розв'язання задачі Коші
- 8 У якому випадку розв'язок задачі Коші в обмеженої області буде єдиним?
- 9 Які типи методів використовують для розв'язання задачі Коші?
- 10 У чому полягає різниця між наближеним та чисельним розв'язанням задачі Коші?
- 11 За допомогою яких функцій можна призвести аналітичне інтегрування ЗДУ в середовищі wxMAXIMA?

12 Які типи рівнянь можна розв'язувати за допомогою функції `dsolve`? Як організувати розрахунки?

13 Які типи рівнянь можна розв'язувати за допомогою функції `ode2`? Як організувати розрахунки?

14 Зміст алгоритму методу Пікара.

15 Як метод Пікара зроблено ітераційним?

16 Якою позитивну властивість має метод Пікара?

17 Записати першу і другу ітерацію методу Пікара для заданого диференціального рівняння.

18 Алгоритм інтегрування по методу Пікара у середовищі `wxMAXIMA`.

19 У чому виявляється недолік наближеного методу при видаленні від околу точки інтегрування?

20 Яким чином метод Пікара можна використовувати для наближеного інтегрування систем ЗДР?

21 На чому базується використання методу Пікара для інтегрування ЗДР високих порядків?

22 Привести до виду, де можна використовувати метод Пікара, задане ЗДР 3-го порядку.

23 На чому засновано використання розкладання в ряд Тейлора для одержання розв'язку ЗДР?

24 Розв'язати задане диференціальне рівняння шляхом розкладання в ряд Тейлора з 3-ма членами розкладання.

23 У чому полягає сутність методу малого параметру?

26 Алгоритм методу малого параметру

Завдання для самостійної роботи

Для диференціальних рівнянь, що наведені у таблиці варіантів (табл. 3.1):

- а) одержати аналітичний розв'язок за допомогою відповідної функції wxMAXIMA при заданих початкових умовах,
- б) побудувати методом Пікара наближений розв'язок (порядок наближення: 4-5),
- в) побудувати графіки точного і наближеного розв'язків, визначити границі доброго наближення.

Таблиця 3.1 – Варіанти завдань

Варіант	Рівняння	Початкові умови
1	$\frac{d^2y}{dx^2} + \pi^2 \cdot y = \frac{\pi^2}{\cos(\pi \cdot x)}$	$y(0) = 3; y'(0) = 0$
2	$\frac{d^2y}{dx^2} + 4 \cdot y = 8 \cdot \operatorname{ctg}(2 \cdot x)$	$y\left(\frac{\pi}{4}\right) = 5; y'\left(\frac{\pi}{4}\right) = 4$
3	$\frac{d^2y}{dx^2} - 6 \cdot \frac{dy}{dx} + 8 \cdot y = \frac{4}{1 + e^{-2x}}$	$y(0) = 1 + 2 \cdot \ln(2),$ $y'(0) = 6 \cdot \ln(2)$
4	$\frac{d^2y}{dx^2} - 9 \cdot \frac{dy}{dx} + 18 \cdot y = \frac{9 \cdot e^{3x}}{1 + e^{-3x}}$	$y(0) = 0; y'(0) = 0$
5	$\frac{d^2y}{dx^2} + \pi^2 \cdot y = \frac{\pi^2}{\sin(\pi \cdot x)}$	$y(1/2) = 1; y'(1/2) = \frac{\pi^2}{2}$
6	$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{\pi^2} \cdot y = \frac{1}{\pi^2 \cdot \cos(x/\pi)}$	$y(0) = 2; y'(0) = 0$
7	$\frac{d^2y}{dx^2} - 3 \cdot \frac{dy}{dx} = \frac{9 \cdot e^{-3x}}{3 + e^{-3x}}$	$y(0) = 4 \cdot \ln(4),$ $y'(0) = 3 \cdot (3 \cdot \ln(4) - 1)$
8	$\frac{d^2y}{dx^2} + y = 4 \cdot \operatorname{ctg}(2 \cdot x)$	$y\left(\frac{\pi}{4}\right) = 4; y'\left(\frac{\pi}{4}\right) = 4$
9	$\frac{d^2y}{dx^2} - 6 \cdot \frac{dy}{dx} + 8 \cdot y = \frac{4}{2 + e^{-2x}}$	$y(0) = 1 + 3 \cdot \ln(3),$ $y'(0) = 10 \cdot \ln(3)$

Продовження табл. 3.1

Варіант	Рівняння	Початкові умови
10	$\frac{d^2y}{dx^2} + 6 \cdot \frac{dy}{dx} + 8 \cdot y = \frac{4 \cdot e^{-2x}}{2 + e^{2x}}$	$y(0) = 0; y'(0) = 0$
11	$\frac{d^2y}{dx^2} + 9 \cdot y = \frac{9}{\sin(3 \cdot x)}$	$y\left(\frac{\pi}{6}\right) = 4; y'\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{3 \cdot \pi}{2}$
12	$\frac{d^2y}{dx^2} + 9 \cdot y = \frac{9}{\cos(3 \cdot x)}$	$y(0) = 1; y'(0) = 0$
13	$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} = \frac{e^{-x}}{2 + e^{-x}}$	$y(0) = \ln(27); y'(0) = \ln(9) - 1$
14	$\frac{d^2y}{dx^2} + 4 \cdot y = 4 \cdot \operatorname{ctg}(2 \cdot x)$	$y\left(\frac{\pi}{4}\right) = 4; y'\left(\frac{\pi}{4}\right) = 2$
15	$\frac{d^2y}{dx^2} - 3 \cdot \frac{dy}{dx} + 2 \cdot y = \frac{1}{3 + e^{-x}}$	$y(0) = 1 + 8 \cdot \ln(2); y'(0) = 14 \cdot \ln(2)$
16	$\frac{d^2y}{dx^2} - 6 \cdot \frac{dy}{dx} + 8 \cdot y = \frac{4 \cdot e^{2x}}{1 + e^{-2x}}$	$y(0) = 0; y'(0) = 0$
17	$\frac{d^2y}{dx^2} + 16 \cdot y = \frac{16}{\sin(4 \cdot x)}$	$y\left(\frac{\pi}{8}\right) = 3; y'\left(\frac{\pi}{8}\right) = 2 \cdot \pi$
18	$\frac{d^2y}{dx^2} + 16 \cdot y = \frac{16}{\cos(4 \cdot x)}$	$y(0) = 3; y'(0) = 0$
19	$\frac{d^2y}{dx^2} - 2 \cdot \frac{dy}{dx} = \frac{4 \cdot e^{-2x}}{1 + e^{-2x}}$	$y(0) = \ln(4); y'(0) = \ln(4) - 2$
20	$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{4} \cdot y = \frac{1}{4} \cdot \operatorname{ctg}\left(\frac{x}{2}\right)$	$y(\pi) = 2; y'(\pi) = 1/2$
21	$\frac{d^2y}{dx^2} - 3 \cdot \frac{dy}{dx} + 2 \cdot y = \frac{1}{2 + e^{-x}}$	$y(0) = 1 + 3 \cdot \ln(3); y'(0) = 14 \cdot \ln(2)$
22	$\frac{d^2y}{dx^2} + 3 \cdot \frac{dy}{dx} + 2 \cdot y = \frac{e^{-x}}{2 + e^{-x}}$	
23	$\frac{d^2y}{dx^2} + 4 \cdot y = \frac{4}{\sin(2 \cdot x)}$	$y\left(\frac{\pi}{4}\right) = 2; y'\left(\frac{\pi}{4}\right) = \pi$

Продовження табл. 3.1

Варіант	Рівняння	Початкові умови
24	$\frac{d^2y}{dx^2} + 4 \cdot y = \frac{4}{\cos(2 \cdot x)}$	$y(0) = 2; y'(0) = 0$
25	$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} = \frac{e^x}{2 + e^x}$	$y(0) = \ln(27); y'(0) = 1 - \ln(9)$
26	$\frac{d^2y}{dx^2} + y = 2 \cdot \operatorname{ctg}(x)$	$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1; y'\left(\frac{\pi}{1}\right) = 2$
27	$\frac{d^2y}{dx^2} - 3 \cdot \frac{dy}{dx} + 2 \cdot y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	$y(0) = 1 + 2 \cdot \ln(2); y'(0) = 3 \cdot \ln(2)$
28	$\frac{d^2y}{dx^2} - 3 \cdot \frac{dy}{dx} + 2 \cdot y = \frac{e^x}{1 + e^{-x}}$	$y(0) = 0; y'(0) = 0$
29	$\frac{d^2y}{dx^2} + y = \frac{4}{\sin(2 \cdot x)}$	$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1; y'\left(\frac{\pi}{1}\right) = \frac{\pi}{2}$
30	$\frac{d^2y}{dx^2} + y = \frac{4}{\cos(2 \cdot x)}$	$y(0) = 1; y'(0) = 0$

ЛЕКЦІЯ 4. ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗДР ТА СИСТЕМ ЗДР

Мета лекції

- 1 Ознайомлення слухачів з класифікацією чисельних методів розв'язання ЗДР.
- 2 Ознайомлення з методом Ейлера як основою для створення методів розв'язання ЗДР
- 3 Ознайомлення з алгоритмами методів, що засновані на методі Ейлера.
- 4 Ознайомлення з алгоритмом Рунге-Кути і його модифікаціями.
- 5 Ознайомлення з багатокроковими методами розв'язання, з особливостями чисельного моделювання систем з негладкою правою частиною.

План лекції

[4.1 Класифікація чисельних методів розв'язку задачі Коші](#)

[4.2 Метод Ейлера](#)

[4.3 Модифіковані методи Ейлера. Методи корекції та прогнозу](#)

[4.4 Метод Рунге-Кути](#)

[4.5 Модифікації методу Рунге-Кути](#)

[4.6 Багатокрокові методи](#)

[4.7 Чисельне моделювання динамічних систем з негладкою правою частиною](#)

[Контрольні запитання](#)

[Завдання для самостійної роботи](#)

4.1 Класифікація чисельних методів розв'язку задачі Коші

Точний розв'язок задачі Коші є можливим лише в порівняно рідких випадках. Для знаходження часткового рішення в основному використовують чисельні методи.

Загальний принцип чисельного розв'язання: починаючи з точки (x_0, y_0) , рухаючись на обраній послідовності точок $x_0, x_1, \dots, x_n$ обчислюють наближені значення $y_0, y_1, \dots, y_n$ шуканого розв'язку задачі Коші.

Більшість чисельних методів можна представити у вигляді рекурентної формули

$$y_{i+1} = \varphi(y_{i-r}, y_{i-r+1}, \dots, y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+s}), \quad (4.1)$$

де:

φ – функція, що визначає обчислювальну схему методу;

r – кількість попередніх кроків, що використані для отримання розв'язку;

s – кількість наступних кроків, що використані для отримання розв'язку.

При цьому:

✓ якщо $r=0, 0 \leq s \leq 1$ – метод називається *однокроковим*;

✓ якщо $r \geq 1$ або $s > 0$ – метод називається *багатокроковим*.

Одно- та багатокрокові методи називають:

➤ *явними* при $s=0$;

➤ *неявними* при $s=1$;

➤ *методами із забіганням вперед* при $s > 1$.

Більшість чисельних методів розроблено для розв'язання одиничного диференціального рівняння. Але вони можуть бути застосовані для розв'язання систем рівнянь або рівнянь другого та більш високого порядків, шляхом зведення до послідовності одиничних рівнянь першого порядку, подібно тому, як це було зроблено при знаходженні наближених розв'язків у підрозділах [3.3](#) і [3.4](#).

4.2 Метод Ейлера

Найпростішим однокроковим методом наближеного чисельного розв'язання задачі Коші є метод Ейлера (*метод ламаних*). У цьому методі наближені значення часткового розв'язку $y(x_i)$ на відрізку $[x_0, x_1 = x_0 + \ell]$ визначаються за допомогою дотичних.

Нехай $A(x_0, y_0)$ – точка через яку проходить інтегральна крива AC , що є розв'язком диференціального рівняння $y'(x) = f(x, y)$ при початковій умові $y(x_0) = y_0$ (рис. 4.1). Виконаємо наступні дії:

а) проведемо через точку A дотичну AB до кривої AC . При цьому за визначенням:

$$\operatorname{tg} \alpha = y'(x_0) = f(x_0, y_0); \quad (4.2)$$

б) розрахуємо ординату точки перетину дотичної AB і прямої $y = x_1$ (рис. 4.1);

в) з прямокутного трикутника ABD маємо при $\Delta x = x_1 - x_0$:

$$y_1 - y_0 = (x_1 - x_0) \cdot \operatorname{tg} \alpha = (x_1 - x_0) \cdot f(x_0, y_0) = f(x_0, y_0) \cdot \Delta x; \quad (4.3)$$

в) будемо розглядати точку перетину y_1 за *наближене значення* розв'язку диференціального рівняння $y(x_1)$ точці x_1 , тобто $y(x_1) = y_1^{(B)} \approx y_1$ (рис. 4.1). Звідси:

$$y(x_1) \approx f(x_0, y_0) \cdot \Delta x. \quad (4.4)$$

Вираз (4.4) дозволяє одержати *наближене значення* невідомої функції у точці x_1 через *значення дотичної* цієї функції у точці x_0 та її *відстані* Δx від точки x_0 . Він буде тим точніше, чим менше величина $\Delta x = x_1 - x_0$.



ЕЙЛЕР ЛЕОНАРД

(1707-1783)

великий математик, механік.

Зробив величезний внесок майже в усі галузі математики і механіки. Перелік його праць нараховує 850 найменувань. У 1727-1741 рр та з 1766 до кінця життя жив у Росії. У 1772 р. за дорученням Катерини II їздив у Запорозьку Січ проводити геодезичні виміри. Від запорізьких козаків отримав звання Почесного козака запорізького війська.

У 1767 р. Ейлер практично осліп, але це не завадило його науковій продуктивності. Більшу частину своїх видатних математичних відкриттів (у тому числі метод ламаних, що був відкритий ним у 1768 р.) він зробив сліпим.

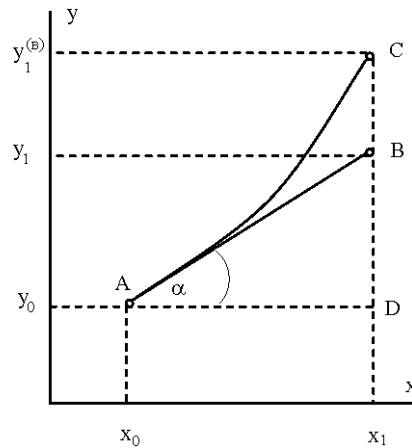


Рисунок 4.1 – Метод Ейлера

Користуючись формулою (4.4), можна побудувати наступний алгоритм наближеного числового розв'язку диференціального рівняння у точці x_f :

а) розділимо відстань від x_0 до x_f на N кроків однакової довжини h :

$$h = \Delta x = \frac{x_f - x_0}{N} ; \quad (4.5)$$

б) на першому кроці візьмемо $x_1 = x_0 + h$, обчислимо по формулі (4.4) наближене значення $y_1 = y(x_1)$

в) на другому кроці використаємо одержане значення y_1 замість y_0 у формулі (4.4) для розрахунку наближеного значення y_2 в точці $x_2 = x_1 + h$;

г) подібний процес продовжуємо далі, так, що на довільному i -му кроці буде:

$$y(x_i) \approx y(x_{i-1}) + f(x_{i-1}, y_{i-1}) \cdot h \quad (i = 1, \dots, N); \quad (4.6)$$

д) після N -го кроку одержимо шуканий наближений розв'язок у точці x_f .

Геометрична інтерпретація: рух до кінцевої точки відбувається по ламаній, що наближено передає характер інтегральної кривої (рис.4.2).

Метод Ейлера має *перший порядок* точності: погрішність є пропорційною

величині кроку h . З видаленням від початкової точки погрішності в значеннях y_i починають накопичуватись.

Приклад 4.1

Методом Ейлера знайти розв'язок диференціального рівняння $y' = y$ при початкових умовах $y(0)=1$ у точці $x = 1$, обрав кількість кроків 10. Вивчити, як буде змінюватись абсолютна погрішність із збільшенням кількості кроків. Оцінити, яку величину кроку необхідно обрати, щоб погрішність склала не більше 10^{-6} .

Розв'язання

Точний розв'язок рівняння: $y = \exp(x)$, що надає можливості розрахувати абсолютну погрішність.

Розв'язання проводимо у середовищі OOo Calc (скріншот зображено на рис. 4.3).

Хід розв'язання:

- а) у комірці F2 задаємо величину кроку;
- б) у комірках стовпця C розраховуємо поточні значення x ;
- в) у комірку D5 записуємо початкову умову $y(0)=1$;

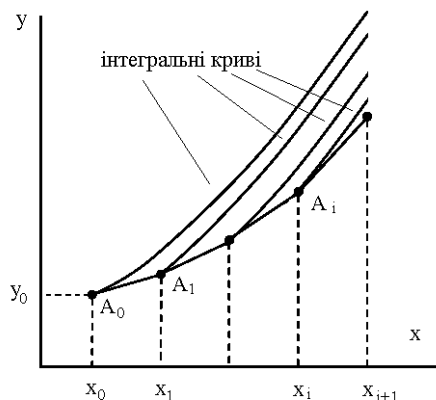


Рисунок 4.2 – Метод ламаних

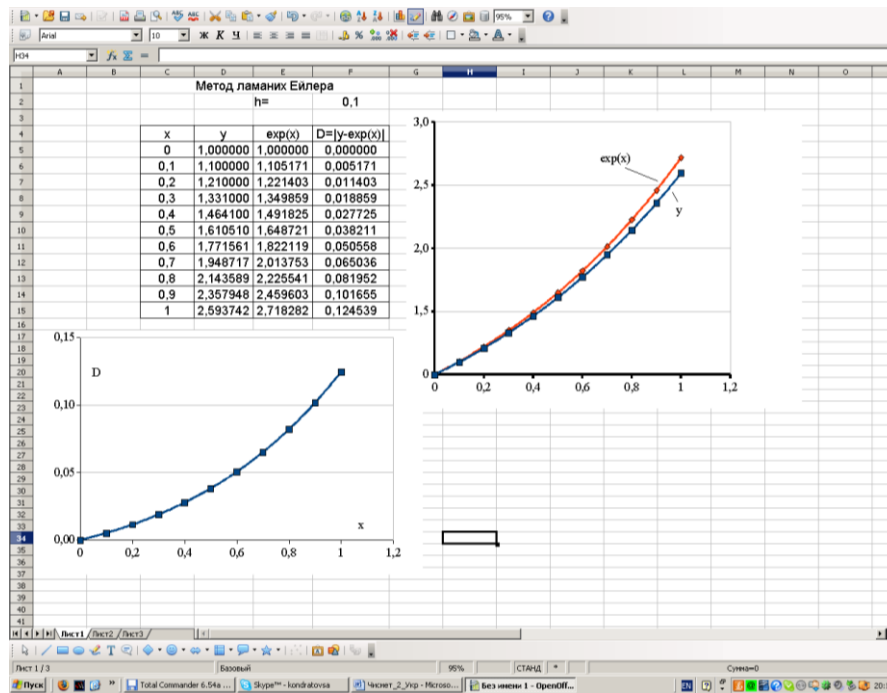


Рисунок 4.3 – Скріншот проєкту «Метод ламаних Ейлера» (до прикладу 4.1)

- г) у комірці D6 розраховуємо методом Ейлера наступне значення. Формула комірки: $=D5+FS$2*D5$. Далі протягуємо униз до кінця таблиці, отримуємо рішення;
- д) у комірках стовпця E розраховуємо значення функції $\exp(x)$;
- е) у комірках стовпця F розраховуємо абсолютну погрішність;
- ж) за одержаними даними будуємо графіки функцій і залежності абсолютної погрішності D від величини x .

Другу частину завдання виконуємо аналогічно, змінюючи величину кроку у ряду від 0,05 до 0,01. Відповідно, збільшуємо кількість кроків і знаходимо величину абсолютної погрішності. Будуємо таблицю залежності h від D та десятинні логарифми цих значень (табл. 4.1)

Таблиця 4.1 – Результати рішення задачі 4.2.7

h	D	-lg(h)	-lg(D)
0,1	0,1245	1	0,904831
0,05	0,06498	1,30103	1,18722
0,025	0,03322	1,60206	1,4786
0,02	0,02669	1,69897	1,573651
0,0125	0,01679	1,90309	1,774949

За даними таблиці 4.1 будемо графік залежності $-\lg(D)$ від $-\lg(h)$, що являє собою добру лінійну залежність (рис. 4.4). Будемо лінійний тренд і знаходимо його рівняння (рис. 4.4):

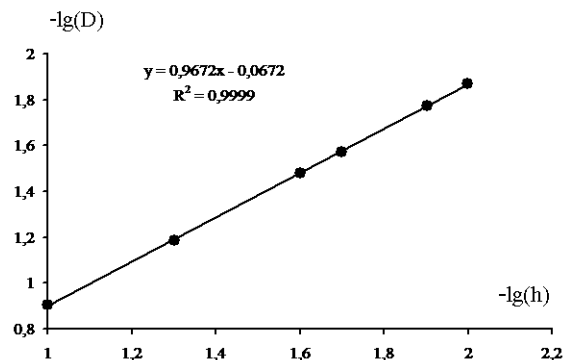
$$-\lg(D) = -0,9672 \cdot \lg(h) - 0,0672 \quad (4.7)$$

Користуючись цим рівнянням, підставимо $D = 10^{-6}$; $-\lg(d) = 6$:

$$6 = -0,9672 \cdot \lg(h) - 0,0672.$$

Розв'язок : $-\lg(h) = 5,95$; $h = 1,17 \cdot 10^{-6}$. Необхідна кількість кроків:

$$N = 1 / 1,17 \cdot 10^{-6} = 8,5 \cdot 10^5$$

Рисунок 4.4 – Залежність $-\lg(D)$ від $-\lg(h)$. До прикладу 4.1

Тобто, щоб отримати рішення з *погрішністю* меншою за 10^{-6} необхідно зробити майже *1000000 кроків*, що забагато для практичного використання.

Внаслідок низької точності метод Ейлера „у чистому вигляді” на практиці не використовують. Але він є наочний для показу шляхів побудови рішень диференціальних рівнянь. Його ідеї покладені до основи більш ефективних методів.

4.3 Модифіковані методи Ейлера. Методи корекції та прогнозу

Однією з модифікацій метода Ейлера є *модифікований метод Ейлера-Коші*. В ньому на $i+1$ – му кроці:

а) визначають наближення, як у методі Ейлера:

$$y_{i+1}^* = y_i + h \cdot f(x_i, y_i); \quad (4.8)$$

б) розраховують у цій точці напрямок поля:

$$f(x_{i+1}, y_{i+1}^*); \quad (4.9)$$

в) розраховують нове наближення по формулі:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)}{2}. \quad (4.10)$$

Приклад 4.2

Знайти за допомогою модифікованого метода Ейлера-Коші розв'язок рівняння $y' = y$; $y(0) = 1$ з [прикладу 4.1](#) і оцінити абсолютну погрішність.

Розв'язання

Скрипт для розв'язання задачі наведено у лістингі 4.2.

Лістинг 4.2

```

n=input('К-ть точок')
xf = 1;
h = xf / n;
y0 = 1;
for i = 1: n
    y1 = y0 + h * y0;
    y2 = y0 + h / 2 * (y1 + y0);
    y0 = y2;
end
y0

```

За допомогою цей програми:

а) розраховуємо серію значень рішення при величині кроку від 1/10 до 1/160,
 б) розраховуємо абсолютну погрішність по формулі $\Delta = |y - \exp(1)|$. Розрахунки наведено у табл. 4.2;

в) за даними таблиці будуємо залежність $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ (рис. 4.5) і одержуємо рівняння прямої, що проходить через точки

Таблиця 4.2 – Залежність $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ для задачі (3.7.2)

h	y	$\Delta = y - \exp(1) $	$\ln(h)$	$\ln(\Delta)$
0,1	2,714081	0,004201	-2,30259	-5,47244
0,05	2,717191	0,001091	-2,99573	-6,82087
0,025	2,718004	0,000278	-3,68888	-8,18831
0,0125	2,718212	7,01E-05	-4,38203	-9,5652
0,00625	2,718264	1,76E-05	-5,07517	-10,9468

Як випливає з рис. 4.5, тангенс куту нахилу залежності $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ практично дорівнює 2. Тобто погрішність модифікованого методу Ейлера-Коші зменшується не за лінійним, а за квадратичним законом.

Інша модифікація методу Ейлера – *ітераційний метод Ейлера-Коші*:

а) методом Ейлера одержують грубе початкове наближення:

$$y_{i+1}^{(0)} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i); \quad (4.11)$$

б) далі відбувається ітераційний процес:

$$y_{i+1}^{(k)} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k-1)})], \quad k = 1, 2, \dots; \quad (4.12)$$

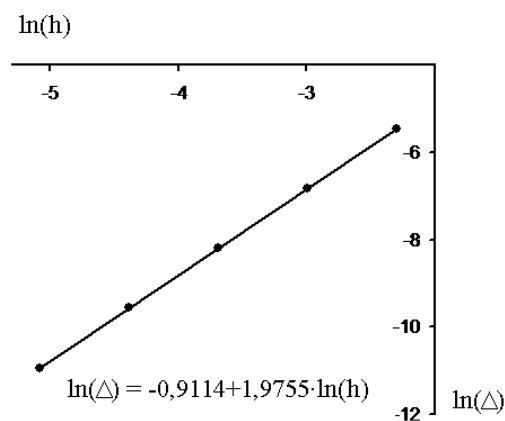


Рисунок 4.5 - Залежність $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ (за даними табл. 4.2)

в) ітераційний процес продовжують до виконання критерію збіжності:

$$|y_{i+1}^{(k)} - y_{i+1}^{(k+1)}| < \varepsilon; \quad (4.13)$$

де ε - попереднє обране мале позитивне число, що характеризує точність.

Приклад 4.3

Знайти за допомогою ітераційного метода Ейлера-Коші розв'язок рівняння $y' = y$; $y(0) = 1$ з прикладу 4.1 і оцінити абсолютну погрішність.

Розв'язання

Скрипт для розв'язання задачі наведено у лістингі 4.3.

Лістинг 4.3

```
n = input('Кількість точок')
xf = 1;
h = xf / n;
y0 = 1;
eps = 0.00000001
for i = 1:n
    y1 = y0 + h * y0;
    y2 = y0 + h / 2 * (y1 + y0);
    while abs(y1 - y2) > eps
        y1 = y2;
        y2 = y0 + h / 2 * (y1 + y0);
    end
    y0 = y2;
end
y0
```

Проводимо розрахунки, що є аналогічними до прикладу 4.2, будуємо графік залежності $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ (рис. 4.6), одержуємо рівняння лінії.

Як впливає з рис. 4.6, у випадку ітераційного методу погрішність зменшується за квадратичним законом, аналогічно модифікованому методу. Але кількість розрахунків у ітераційному процесі значено більше.

Наведені модифікації метода Ейлера носять назви *методів прогнозу і корекції*. На першому етапі відбувається *прогноз* – розрахунок грубого наближення. На другому

етапи – *корекція прогнозу* за формулами (4.10) або (4.12). Обидві модифікації мають *другий порядок* точності (погрішність є пропорційною h^2) що й продемонстровано на прикладах.

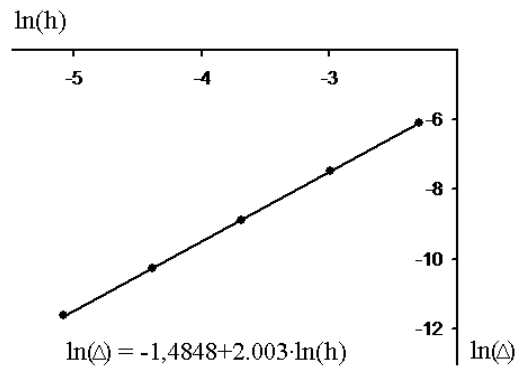


Рисунок 4.6 - Залежність $\ln(\Delta)$ від $\ln(h)$ для ітераційного метода Ейлера-Коші

Метод Ейлера і його модифікації узагальнюються на розв'язок систем диференціальних рівнянь. У цьому випадку розрахунки за формулами (4.10) або (4.11; 4.12) відбуваються для кожного рівняння системи.

Приклад 4.4

За допомогою модифікованого метода Ейлера-Коші розв'язати систему рівнянь у точці $t = 1$:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y + x, & x(0) = 1; \\ \frac{dy}{dt} = t \cdot x, & y(0) = 0; \end{cases} \quad (4.14)$$

Побудувати інтегральні криві.

Розв'язання

Скрипт для проведення розрахунків наведено в лістингі 4.4. Особливості:

- ✓ розрахунок правих частин системи винесено у підпрограму-функцію func;
- ✓ виведення результатів відбувається у масиви tau (час) і C (величини x і y);
- ✓ на екран виводяться графіки залежності y та x від часу (рис. 4.7) . В разі необхідності результати можуть бути виведені на друк або використані з іншими цілями в режимі безпосередніх розрахунків після виконання програми.

Лістинг 4.4

```
function [f]=func(x, t)//Праві частини системи
    f(1) = x(1) + x(2)
    f(2) = t * x(1)
endfunction
t_fin = 1;//кінцева точка часу
n = 100;
m = 2;
C=zeros(n+1,m);//Створення і обнуління масивів
tau=zeros(n+1);//вихідних даних
x0(1) = 1;
C(1,1)=x0(1);
x0(2) = 0;
C(1,2)=x0(2);
tau(1)=0;
h = t_fin / n;
for i = 1:n;
    for j = 1:m;
        x(j) = x0(j);
    end
    t = (i - 1) * h;
    [f]=func (x, t);
```

```
for j = 1:m
    f1(j) = f(j);
    x1(j) = x0(j) + h * f1(j);
    x(j) = x1(j);
end
t = i * h;
tau(i+1)=t;
[f]=func(x, t);
for j = 1:m
    x0(j) = x0(j) + (f1(j) + f(j)) / 2 * h;
    C(i+1,j)=x0(j);
end
end
plot(tau,C) // графіки
```

4.4 Метод Рунге-Кути

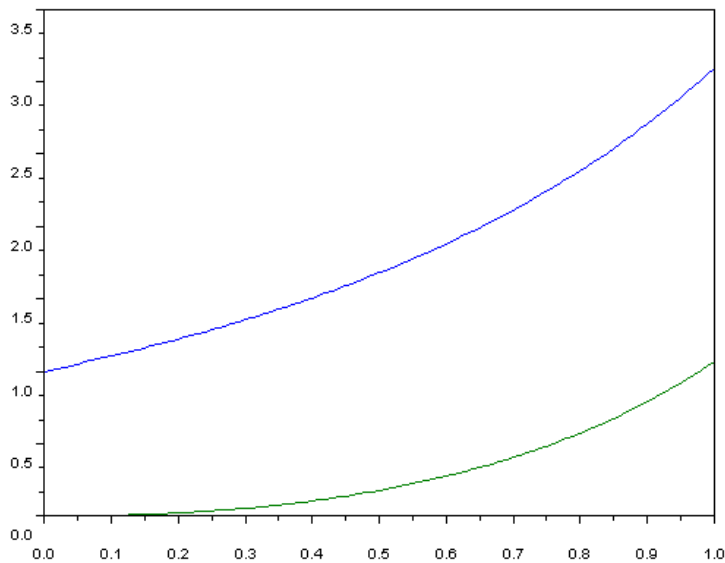
Метод Рунге-Кути¹⁾ дозволяє будувати схеми розв'язків різного порядку точності й найбільш часто використовується в практичних розрахунках.

Схема методу 2-го порядку. Нехай зроблено i кроків методу й одержано наближене рішення у точці (x_i, y_i) . Вважаємо у загальному випадку, що кроки методу не є постійними, тому на i -му етапі використовується крок величиною h_i , який можна задати за деяким правилом (у тому числі, як частковий випадок, вважати його постійним);

а) у точці (x_i, y_i) розраховуємо:

$$k_1 = h_i \cdot f(x_i, y_i) = h_i \cdot f_i, \quad (4.15)$$

¹⁾ Кута Мартін Вільгельм (1867-1944) – німецький фізик і математик, у 1901 р. разом з К.Рунге запропонував метод чисельного розв'язання ЗДУ

Рисунок 4.7 – Графіки залежності x і y від часу (до прикладу 4.4)

б) одержане значення k_1 використовуємо для виконання дробового кроку:

$$k_2 = h_i \cdot f(x_i + \alpha \cdot h_i, y_i + \beta \cdot k_1); \quad (4.16)$$

де α, β - невідомі числа, що підлягають визначенню;

в) розраховуємо нову величину y_{i+1} як лінійну комбінацію:

$$y_{i+1} = y_i + \gamma_1 \cdot k_1 + \gamma_2 \cdot k_2, \quad (4.17)$$

де γ_1 і γ_2 підлягають визначенню;

г) для визначення невідомих коефіцієнтів розкладемо k_1 і k_2 у ряд Тейлора в околі точці (x_i, y_i) :

$$k_1 = h_i \cdot f_i, \quad k_2 = h_i \cdot \left(f_i + \alpha \cdot h_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x} + \beta \cdot k_1 \cdot \frac{\partial f_i}{\partial y} + \dots \right); \quad (4.18)$$

д) підставимо (4.18) у (4.17):

$$y_{i+1} = y_i + (\gamma_1 + \gamma_2) \cdot h_i \cdot f_i + \gamma_2 \beta h_i^2 \frac{\partial f_i}{\partial y} + \gamma_2 \alpha h_i^2 \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x} + \dots; \quad (4.19)$$

е) розкладемо у ряд Тейлора точний розв'язок задачі Коші $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ на інтервалі $[x_i; x_{i+1}]$ довжиною $h_i = x_{i+1} - x_i$:

$$y_{i+1} = y_i + h y'_i + \frac{1}{2} h^2 y''_i + \dots; \quad (4.20)$$

ж) порівнюючи (4.19) та (4.20), одержуємо:

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1; \quad \gamma_2 \beta = \frac{1}{2}; \quad \gamma_2 \alpha = \frac{1}{2}. \quad (4.21)$$

Величину α можна обрати *свавільно*. Частіше за все обирають $\alpha = 1/2$ або $\alpha = 1$. Але при будь-яких значеннях α не вдається позбавитись членів, що містять h_i^3 . Це свідчить, що точність методу відповідає другому порядку.

Підставив у (4.17) $\alpha = 1/2$ і вирази (4.21), отримаємо обчислювальну схему методу Рунге-Кутти другого порядку:

$$y_{i+1} = y_i + h_i \cdot f\left(x_i + \frac{1}{2} h_i; y_i + \frac{1}{2} h_i f_i\right). \quad (4.22)$$

Геометрична інтерпретація формули (4.22):

а) спочатку рухаємось на половинному кроці по ламаній Ейлера:

$$y_{i+\frac{1}{2}} = y_i + \frac{h}{2} \cdot f_i; \quad (4.23)$$

б) у точці, що знайдена, обчислюємо нахил інтегральної кривої:

$$y'_{i+\frac{1}{2}} = f\left(x_i + \frac{h_i}{2}, y_{i+\frac{1}{2}}\right); \quad (4.24)$$

в) по цьому нахилу визначаємо приріст функції на цілому кроці:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} = y'_{i+\frac{1}{2}}. \quad (4.25)$$

Це ілюстровано на рис. 4.8.

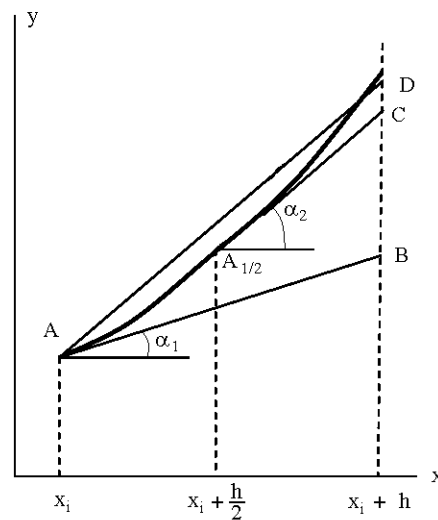


Рисунок 4.8 – Геометрична інтерпретація методу Рунге-Кути.

Позначення:

AB – дотична до інтегральної кривої у точці (x_i, y_i) ;

$A_{1/2}C$ – дотична до інтегральної кривої у точці $\left(x_i + \frac{h_i}{2}, y_{i+\frac{1}{2}}\right)$;

AD – крок методу Рунге-Кути 2-го порядку

При $\alpha = 1$ формула методу Рунге-Кути другого порядку має вид:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h_i}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_i + h_i, y_i + h_i \cdot f_i)], \quad (4.26)$$

тобто, збігається з формулою (4.10) методу Ейлера-Коші.

Аналогічно будуються обчислювальні схеми Рунге-Кути високих порядків. Однак у цьому випадку вивід є вельми громіздкий.

Найбільш часто у обчислювальній практиці реалізується метод Рунге-Кути 4-го порядку точності. Його часто за замовчуванням в літературі часто називають «метод Рунге-Кути», без вказівки порядку точності. Базова формула для диференціального рівняння першого порядку має вид:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{P_1 + 2 \cdot (P_2 + P_3) + P_4}{6}, \quad (4.27)$$

де:

$$\begin{aligned} P_1 &= f(x_i, y_i) \cdot h_i; & P_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{P_1}{2}\right) \cdot h_i \\ P_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{P_2}{2}\right) \cdot h_i; & P_4 &= f(x_i + h, y_i + P_3) \cdot h_i \end{aligned} \quad (4.28)$$

Достоїнства методу Рунге-Кути 4-го порядку:

- ✓ він *легко програмується*,
- ✓ обчислювальний процес є *стійким* для широкого кола задач,
- ✓ у методі можна легко змінювати величину кроку,
- ✓ гранична абсолютна *погрішність* на кожному кроці мала і *пропорційна* h^4 .

На практиці для оцінки погрішності методу Рунге-Кути, за аналогією з чисельним інтегруванням, використовують правило Рунге: щоб наближено оцінити погрішність необхідно провести:

- а) розрахунок $y(x_i)$ з кроком h ;
- б) розрахунок $y_{h/2}(x_i)$ з кроком $h/2$;
- в) оцінити абсолютну погрішність за допомогою рівняння:

$$|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))| \approx \frac{|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))|}{2^p - 1}, \quad (4.29)$$

де p – порядок точності методу.

Для методу Ейлера-Коші, який фактично є методом Рунге-Кути 2-го порядку точності рівняння (4.29) має вид:

$$|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))| \approx \frac{|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))|}{3}, \quad (4.30)$$

Для методу Рунге-Кути 4-го порядку рівняння (3.75) переходить у:

$$|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))| \approx \frac{|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))|}{15}. \quad (4.31)$$

Приклад 4.5

На прикладі розв'язання рівняння:

$$y' = 2x - y, \quad y(0) = 1 \quad (4.32)$$

в точці $x=1$ встановити характер залежності абсолютної погрішності методу Рунге-Кути від величини кроку інтегрування h . Побудувати графік інтегральної кривої.

Розв'язання:

Для розв'язання укладаємо програму скрипт Scilab (лістинг 4.5).

Лістинг 4.5

```
function z=func(x,y)
    z=2*x-y
```



```
endfunction
x0 = 0;
y0 = 1;
xf = 1;
n=input('Кількість кроків?')
xx=zeros(n+1);
yy=zeros(n+1);
xx(1)=x0;
yy(1)=y0;
//**** Розрахунок кроку
h=(xf-x0)/n;
//***** Цикл розрахунків
for i=1:n
    x=x0+(i-1)*h;
    p1=func(x,y0)*h;
    p2=func(x+h/2,y0+p1/2)*h;
    p3=func(x+h/2,y0+p2/2)*h;
    p4=func(x+h,y0+p3)*h;
    y0=y0+(p1+2*(p2+p3)+p4)/6;
    xx(i+1)=x+h;
    yy(i+1)=y0;
end
xx(n+1),yy(n+1)
```

За допомогою цього скрипту виконали інтегрування рівняння при кількості кроків 100 і 1000. Одержані величини уу збігалися до 7 знаку і склали 1,1036383. Цю величину вважали за точний розв'язок x_T

Далі проводимо інтегрування при кількості кроків 1-6, розраховували погрішність $\Delta = |x - x_T|$, будували графік залежності $\ln(\Delta)$ від $\ln h$. Як впливає з рис. 4.9, ця залежність є прямолінійною з кутовим коефіцієнтом 4,4. Це свідчить, що точність

розв'язку є пропорційною $h^{4,4}$, що є близьким до теоретичної оцінки h^4 .

Для побудови інтегральної кривої після виконання скрипту з кількістю кроків $n = 100$ у безпосередньому режимі роботи Scilab уводимо команду `plot(xx,[yy])`. Графік наведено на рис. 4.10

Метод Рунге-Кути можна використовувати для розв'язання систем диференціальних рівнянь першого порядку. При цьому в усіх алгоритмах $Y_0, P_1, P_2, \dots, P_4$ – це масиви, розмір яких дорівнює кількості рівнянь.

4.5 Модифікації методу Рунге-Кути

Важливими модифікаціями методу Рунге-Кути є:

- ✓ методи з автоматичним вибором кроку;
- ✓ методи розв'язку систем диференціальних рівнянь першого порядку;
- ✓ методи розв'язку диференціальних рівнянь вищих порядків.

Методи з автоматичним вибором кроку. У простішому випадку можна задатися точністю ε і обирати величину кроку з умови:

$$\frac{|y(x_i) - y_{h/2}(x(i))|}{15} < \varepsilon, \quad (4.33)$$

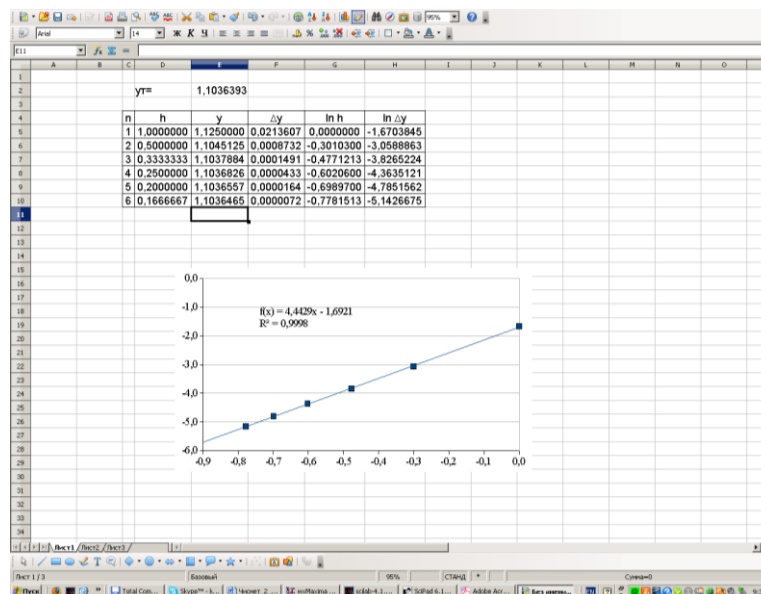


Рисунок 4.9 – Розрахунок порядку точності (до прикладу 4.5)

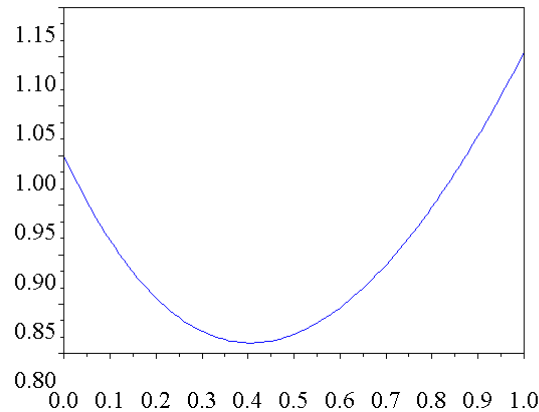


Рисунок 4.10 – Графік залежності y від x для рівняння (4.32)

Алгоритм методу може бути таким:

- а) свавільно обирається величина кроку (або кількість кроків на інтервалі), наприклад, $h=0,1$;
- б) знаходиться розв'язок рівняння через 4-5 кроків від початкової точки при цій величині кроку;
- в) величина кроку зменшується у 2 рази, знов знаходиться розв'язок рівняння у тієї ж самої точці по координаті x ;
- г) перевіряють виконання умови (4.33). якщо вона виконується - продовжують подальші розрахунки з кроком h або $h/2$ (для гарантування точності).

Якщо умова (4.33) не виконується – заміняють h на $h/2$ і повертаються на етап в).

Недоліком розглянутого методу є те, що величина кроку корегується лише один раз на протязі розрахунків і вимагає виконання значної кількості розрахунків. Цих недоліків позбавлені методи з автоматичним вибором довжини кроку на кожній стадії розрахунків – методи *Рунге-Кути-Мерсона* і *Рунге-Кути-Фельберга*

Метод *Рунге-Кути-Мерсона* забезпечує наближену оцінку погрішності на кожному кроці інтегрування. Погрішність на кожному кроці має порядок h^5 .

Алгоритм метода:

- а) задаємо початкові умови, початкову величину кроку h ,
- б) розраховуємо в i -ої точці:

$$\begin{cases} P_0 = f(x_i, y_i) \cdot h; \\ P_1 = f\left(x_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{P_0}{3}\right) \cdot h; \\ P_2 = f\left(x_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{P_0 + P_1}{6}\right) \cdot h; \\ P_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{P_0 + 3 \cdot P_2}{8}\right) \cdot h; \\ P_4 = f\left(x_i + h, y_i + \frac{P_0 - P_2}{6} + 2P_3\right) \cdot h; \end{cases} \quad (4.34)$$

в) розраховуємо розв'язок в $i+1$ –ої точці:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{P_0 + 4 \cdot P_3 + P_4}{6}; \quad (4.35)$$

г) розраховуємо оцінку погрішності на $i+1$ -му кроці:

$$R_{i+1} = \frac{-2P_0 + 9P_2 - 8P_3 + P_4}{30}; \quad (4.36)$$

д) перевіряємо виконання умов:

$$|R_{i+1}| \leq \varepsilon; \quad (4.37)$$

$$|R_{i+1}| \geq \varepsilon/30. \quad (4.38)$$

1) якщо обидві умови (4.37) і (4.38) виконуються водночас, те:

- або переходимо до розрахунків наступної точки;
- або закінчуємо розрахунки (якщо $i+1 = n$);

2) якщо не виконується умова (4.37) – це свідчить, що крок h занадто великий. У цьому випадку:

- крок h зменшують у 2 рази,
- повертаються на етап б) і повторюють розрахунки з новим значенням кроку;

3) якщо виконується умова (4.37) і не виконується (4.38) – це свідчить, що крок зайво малий. У цьому випадку:

- крок h збільшують у 2 рази,
- повертаються на етап б) і повторюють розрахунки з новим значенням кроку.

Метод Рунге-Кути-Фельберга з автоматичною зміною кроку є подібним до методу Рунге-Кути-Мерсона, але дає більш точну оцінку погрішності на кожному кроці. Алгоритм методу:

- а) задаємо початкові умови, початкову величину кроку h ,
- б) розраховуємо в i -ої точці величини $P_1 - P_5$ по формулам (4.39):

$$\begin{cases} P_0 = f(x_i, y_i) \cdot h; \\ P_1 = f\left(x_i + \frac{2h}{9}, y_i + \frac{2P_0}{9}\right) \cdot h; \\ P_2 = f\left(x_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{P_0}{12} + \frac{P_1}{4}\right) \cdot h; \\ P_3 = f\left(x_i + \frac{3h}{4}, y_i + \frac{69}{128}P_0 - \frac{143}{128}P_1 + \frac{135}{64}P_2\right) \cdot h; \\ P_4 = f\left(x_i + h, y_i - \frac{17}{12}P_0 + \frac{27}{4}P_1 - \frac{27}{5}P_2 + \frac{16}{15}P_3\right) \cdot h; \\ P_5 = f\left(x_i + \frac{5h}{6}, y_i - \frac{65}{432}P_0 - \frac{5}{16}P_1 + \frac{13}{16}P_2 + \frac{4}{27}P_3 + \frac{5}{144}P_4\right) \cdot h; \end{cases} \quad (4.39)$$

- в) розраховуємо розв'язок в $i+1$ -ої точці:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{9}P_0 + \frac{9}{20}P_2 + \frac{16}{45}P_3 + \frac{1}{12}P_4; \quad (4.40)$$

- г) розраховуємо оцінку погрішності на $i+1$ -му кроці:

$$R_{i+1} = \frac{1}{150}P_0 - \frac{3}{100}P_2 + \frac{16}{75}P_3 + \frac{1}{20}P_4 - \frac{6}{25}P_5; \quad (4.41)$$

- д) перевіряємо виконання умов:

$$|R_{i+1}| \leq \varepsilon; \quad (4.42)$$

$$|R_{i+1}| \geq \cdot \varepsilon / 20. \quad (4.43)$$

1) якщо обидві умови (4.42) і (4.43) виконуються водночас, те переходимо до розрахунків наступної точки або закінчуємо розрахунки (якщо $i+1 = n$);

2) якщо не виконується умова (4.42) – це свідчить, що крок h занадто великий. У цьому випадку:

- крок h зменшують у 2 рази;

- повертаються на етап б) і повторюють розрахунки з новим значенням кроку;

3) якщо виконується умова (4.42) і не виконується (4.43) – це свідчить, що крок зайво малий. У цьому випадку:

- крок h збільшують у 2 рази;

- повертаються на етап б) і повторюють розрахунки з новим значенням кроку.

Метод Рунге-Кути-Фельберга має 4-й порядок точності.

Метод Рунге-Кути та його модифікації реалізовано у системі Scilab. У простішому випадку для розв'язання звичайного диференціального рівняння або системи диференціальних рівнянь виду:

$$\frac{d\vec{Y}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{Y}), \quad y(t_0) = y_0$$

необхідно визвати функцію $y = \text{ode}(y_0, t_0, t, f)$. При цьому реалізується метод Рунге-Кути з автоматичним вибором кроку, до тих пір, поки різниця між розв'язком при поточної та подвоєної кількості кроків не будуть відрізнятися більше ніж на 0,0000001, або мати відносну точність не більше 0,00001.

У загальному випадку можна вказати тип методу та інші параметри. У цьому випадку функція задається у виді:

$$[y,w,iw]=ode([type], y0,t0,t[,rtol[,atol]],f[, w,iw]).$$

Для неї обов'язковими параметрами є:

$y0$ – вектор початкових умов,

$t0$ – початкова точка інтервалу інтегрування,

t – координати вузлів сітки, в яких відбувається пошук розв'язку,

f – зовнішня функція, що визначає праву частину рівняння або системи рівнянь,

w – вектор розв'язків.

До необов'язкових параметрів функції відносяться:

- ✓ $type$ – вказує тип методу розв'язку:
 - rk – метод Рунге-Кути 4-го порядку,
 - fix – метод Рунге-Кути з фіксованим кроком,
 - rkf – п'яті етапний метод Рунге-Кути-Мерсона,
- ✓ $rtol, atol$ – відносна і абсолютна погрішність розрахунків – вектор розмірності той же самої, що y . За мовчки $rtol = 0,00001$, $atol = 0,0000001$. При використанні fix і rkf $rtol = 0,001$; $atol = 0,0001$;
- ✓ w, iw – вектори, що призначені для збереження інформації про параметри інтегрування. Їх використовують для того, щоб подальші розрахунки використовувались з цими параметрами.

Приклад 4.6

Методом Рунге-Кути з автоматичним кроком знайти розв'язок системи рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = x - y_2; & y_1(0) = 1; \\ \frac{dy_2}{dx} = x + y_1; & y_2(0) = 2; \end{cases} \quad (4.44)$$

Кінцеве значення $x=1$. Кількість кроків 10. Побудувати графік.

Розв'язання

Складаємо скрипт для виконання розрахунків (лістинг 4.6)

Лістинг 4.6

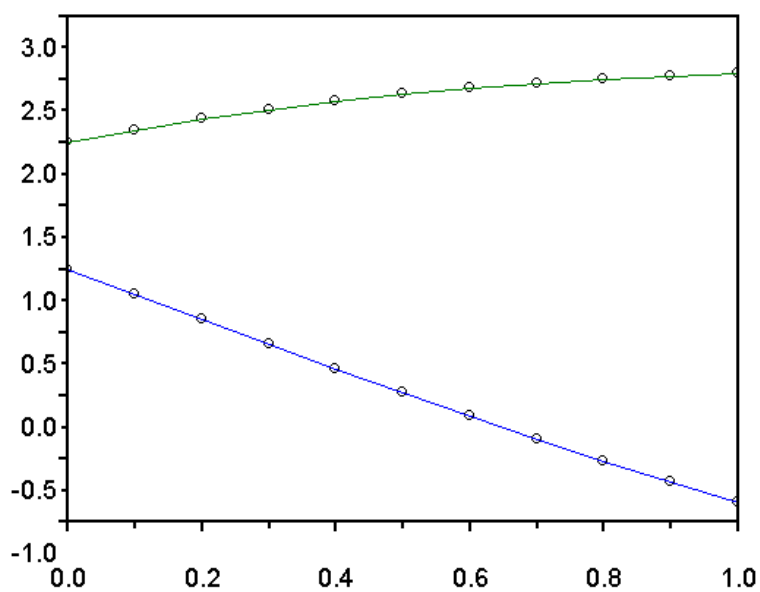
```
function [f]=fi(x,y)
    f(1)=x-y(2)
    f(2)=x+y(1)
endfunction
y0=[1;2]
x=[0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1]
z=zeros(10,2);
for i=1:11
    [y]=ode(y0,0,x(i),fi);
    z(i,:)=[y(1) y(2)];
end
[x',z]
plot(x,z,'ko')
plot(x,z)
```

В скрипті для того, щоб запам'ятати поточні результати на кожному кроці уведено масив $z(11,2)$ куди заносяться розв'язки в усіх точках. Результати розрахунків наведені у табл. 4.1. Графік залежності y_1 і y_2 від x наведений на рис. 4.11

Внаслідок того, що будь-яке рівняння вищого порядку може бути зведено до рішення системи рівнянь, метод Рунге-Кути та його модифікації можуть бути розповсюджені для їх рішення. В літературі наведені формули для безпосереднього рішення рівнянь другого ступеня, але, на нашу думку, краще перетворити рівняння на систему вручну, а потім вже користуватися методом Рунге-Кути, а краще – його модифікаціями (Мерсона і Фельберга).

Таблиця 4.1 – Розв'язок рівняння 4.44

x	y_1	y_2
0	1	2
0,1	0,8001665	2,0950042
0,2	0,6013306	2,1800666
0,3	0,4044797	2,2553365
0,4	0,2105815	2,321061
0,5	0,0205744	2,3775825
0,6	-0,1646426	2,4253356
0,7	-0,3442178	2,4648421
0,8	-0,5173562	2,4967066
0,9	-0,6833270	2,5216099
1,	-0,8414710	2,5403022

Рисунок 4.11 – Графіки залежності y_1 і y_2 від x (приклад 4.6)

4.6 Багатокрокові методи

У однокрокових методах, що були розглянуті у попередніх підрозділах для рішення ЗДУ використовують інформацію про рішення тільки у попередній точці. У багатокрокових методах обчислювальні схеми використовують інформацію про рішення на декількох попередніх кроках. Це дозволяє зменшити витрати на рішення. Нижче будуть розглянуті деякі з таких методів.

Метод Адамса. Основна ідея :

а) нехай знайдені наближені рішення $y(x)$ в $k+1$ точках $x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-k}$ з постійним кроком h ;

б) позначимо: $y(x_i) = y_i, f(x_i, y_i) = f_i$;

в) по даним вузлам будуємо *інтерполяційний поліном* $P_k(x)$ для функції $f(x, y(x))$;

г) вважаємо наближено:

$$y'(x) = f(x, y) \approx P_k(x); \quad (4.45)$$

д) інтегруємо вираз (4.45):

$$y_{i+1} \approx y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_k(x) dx; \quad (4.46)$$

е) виражаємо $P_k(x)$ через скінчені різниці функції $f(x, y(x))$, користуючись формулою Ньютона для інтерполяції назад:

$$P_n(t) = y_n + \frac{t}{1!} \Delta y_{n-2} + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \dots + \frac{t(t-1)\dots(t+n-1)}{n!} \Delta^n y_0, \quad (4.47)$$

де $t = \frac{x - x_n}{h}$;

ж) якщо обмежитися різницями третього порядку, отримаємо наступну *екстраполяційну* формулу Адамса:

$$y_{i+1} = y_i + F_i + \frac{1}{2}\Delta F_{i-1} + \frac{5}{12}\Delta^2 F_{i-2} + \frac{3}{8}\Delta^3 F_{i-3}, \quad (4.48)$$

де $F_i = h \cdot f(x_i, y(x_i))$.

Метод Адамса-Башфорта. На практиці зручніше використовувати не скінченні різниці, а значення функції в k точках. Для цього:

а) виразимо скінченні різниці через значення функції:

$$\begin{cases} \Delta F_{i-1} = h \cdot (f_i - f_{i-1}); \\ \Delta^2 F_{i-2} = h \cdot (f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}); \\ \Delta^3 F_{i-3} = h \cdot (f_i - 3f_{i-1} + 3f_{i-2} - f_{i-3}); \end{cases} \quad (4.49)$$

б) підставимо їх у (4.47), отримаємо *екстраполяційну формулу Адамса – Башфорта*:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \cdot (55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}). \quad (4.50)$$

Формули (4.48, (4.50) називаються *екстраполяційними* тому, що вони використовують значення функції f_i в точках $x_i, x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}$, що попереджають відрізок інтегрування $[x_i; x_{i+1}]$.

Значення y_{i+1} може бути уточнено за алгоритмом Адамса-Мултона:

а) розраховують y_{i+1} по формулі (4.50);

б) розраховують величину $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$;

в) уточняють y_{i+1} за допомогою інтерполяційної формули Адамса-Мултона:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \cdot (9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}). \quad (4.51)$$

Формула (4.51) отримується аналогічно (4.48) і (4.50), якщо замість $P_k(x)$ використовувати поліном Ньютона (4.47), що побудований на точках $x_{i+1}, x_i, x_{i-1}, x_{i-2}$.

Формула Адамса (4.48), (4.50) мають четвертий порядок точності. Різницю між значеннями y_{i+1} , розрахованими по формулам (4.50) (*прогноз*) і (4.51) (*корекція*), можна прийняти за міру локальної погрішності на даному кроці. При придатному виборі кроку h можна добитися, що:

$$|y_{i+1}^{\text{кор}} - y_{i+1}^{\text{прог}}| < \varepsilon, \quad (4.52)$$

де $y_{i+1}^{\text{прог}}$ - рішення, що отримано за допомогою формули (4.50);

$y_{i+1}^{\text{кор}}$ - рішення, що отримано за допомогою формули (4.51);

ε - наперед обране мале позитивне число (міра точності)

Проблема: багатокрокові методи не можуть бути використані на початковому етапі, оскільки для них крім початкового наближення необхідні ще 3 значення y . Тому на початковому етапі:

а) виконують 3 кроки методу Рунге-Кути, отримують з y_0 послідовно точки y_1, y_2, y_3 ;

б) ці точки використовують для виконання подальших розрахунків методом Адамса-Башфорта.

Для досягнення більш високої точності у початкових точках величину кроку методу Рунге-Кути обирають меншою за величину кроку в подальших розрахунках.

Переваги методу Адамса і Адамса-Башфорта:

- ✓ менший обсяг обчислень на кожному кроці;
- ✓ економний автоматичний контроль величини кроку

Метод Адамса також можна використовувати для розв'язання систем ЗДУ.

В середовищі Scilab метод Адамса реалізується шляхом уведення у тип рівняння функції `ode` (див. 4.5) позначення 'adams'

Метод Мілна¹⁾ подібно методу Адамса, є багатокроковим методом четвертого порядку точності типу „прогноз-корекція”. Алгоритм:

а) методом Рунге-Кути, виходячи з початкового наближення $y(x_0) = y_0$, знаходять 3 послідовних рішення $y_1 = y(x_0 + h)$, $y_2 = y(x_0 + 2h)$, $y_3 = y(x_0 + 3h)$;

¹⁾ Мілн Арчібалд (1875-1958) – англійський математик, член Колорівської спілки Единбурга. У 1916 р. запропонував метод чисельного розв'язання ЗДР.

б) по 4-м попереднім точкам розраховують прогноз - наступне значення y_{i+1} :

$$y_{i+1}^{\text{прог}} = y_{i-3} + \frac{4 \cdot h}{3} \cdot (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}), \quad (4.53)$$

де $f_i = f(x_i, y_i)$ ($i = 3, 4, 5, \dots$);

в) розраховують значення правої частини рівняння:

$$f_{i+1}^{\text{прог}} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^{\text{прог}}); \quad (4.54)$$

г) корегують значення y_{i+1} :

$$y_{i+1}^{\text{кор}} = y_{i-1} + \frac{h}{3} \cdot (f_{i-1} + 4 \cdot f_i + f_{i+1}^{\text{прог}}) \quad (i=3, 4, \dots) \quad (4.55)$$

Гранична абсолютна погрішність значення y_i в методі Мілна складає:

$$\varepsilon_i = \frac{1}{29} \cdot |y_i^{\text{кор}} - y_i^{\text{прог}}|. \quad (4.56)$$

Приклад 4.7

Порівняти результати рішення диференціального рівняння:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{2x + y}{\sqrt{y}}, \quad y(0)=1, \quad (4.57)$$

на відрізку $[0;2]$ методом Рунге-Кути і Адамса. Кількість кроків:20. Підрахувати кількість розрахунків функції у правій частині (4.57).

Розв'язання:

Розв'язання виконаємо у середовищі Excel або OOo Calc. Створимо програму на мові VBA (лістинг 4.7), що містить модулі методу Рунге-Кути й Адамса. Оскільки у методі Рунге-Кути використовуємо фіксований крок, неважко підрахувати, що

кількість розрахунків функції для цього методу складає 80 (20 кроків, на кожному – 4 розрахунки). Для підрахунків кількості кроків у методі Адамса (у тому числі – на перших трьох кроках методу Рунне-кути до складу підпрограми-функції уводимо глобальну змінну-лічильник, яку збільшуємо на 1 після кожного звернення до функції.

Лістинг 4.7

```
Global kk
Sub Runge_Kutta_Adams()
'****Вхідні дані
Dim y(0 To 4), f(0 To 4) As Double
x0 = 0
y(0) = 1
xf = 2
n = 20
kk = 0
y0 = y(0)
f(0) = func(x0, y0)
'**** Розрахунок кроку
h = (xf - x0) / n
'*****Початкові умови
Cells(11, 1) = x0
Cells(11, 2) = y0
'*****Розрахунки
'*****Runge-Kutta, 3 steps
For i = 1 To 3
    x = x0 + (i - 1) * h
    p1 = func(x, y0) * h
    p2 = func(x + h / 2, y0 + p1 / 2) * h
    p3 = func(x + h / 2, y0 + p2 / 2) * h
```

```
p4 = func(x + h, y0 + p3) * h
y0 = y0 + (p1 + 2 * (p2 + p3) + p4) / 6
'*** виведення
Cells(11 + i, 1) = x0 + i * h
Cells(11 + i, 2) = y0
y(i) = y0
f(i) = func(x0 + i * h, y0)
Next
'***** Adams-Bashfort***
For i = 4 To n
    x = x0 + i * h
    y(4) = y(3) + h / 24 * (55 * f(3) - 59 * f(2) + 37 * f(1)
- 9 * f(0))
    f(4) = func(x, y(4))
    y0 = y(3) + h / 24 * (9 * f(4) + 19 * f(3) - 5 * f(2) +
f(1))
    eps = Abs(y(4) - y0)
    Cells(11 + i, 1) = x
    Cells(11 + i, 2) = y0
    Cells(11 + i, 3) = eps
    For j = 0 To 3
        y(j) = y(1 + j)
        f(j) = f(1 + j)
    Next j
Next
MsgBox kk

End Sub
' ***Підпрограма-Функція
Function func(x, y)
```

```
func = (2 * x + y) / y ^ 0.5
kk = kk + 1
End Function
```

Кількість розрахунків функції складає 33, тобто у 2 рази менше, ніж у методі Рунге-Кути.

Результати розрахунків наведено у таблиці 4.2.

Таблиця 4.2 – Результати розв'язання рівняння (4.56). Підкреслено зону розрахунків методом Рунге-Кути для метода Адамса

x	Значення y_i		ε_i
	метод Рунге-Кути	Метод Адамса- Башфорта	
0	1	1	
0,1	1,112315	1,112315	
0,2	1,2484142	1,2484142	
0,3	1,4068987	1,4068987	
0,4	1,5863432	1,5863453	5,65E-05
0,5	1,7854069	1,7853521	2,93E-05
0,6	2,0028823	2,0027968	8,99E-06
0,7	2,2377063	2,2376103	8,57E-08
0,8	2,4889532	2,4888558	4,59E-06
0,9	2,7558199	2,7557257	6,17E-06
1	3,0376087	3,0375193	6,23E-06
1,1	3,3337115	3,3336272	5,66E-06
1,2	3,6435959	3,6435163	4,89E-06
1,3	3,966793	3,9667174	4,11E-06

Продовження табл. 4.2

х	Значення y_i		ε_i
	метод Рунге-Кути	Метод Адамса- Башфорта	
1,4	4,3028877	4,3028154	3,41E-06
1,5	4,65151	4,6514403	2,81E-06
1,6	5,0123284	5,0122609	2,32E-06
1,7	5,3850445	5,3849787	1,91E-06
1,8	5,7693881	5,7693236	1,58E-06
1,9	6,1651131	6,1650496	1,32E-06
2	6,5719951	6,5719323	1,1E-06

Як впливає з даних таблиці, незважаючи на меншу кількість розрахунків функції, метод Адамса-Башфорта дає практично такі ж самі результати, що і метод Рунге-Кути.

Результати, що одержані у прикладі 4.7, є загальними, коли права частина диференціального рівняння є *гладкою функцією*. У цих випадках багатокрокові методи є значно більш ефективними з точки зору кількості звернення до підпрограм-функцій. Це суттєво для реальних задач, де розрахунки функцій, особливо у випадку систем рівнянь, є „вузьким” місцем. Але якщо права частина не є гладкою функцією – використання багатокрокових методів стає проблемним. У цих випадках використовують метод Рунге-Кути.

4.7 Чисельне моделювання динамічних систем зі збуреною правою частиною

Динамічними називаються системи, поведінка яких у часі описується диференціальними рівняннями або системами диференціальних рівнянь. Такі

системи є дуже розповсюдженими у природничих, технічних та соціальних науках. У багатьох таких систем часто наявна негладка (збурена) права частина, тому одержання чисельних розв'язків має особливості.

Приклад 4.8

У проточному хімічному реакторі з ідеальним змішуванням перебігає проста хімічна реакція $A \rightarrow B$. Залежність концентрації реагенту А на виході (C_A) описується диференціальним рівнянням:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_A^0 - C_A}{\tau} - k \cdot C^{0,5}, \quad (4.58)$$

де C_A^0 – початкова концентрація реагенту на вході,

k – константа швидкості хімічної реакції,

τ - час перебування розчину у реакторі.

У початковий час $t = 0$ концентрація $C_A = 0$

Для конкретної системи $C_A^0 = 1,2 \text{ кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$, $k = 1,1 \text{ (кмоль)}^{0,5} \cdot \text{год}$, $\tau = 0,5 \text{ год}$

Через 2 години з початку процесу відбулося залпове підвищення концентрації на вході до $1,4 \text{ кмоль} \cdot \text{м}^{-3}$, що трималось протягом 0,2 год, після чого знову відновилося нормальна подача реагенту. Треба знайти і побудувати залежність концентрації реагенту А на виході від часу (протягом 4 год).

Розв'язання

Подібні задачі до волі часто зустрічаються при моделюванні реальних динамічних систем у реальному часі. У даної задачі негладкість обумовлена фактичною зміною в часі початкових умов. Тому для рішення задачі необхідно розділити ділянку часу на 3 зони:

- а) від 0 до 2 год – ділянка нормального процесу;
- б) від 2 до 2,2 год – ділянка ненормального режиму;
- в) від 2,2 до 4 год – ділянка відновлення режиму.

Відповідно, концентрація при закінченні першої ділянки є початковою умовою для другої ділянки, а концентрація при закінченні другої ділянки є початковою умовою для третьої ділянки.

Для розв'язку краще використовувати алгоритм Рунге-Кути:

а) спочатку знаходять розв'язок на першій ділянці, при величині $c_A^0 = 1,2$ кмоль·м⁻³ і початковій умові $C_A(0)=0$;

б) далі одержане значення $C_A(2)$ використовують, як початкову умову на другій ділянці, при величині $c_A^0 = 1,4$ кмоль·м⁻³. Одержують розв'язок – значення $C_A(2,2)$;

в) одержане значення $C_A(2,2)$ використовують, як початкову умову на третій ділянці, при величині $c_A^0 = 1,2$ кмоль·м⁻³. Одержують розв'язок – значення $C_A(4)$.

Результати рішення ЗДУ наведені на рис. 4.12. Як випливає з рис, за 2 години процес підійшов до стаціонарного режиму, але залпове зростання концентрації на вході визвало зростання концентрації на виході. Після зняття обурення система поступово знов підійшла до стаціонарного стану.

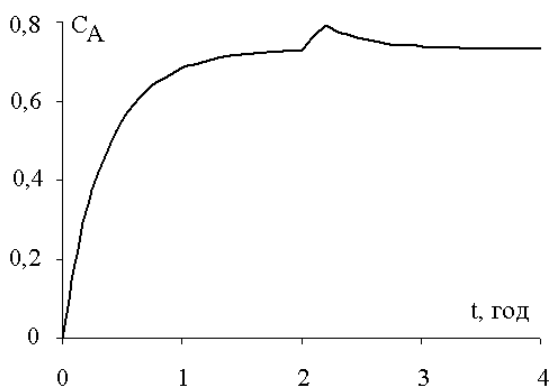


Рисунок 4.12 – Залежність концентрації від часу (до прикладу 3.11.2)

Контрольні запитання

1 У чому полягає загальний принцип чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь?

- 2 Як можна класифікувати методи чисельного розв'язання ЗДУ?
- 3 Вивести формулу методу Ейлера (методу ламаних).
- 4 Що у методі Ейлера розглядається за наближене значення розв'язку ЗДУ у певній точці x_i ?
- 5 Яким чином точність методу Ейлера залежить від величини кроку?
- 6 Сутність геометричної інтерпретації методу Ейлера.
- 7 Виконати 2 кроку методу Ейлера для заданого диференціального рівняння.
- 8 Як за допомогою комп'ютерного моделювання можна оцінити порядок точності методу чисельного розв'язання ЗДУ?
- 9 Алгоритм модифікованого методу Ейлера-Коші
- 10 Виконати 2 кроку модифікованого методу Ейлера-Коші для заданого диференціального рівняння.
- 11 Зміст порядку точності. Який порядок точності має модифікований метод Ейлера-Коші?
- 12 Алгоритм ітераційного методу Ейлера-Коші
- 13 Критерій збіжності ітераційного методу Ейлера-Коші
- 14 Сутність корекції і прогнозу у методах Ейлера-Коші
- 15 Як можна використати метод Ейлера-Коші для розв'язання системи ЗДУ?
- 16 Схема методу Рунге-Кути 2-го порядку
- 17 Геометрична інтерпретація методу Рунге-Кути 2-го порядку.
- 18 Обчислювальна схема методу Рунге-Кути 4-го порядку
- 19 Достоїнства методу Рунге-Кути 4-го порядку
- 20 Яким чином точність методу Рунге-Кутти 4 порядку залежить від величини кроку?
- 21 У чому полягає перевага і недоліки методу Рунге-Кути з автоматичним вибором кроку у порівнянні із звичайним методом Рунге-Кути?
- 22 Яким чином здійснюється автоматичний вибір розміру кроку у методах Рунге-Кути-Мерсона і Рунге-Кути-Фельдберга?
- 23 Як змінюється порядок методу при переході від простого методу Рунге-Кути 4-го порядку до методів Рунге-Кути-Мерсона і Рунге-Кути-Фельдберга?

- 24 Як можна метод Рунге-Кути використати для розв'язання систем ЗДУ?
- 25 Як можна метод Рунге-Кути використати для розв'язання ЗДУ високого порядку?
- 26 У чому полягає сутність багатокрокових методів?
- 27 Сутність алгоритму методу Адамса
- 28 Сутність алгоритму методу Адамса-Башфорта. У чому його перевага у порівнянні з методом Адамса?
- 29 Яким чином можна уточнити поточне значення розв'язку, що був отриманий методом Адамса-Башфорта?
- 30 Чи можна використовувати метод Адамса-Башфорта на усіх етапах розрахунків?
- 31 Який прийом використовують, щоб одержати на початкових кроках найбільш високої точності при використанні багатокрокових методів?
- 32 Як відбувається прогноз і корекція у методі Мілна?
- 33 У чому полягають переваги багатокрокових методів у порівнянні з однокроковими?
- 34 Як можна моделювали динамічні системи зі збуренням у часі за відомим законом?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 4.1

Методом Ейлера, Ейлера-Коші й Рунге-Кутти 4 порядку розв'язати диференціальні рівняння, що наведені у табл. 4.3. Методом моделювання оцінити порядок погрішності для кожного випадку.

Таблиця 4.3 – Варіанти завдання 4.1

№	Рівняння	Початкові умови	Кінцева точка
1	$\frac{dy}{dx} = \frac{y}{x} + x \cdot \sin(x)$	$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$	2π
2	$\frac{dy}{dx} = \frac{y}{x} + x^2$	$y(1) = 0$	5
3	$\frac{dy}{dx} = \frac{y}{x+1} + x^2$	$y(0)=1$	3
4	$\frac{dy}{dx} = x \cdot y + (1+x) \cdot e^{-x}$	$y(0)=1$	2
5	$\frac{dy}{dx} = -4 \cdot x \cdot y + (1+x) \cdot y \cdot e^{-x}$	$y(0)=1$	1
6	$\frac{dy}{dx} = -4 \cdot x \cdot y^2 + (1+x) \cdot \sqrt[3]{y} \cdot e^{-x}$	$y(0)=2$	2
7	$\frac{dy}{dx} = y^2 + (1+x) \cdot \sqrt[4]{y} \cdot e^{-xy}$	$y(0)=3$	4
8	$\frac{dy}{dx} = y^2 \cdot \sin(x) + (1+x \cdot y) \cdot e^{-xy}$	$y(0)=1$	π
9	$\frac{dy}{dx} = y \cdot x \cdot \sin(x) + (1+x \cdot y^2) \cdot e^{-xy}$	$y(0)=1$	π
10	$\frac{dy}{dx} = \frac{y + e^{-x}}{1+x^{2/3}}$	$y(1)=1$	5

Продовження табл.. 4.3

№	Рівняння	Початкові умови	Кінцева точка
11	$\frac{dy}{dx} = \frac{y + e^x}{1 + y^2}$	$y(2)=3$	6
12	$\frac{dy}{dx} = \frac{y(x+1)}{2+x^2}$	$y(0)=1$	5
13	$\frac{dy}{dx} = \frac{y(\sqrt{x+1})}{2+x}$	$y(2)=1$	4
14	$\frac{dy}{dx} = \frac{e^{-xy}}{1+2 \cdot x}$	$y(3)=1$	5
15	$\frac{dy}{dx} = \frac{\ln(x \cdot y)}{1+2 \cdot x}$	$y(1)=2$	4
16	$\frac{dy}{dx} = \frac{x}{2} - \frac{\ln(x \cdot y)}{1+x}$	$y(1)=1$	2
17	$\frac{dy}{dx} = 1 - \frac{\sqrt{x \cdot y}}{1+x}$	$y(1)=2$	3
18	$\frac{dy}{dx} = \frac{y}{1+x^2}$	$y(1)=3$	3
19	$\frac{dy}{dx} = \frac{2 \cdot x^2}{y+x}$	$y(1)=1$	10
20	$\frac{dy}{dx} = \frac{2 \cdot x}{y+x+x^2}$	$y(0)=1$	5
21	$\frac{dy}{dx} = \frac{2 \cdot \exp(x)}{y+x+x^2}$	$y(0)=3$	5
22	$\frac{dy}{dx} = \frac{3x+y+2}{x+10}$	$y(1)=3$	4
23	$\frac{dy}{dx} = 1+x^2 - e^{-y}$	$y(0)=1$	4
24	$\frac{dy}{dx} = 1+x^2 - \frac{e^{-y}}{x}$	$y(1)=1$	3

Продовження табл.. 4.3

№	Рівняння	Початкові умови	Кінцева точка
25	$\frac{dy}{dx} = 1 + x - \frac{e^{-y}}{y}$	$y(1)=2$	4
26	$\frac{dy}{dx} = 1 - x + \frac{e^{-y}}{x}$	$y(1)=2$	4
27	$\frac{dy}{dx} = 1 - x + \frac{e^x}{x + y}$	$y(1)=1$	4
29	$\frac{dy}{dx} = x - \frac{e^{-x}}{x + y}$	$y(1)=1$	4
30	$\frac{dy}{dx} = \frac{e^{-x}}{x + y^2}$	$y(1)=2$	5

Завдання 4.2

Створити комп'ютерну програму і розв'язати системи рівнянь згідно табл.. 4.4. РКМ – метод Рунге-Кути–Мерсона, РКФ – метод Рунге-Кути-Фельберга, Мілн – метод Мілна. Результати перевірити у Scilab.

№	Система	Початкові умови	Кінцева точка	Метод
1	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_2 \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_2 - 2 \cdot x_2 \\ x_3' = 2 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	2	РКМ
2	$\begin{cases} x_1' = -2 \cdot x_1^2 - x_1 \cdot x_2 \\ x_2' = 2 \cdot x_1^2 + x_1 \cdot x_2 - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 0,1 \\ 0 \end{pmatrix}$	2	РКФ
3	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_2^2 \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_2^2 - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0,1 \end{pmatrix}$	2	Мілн

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Кінцева точка	Метод
4	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1^2 \cdot x_3 \\ x_2' = x_1 + x_1^2 \cdot x_3 - 2 \cdot x_2 \\ x_3' = 2 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКМ
5	$\begin{cases} x_1' = -x_1^{0,5} - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1^{0,5} + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0,2 \\ 0,1 \end{pmatrix}$	1	РКФ
6	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0,1 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
7	$\begin{cases} x_1' = -x_1 \cdot x_2 - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0,1 \end{pmatrix}$	1	РКМ
8	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	2	РКФ
9	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + \ln[x_1 \cdot x_3^{1,5}] - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	2	МіЛН
10	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} + t \\ x_2' = x_1 + \ln[x_1 \cdot x_3^{1,5}] - 3 \cdot x_2 - t \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	РКМ

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Кінцева точка	Метод
11	$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cdot t \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	РКФ
12	$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cdot t - x_3 \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
13	$\begin{cases} x'_1 = x_1 \cdot t - x_3 \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = \exp(x_2) + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКМ
14	$\begin{cases} x'_1 = \exp(x_1 \cdot t) - x_3 \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКФ
15	$\begin{cases} x'_1 = \frac{x_2 \cdot t}{x_1} \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
16	$\begin{cases} x'_1 = (x_1 \cdot t)^{0,5} \\ x'_2 = \exp(x_1 - x_3 \cdot t) \\ x'_3 = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКФ
17	$\begin{cases} x'_1 = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_2 \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКМ
18	$\begin{cases} x'_1 = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_3 \\ x'_2 = x_1 - x_3 \cdot t \\ x'_3 = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	МіЛН

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Кінцева точка	Метод
19	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКФ
20	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКМ
21	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
22	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	1	РКФ
23	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$	1	РКМ
24	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \cdot t \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
25	$\begin{cases} x_1' = \frac{(x_1 \cdot t)^{1,5}}{x_2 + x_1 \cdot t} \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$	1	РКФ

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Кінцева точка	Метод
26	$\begin{cases} x_1' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	РКМ
27	$\begin{cases} x_1' = x_1 + x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	МіЛН
28	$\begin{cases} x_1' = x_1 - x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	1	РКФ
29	$\begin{cases} x_1' = x_1 - x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t + \frac{x_3}{x_1 \cdot x_2} \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$	2	РКМ
30	$\begin{cases} x_1' = x_1 + x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \cdot x_3 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$	2	МіЛН

ЛЕКЦІЯ 5. ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЖОРСТКИХ СИСТЕМ І КРАЙОВИХ ЗАДАЧ

Мета лекції

- 1 Ознайомити слухачів зі змістом поняття «жорстка система», її ознаками і особливостями чисельного розв'язання «звичайними» методами.
- 2 На прикладі неявного метода Ейлера ознайомити слухачів з особливостями неявних методів для розв'язання жорстких систем ЗДУ
- 3 Ознайомити слухачів з методом Розенброка для розв'язання жорстких систем
- 4 Ознайомити слухачів з крайовими задачами ЗДУ та їх чисельного розв'язання методом стрільби
- 5 Ознайомити слухачів з практичними методами розв'язання ЗДУ в середовищі Scilab

План лекції

[5.1 Поняття жорстких систем ЗДУ](#)

[5.2 Методи розв'язання жорстких систем. Неявний метод Ейлера](#)

[5.3 Метод Розенброка](#)

[5.4 Крайові задачі. Метод стрільби](#)

[Контрольні запитання](#)

[Завдання для самостійної роботи](#)

5.1 Поняття жорстких систем ЗДУ

Серед систем диференціальних рівнянь першого порядку великий інтерес представляють так звані *жорсткі системи*, які можна розглядати, як аналоги погано обумовлених систем лінійних рівнянь в лінійної алгебрі.

Приклад жорстких систем – система рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = 998x + 1998y, & x(0) = 1; \\ \frac{dy}{dt} = -999x - 1999y, & y(0) = 0. \end{cases} \quad (5.1)$$

Частковий розв'язок

$$\begin{cases} x = 2e^{-t} - e^{-1000t}; \\ y = -e^{-t} + e^{-1000t}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Особливості:

а) система є автономною (її права частина не залежить від часу);

б) кожна з компонент рішення містить:

- *швидку складову* (e^{-1000t}), яка відрізняється від 0 тільки у малому діапазоні зростання часу навколо 0;

- *повільну складову*, яка суттєво змінюється в усій області значень часу (члени e^{-t}).

Хоча швидка складова дуже швидко збігається з нулем і не вносить суттєвого внеску у рішення в усіх інтервалах, крім початкового, при чисельному інтегруванні саме вона вносить обмеження на величину кроку інтегрування. Дійсне,

а) якщо використати підстановку:

$$x = 2u - v, \quad y = -u + v, \quad (5.3)$$

то система (5.2) розпадеться на два незалежних рівняння:

$$\begin{cases} \frac{dv}{dt} = -1000v; & v(0) = 1, \\ \frac{du}{dt} = -u; & u(0) = 1, \end{cases} \quad (5.4)$$

б) використаємо метод Ейлера з деяким кроком h до розв'язання першого рівняння системи (5.4), одержимо рекурентне співвідношення:

$$v_{n+1} = v_n - 1000 \cdot h \cdot v_n = v_n \cdot (1 - 1000 \cdot h), \quad (5.5)$$

в) умовою сталості обчислювального процесу (3.108) і, у відповідності з (5.5), його прагнення до 0 при $t \rightarrow \infty$ є обмеженість виразу у дужках:

$$|1 - 1000 \cdot h| < 1; \quad (5.6)$$

Звідси при позитивних h повинно бути обмеження на величину кроку: $h < 0,001$.

Таким чином при $h > 0,001$ процес Ейлера *перестає бути сталим*, і це приводить до появи *великих значень розв'язків*, впритул до переповнення розрядної сітки комп'ютера. Те ж саме спостерігається і при використанні методів більш високого порядку, наприклад методу Рунге-Кути.

Таким чином:

а) для жорстких систем характерна наявність *різниці на декілька порядків у параметрів рівнянь*, або можливість привести їх до такого виду шляхом підстановок. Це викликає появу „швидких” і „повільних” складових;

б) *основним протиріччям* жорстких систем є те, що дрібний крок інтегрування, який є необхідним для відтворення швидких процесів, не може бути збільшений на тих ділянках часу, коли внесок швидких процесів буде практично нульовим.

Перша ділянка, де суттєвим є внесок швидких процесів носить назву *пограничного шару*. У випадку системи (5.1) він розташований від 0 до 0,01.

Властивість жорсткості системи ЗДР має аналогію з погано обумовленими системами лінійних алгебраїчних рівнянь. Як показано у частині 1, умовою поганої обумовленості є велике значення числа обумовленості – відношення найбільшого та найменшого сингулярних чисел матриці коефіцієнтів. Подібна ситуація є у випадку ЗДУ: *за критерій жорсткості можна обрати відношення сингулярних чисел якобіану правої частини системи*.

Приклад 5.1

Встановити, чи є жорсткою система ЗДУ:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -x_1; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = x_1 - 10^6 \cdot x_2; & x_2(0) = 0. \end{cases} \quad (5.7)$$

Розв'язання

Укладемо матрицю Якобі системи:

$$W = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right] = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \cdot 10^6 \end{bmatrix}; \quad (5.8)$$

- ✓ Для розрахунків числа обумовленості використаємо 2 метода: безпосередніх розрахунків за визначенням;
- ✓ використання функції `cond()`

В рамках першого методу:

а) розрахуємо сингулярну матрицю як матричний добуток транспонованої матриці на основну:

$$B = W^T \cdot W = \begin{bmatrix} 1 & -1 \cdot 10^6 \\ -1 \cdot 10^6 & 1 \cdot 10^{12} \end{bmatrix}; \quad (5.9)$$

б) за допомогою функції $\text{sprs}(B)$ у системі Scilab обчислимо власні значення сингулярної матриці. Вони складають 10^{12} і 1;

в) обчислимо сингулярні числа як кореня квадратні з власних значень. Вони складають 10^6 та 1;

г) обчислимо число обумовленості, як відношення максимального сингулярного числа до мінімального. Воно складає 10^6 .

Аналогічні результати можна одержати безпосередньо шляхом використання функції $\text{cond}(W)$, що розраховує число обумовленості матриці W .

Таке велике значення числа обумовленості свідчить, що система є *жорсткою*.

5.2 Методи розв'язання жорстких систем. Неявний метод Ейлера

Для розв'язання жорстких систем використовують *неявні ітераційні схеми розв'язку*. Проілюструємо їх сутність на прикладі методу Ейлера для розв'язання системи (5.7)¹⁾. Ця система при згаданих початкових умовах має аналітичний розв'язок:

$$\begin{cases} x_1 = e^{-t}; \\ x_2 = \frac{1}{10^6 - 1} \cdot (e^{-t} - e^{-10^6 t}). \end{cases} \quad (5.10)$$

У відповідності до методу Ейлера кроковий процес на $i+1$ -му кроці розв'язку має вид:

$$\begin{cases} x_{1,i+1} = x_{1,i} + f_1(x_{1,i}, x_{2,i}) \cdot h; \\ x_{2,i+1} = x_{2,i} + f_2(x_{1,i}, x_{2,i}) \cdot h; \end{cases} \quad (5.11)$$

¹⁾ Відмітимо, що системи виду (5.7) є характерними для описання швидкості послідовних реакцій в хімічній кінетиці та біохімії, що лежать у основі життєдіяльності живих організмів.

Якщо у функціях у правих частинах замінити індекс з i на $i+1$, то будемо мати ітераційну процедуру *неявного* метода Ейлера:

$$\begin{cases} x_{1,i+1} = x_{1,i} + f_1(x_{1,i+1}, x_{2,i+1}) \cdot h; \\ x_{2,i+1} = x_{2,i} + f_2(x_{1,i+1}, x_{2,i+1}) \cdot h; \end{cases} \quad (5.12)$$

Узагальнення: для одержання неявного метода рішення ЗДУ необхідно:

- ✓ записати формули для $i+1$ -го кроку звичайного метода (явного);
- ✓ функціях у правій частини замінити індекси з i на $i+1$.

Система (5.12) для (5.8) має вид:

$$\begin{cases} x_{1,i+1} = x_{1,i} - x_{1,i+1} \cdot h; \\ x_{2,i+1} = x_{2,i} + (x_{1,i+1} - 10^6 \cdot x_{2,i+1}) \cdot h. \end{cases} \quad (5.13)$$

З системи (5.13):

$$\begin{cases} x_{1,i+1} = \frac{x_{1,i}}{1+h}; \\ x_{2,i+1} = \left[x_{2,i} + \frac{x_{1,i} \cdot h}{1+h} \right] \cdot \frac{1}{1+10^6 \cdot h} \end{cases} \quad (5.14)$$

Приклад 5.2

Чисельно розв'язати систему (5.10) за допомогою простого і неявного методів Ейлера.

Розв'язання

Для розв'язання розробляємо проект OOo Calc, створюючи формули комірок для знаходження величин x_1 і x_2 за допомогою простого [метода Ейлера](#), неявного метода Ейлера за формулами (5.13) і для порівняння, точного розв'язку (5.10).

Спочатку проводимо розв'язок з кроком $h=10^{-7}$. Як впливає з рис. 5.1, при такому дрібному кроці рішення в усіх трьох випадках для обох змінних є близькими. При цьому через 100 кроків встановлюється практично стаціонарне значення x_2 , а x_1 продовжує суттєво змінюватися.

Після 100 кроків збільшуємо h до величини 0,001. Як впливає з рис. 5.2, це катастрофічно відбувається на знаходженні x_2 простим методом Ейлера: величини починають необмежено зростати за модулем і змінювати знак. На відмінність від цього, неявний метод Ейлера продовжує давати нормальні значення змінних.

З цього можна зробити висновок, що неявні методи дозволяють збільшити шаг інтегрування після того, як „швидкі” змінні досягли стаціонарних значень. Таке ж саме можна відмітити і для інших неявних схем.

Неявний метод Ейлера — 1-й етап						
h= 1,00E-007						
	x1			x2		
час	Ейлер	Точний	Жорсткий	Ейлер	Точний	Жорсткий
0	1	1	1	0	0	0
1	1,00E-07	0,9999999	0,9999999	0,9999999	1,00E-07	9,52E-08
2	2,00E-07	0,9999998	0,9999998	0,9999998	1,90E-07	1,81E-07
3	3,00E-07	0,9999997	0,9999997	0,9999997	2,71E-07	2,59E-07
4	4,00E-07	0,9999996	0,9999996	0,9999996	3,44E-07	3,30E-07
5	5,00E-07	0,9999995	0,9999995	0,9999995	4,10E-07	3,93E-07
6	6,00E-07	0,9999994	0,9999994	0,9999994	4,69E-07	4,51E-07
7	7,00E-07	0,9999993	0,9999993	0,9999993	5,22E-07	5,03E-07
8	8,00E-07	0,9999992	0,9999992	0,9999992	5,70E-07	5,51E-07
9	9,00E-07	0,9999991	0,9999991	0,9999991	6,13E-07	5,93E-07
10	1,00E-06	0,9999990	0,9999990	0,9999990	6,51E-07	6,32E-07
11	1,10E-06	0,9999989	0,9999989	0,9999989	6,86E-07	6,67E-07
12	1,20E-06	0,9999988	0,9999988	0,9999988	7,18E-07	6,99E-07
13	1,30E-06	0,9999987	0,9999987	0,9999987	7,46E-07	7,27E-07
14	1,40E-06	0,9999986	0,9999986	0,9999986	7,71E-07	7,53E-07
15	1,50E-06	0,9999985	0,9999985	0,9999985	7,94E-07	7,77E-07
16	1,60E-06	0,9999984	0,9999984	0,9999984	8,15E-07	7,98E-07
17	1,70E-06	0,9999983	0,9999983	0,9999983	8,33E-07	8,17E-07
18	1,80E-06	0,9999982	0,9999982	0,9999982	8,50E-07	8,35E-07
19	1,90E-06	0,9999981	0,9999981	0,9999981	8,65E-07	8,50E-07
20	2,00E-06	0,9999980	0,9999980	0,9999980	8,78E-07	8,65E-07
101	9,60E-06	0,9999904	0,9999904	0,9999904	1,00E-06	1,00E-06
102	9,70E-06	0,9999903	0,9999903	0,9999903	1,00E-06	1,00E-06
103	9,80E-06	0,9999902	0,9999902	0,9999902	1,00E-06	1,00E-06
104	9,90E-06	0,9999901	0,9999901	0,9999901	1,00E-06	1,00E-06
105	1,00E-05	0,9999900	0,9999900	0,9999900	1,00E-06	1,00E-06

Рисунок 5.1 – Розв'язок системи (5.10) з $h = 10^{-7}$ – перші 100 кроків

Для системи лінійних диференціальних рівнянь с постійними коефіцієнтами загального виду:

$$\frac{d\vec{Y}}{dt} = A \cdot \vec{Y}, \quad (5.15)$$

де A – матриця правих частин,

алгоритм неявного метода Ейлера має вид:

$$\vec{Y}(t+h) = \vec{Y}(t) + A \cdot \vec{Y}(t+h) \cdot h. \quad (5.16)$$

Розв'язок у матричному виді:

Неявний метод Ейлера — 1-й етап					
h= 1.00E-007					
x1			x2		
час	Ейлер	Точний	Жорсткий	Ейлер	Точний
0	1	1	1	0	0
1.00E-07	0.9999999	0.9999999	0.9999999	1.00E-07	9.52E-08
2.00E-07	0.9999998	0.9999998	0.9999998	1.90E-07	1.81E-07
3.00E-07	0.9999997	0.9999997	0.9999997	2.71E-07	2.59E-07
4.00E-07	0.9999996	0.9999996	0.9999996	3.44E-07	3.30E-07
5.00E-07	0.9999995	0.9999995	0.9999995	4.10E-07	3.93E-07
6.00E-07	0.9999994	0.9999994	0.9999994	4.69E-07	4.51E-07
9.60E-06	0.9999904	0.9999904	0.9999904	1.00E-06	1.00E-06
9.70E-06	0.9999903	0.9999903	0.9999903	1.00E-06	1.00E-06
9.80E-06	0.9999902	0.9999902	0.9999902	1.00E-06	1.00E-06
9.90E-06	0.9999901	0.9999901	0.9999901	1.00E-06	1.00E-06
1.00E-05	0.9999900	0.9999900	0.9999900	1.00E-06	1.00E-06
1.01E-03	0.9989900	0.9989905	0.9989910	1.03E-06	9.99E-07
2.01E-03	0.9979910	0.9979920	0.9979930	-2.55E-05	9.98E-07
3.01E-03	0.9969930	0.9969945	0.9969960	2.65E-02	9.97E-07
4.01E-03	0.9959960	0.9959980	0.9959990	-2.65E+01	9.96E-07
5.01E-03	0.9950000	0.9950025	0.9950050	2.64E+04	9.95E-07
6.01E-03	0.9940050	0.9940080	0.9940110	-2.64E+07	9.94E-07
7.01E-03	0.9930110	0.9930145	0.9930180	2.64E+10	9.93E-07
8.01E-03	0.9920180	0.9920220	0.9920260	-2.63E+13	9.92E-07
9.01E-03	0.9910260	0.9910305	0.9910349	2.63E+16	9.91E-07
1.00E-02	0.9900350	0.9900399	0.9900449	-2.63E+19	9.90E-07
1.10E-02	0.9890449	0.9890504	0.9890558	2.63E+22	9.89E-07

Рисунок 5.2 – Розв'язок системи (5.10) після 100 кроків і призначенням з $h = 0,001$

$$\vec{Y}(t+h) = (E - A \cdot h)^{-1} \cdot \vec{Y}(t), \quad (5.17)$$

де E – одинична матриця.

Тобто на кожному кроці методу слід обернути матрицю $E - A \cdot h$, або розв'язувати

систему лінійних алгебраїчних рівнянь (5.17).

Для автономної системи нелінійних диференціальних рівнянь загального виду:

$$\frac{d\bar{Y}}{dt} = f(\bar{Y}), \quad (5.18)$$

для використання неявного методу необхідно розкласти функцію $f(\bar{Y})$ в ряд Тейлора.

В цьому випадку система для неявного метода Ейлера приймає вид:

$$\bar{Y}(t+h) \approx \bar{Y}(t) + A \cdot \bar{Y}(t+h) \cdot h, \quad (5.19)$$

де A – матриця Якобі системи:

$$A = \frac{\partial \bar{Y}'}{\partial \bar{Y}} = \frac{\partial f(\bar{Y})}{\partial \bar{Y}}. \quad (5.20)$$

Тоді для рішення можна використовувати формулу (5.17).

5.3 Метод Розенброка

Широке застосування у розв'язанні жорстких систем набув метод *Розенброка*, який базується на неявній схемі Рунге-Кути 4-го порядку. Чисельне рішення задачі Коші для автономних систем ЗДУ відбувається за формулами:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{13}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2 - 2k_3 + \frac{2}{3}k_4, \quad (5.21)$$

де:

$$\begin{cases} k_1 = h \cdot [E - h \cdot J]^{-1} \cdot f(y_n); \\ k_2 = h \cdot [E - h \cdot J]^{-1} \cdot f(y_n - k_1); \\ k_3 = h \cdot [E - h \cdot J]^{-1} \cdot f\left(y_n + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_2\right); \\ k_4 = h \cdot [E - h \cdot J]^{-1} \cdot f\left(y_n + \frac{3}{8}k_1 + \frac{19}{24}k_2 - \frac{1}{6}k_3\right); \end{cases} \quad (5.22)$$

де y_i, y_{i+1} – вектори розв'язків на i та $i+1$ кроках;

E – одинична матриця;

J – яacobіан системи, розрахований у точці y_n

Для того, щоб розв'язувати неавтономні системи ЗДУ, необхідно додати до системи ще одне рівняння:

$$t' = 1, \quad t(0) = t_0. \quad (5.23)$$

У методі Розенброка вибір кроку інтегрування h і контроль точності організовані наступним чином:

а) обирають первісне значення h ,

б) по формулам (3.124), (3.125) проводяться розрахунки з кроками h і $2h$, отримують рішення, відповідно, y^h і y^{2h} ;

в) для кожної компоненти вектора рішення розраховують абсолютну погрішність:

$$\Delta_i = |y_i^h - y_i^{2h}|, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (5.24)$$

г) якщо $y_i^h \neq 0$, розраховується відносна погрішність:

$$\delta_i = \frac{\Delta_i}{|y_i^h|}; \quad (5.25)$$

Крок інтегрування вважають *підходящим*, якщо виконується асимптотична оцінка:

$$\delta = \max_i (\delta_i) < 15\epsilon, \quad (5.26)$$

де ϵ - задана відносна погрішність на кроці інтегрування.

У протилежному випадку крок зменшують у 2 рази, і розрахунки повторюють знов.

Якщо $\delta < \varepsilon/2$ – величина крок подвоюється.

Метод Розенброка реалізований у пакеті Scilab для розв'язання жорстких систем. Для цього необхідно визначити систему ЗДУ у вигляді окремої підпрограми. Також необхідно (але не обов'язково) визначити у вигляді окремої підпрограми матрицю Якобі системи ЗДУ. Далі у складі функції [ode](#) для розв'язання систем ЗДУ вказуємо тип рівнянь – ‘stiff’ (жорсткий) і навести у тілі функції зовнішні функції, що позначають систему рівнянь і якобіан. Частіше за все використовується мінімальна конструкція:

$$y = \text{ode}('stiff', x_0, t_0, f, jac)$$

де t_0, x_0 – початкові умови,

f – зовнішня функція, що розраховує праву частину системи,

jac – зовнішня функція, що розраховує якобіан правої частини системи ЗДУ.

Особливістю обох зовнішніх функцій є те, що *першим аргументом у списку є час* (або інша змінна, по якій відбувається диференціювання). Вона вказується незалежно від того, чи містить права частина системи цю змінну, чи ні (наприклад у випадку автономних систем)

Приклад 5.3

Проінтегрувати жорстку систему диференціальних рівнянь хімічної кінетики:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1 \cdot x_1 \cdot x_2; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_1 \cdot x_1 \cdot x_2; & x_2(0) = 1.2; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1 \cdot x_1 \cdot x_2 - k_2 \cdot x_3; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_2 \cdot x_3; & x_4(0) = 0; \end{cases} \quad (5.27)$$

Проміжок інтегрування: від 0 до 5 год, константи швидкості складають: $k_1=10^6$ л·моль⁻¹·год⁻¹, $k_2 = 1$ год⁻¹.

Розв'язання

Укладемо якобіан системи:

$$J = \left[\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{x}} \right] = \begin{bmatrix} -k_1 \cdot x_2 & -k_1 \cdot x_1 & 0 & 0 \\ -k_1 \cdot x_2 & -k_1 \cdot x_1 & 0 & 0 \\ k_1 \cdot x_2 & k_1 \cdot x_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.28)$$

Скрипт для одержання розв'язку наведено в лістингі 5.3. При наведених значеннях k_1 , k_2 і початкових умов система є вельми жорсткою: максимальне власне значення якобіану складає 10^6 , а мінімальне (якщо не брати до уваги 0) складає 1. Спроба про інтегрувати систему методом Рунге-Кути можливе лише коли крок складає 10^{-7} год, що є незадовільним з точки зору завдання – розрахувати розв'язок через 5 год.

Лістинг 5.3

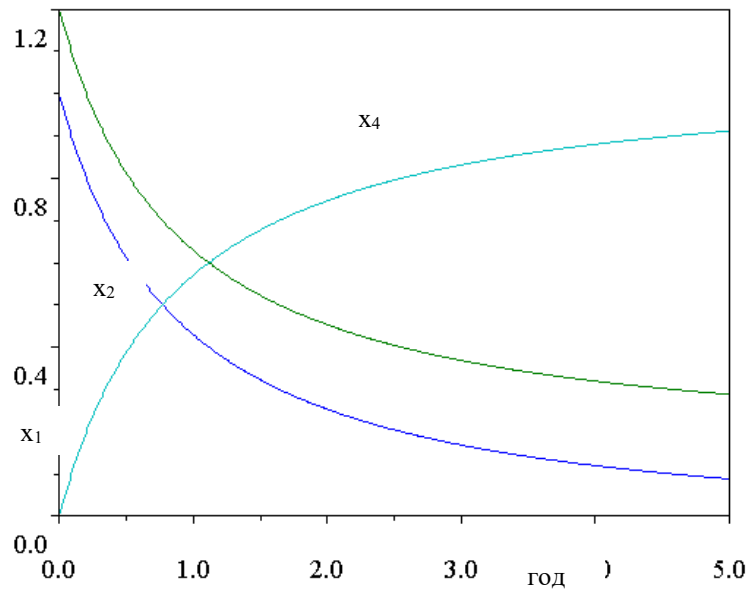
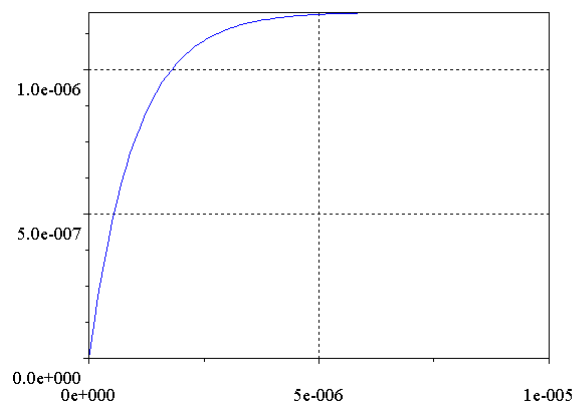
```
global k1
global k2
function [w]=syst(t,x) // Права частина системи
    w(1)=-k1*x(1)*x(2)
    w(2)=-k1*x(1)*x(2)
    w(3)=k1*x(1)*x(2)-k2*x(3)
    w(4)=k2*x(3)
endfunction
function [z]=jac(t,x) // Якобіан
    z=zeros(4,4)
    z(1,1)=-k1*x(2)
    z(1,2)=-k1*x(1)
```



```
z(2,1)=z(1,1)
z(2,2)=z(1,2)
z(3,1)=-z(2,1)
z(3,2)=-z(2,2)
z(3,3)=-k2
z(4,3)=k2
endfunction
k2=1000000;
k1=1;
t0=0;
x0=[1;1.2;0;0];
t=0:0.01:5;
y=ode('stuff',x0,t0,t,syst,jac);
plot(t,y)
```

В результаті одержуємо розв'язок у виді масиву, на основі якого будуємо графік часових змін концентрацій. На рис. 5.3 наведені часові зміни «повільних» компонент: x_1 , x_2 і x_4 . Для «швидкої» компоненти x_3 протягом 10^{-5} год встановлюється стаціонарне значення, $1,2 \cdot 10^{-6}$ (рис. 5.4). Цю криву можна одержати, якщо змінити крок інтегрування до 10^{-7} , а проміжок інтегрування до 10^{-5} . Для побудови графіка використовуємо оператор `plot(t,y(3,:))` у безпосередньому режимі. Із зростанням часу ця величина починає повільно зменшуватись практично до 0.

Відмітимо, що аналітичні розрахунки яacobіану не завжди є обов'язковими. Наприклад у даному випадку можна з функції `ode()` вилучити аналітичні розрахунки яacobіану, і це не вплине на результати. Це вказує, що у програмі, скоріше за все, відбувається чисельний розрахунок яacobіану.

Рисунок 5.3 – Криві зміни концентрацій x_1 , x_2 , x_4 (до прикладу 5.3)Рисунок 5.4 – Зміна x_3 на початковій ділянці часу

5.4 Крайові задачі. Метод стрільби

Для розв'язання задачі Коші для систем диференціальних рівнянь треба задати початкові умови, тобто значення розв'язків у деякої *однієї точки* часу. Але можна задати також значення першої з функцій-розв'язків у початковій точці, а другої – у будь-якої іншої точці, або задати значення одного й того ж розв'язку у двох точках (для системи двох ОДУ). Такі умови і задачі носять назву *крайових*.

Приклад: знайти розв'язок системи диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -0,1 \cdot x - 0,2 \cdot x \cdot y; \\ \frac{dy}{dt} = 0,1 \cdot x - 0,2 \cdot x \cdot y; \end{cases} \quad (5.27)$$

при крайових умовах $x(0)=1$ і $x(1)=0,75$

У цій задачі не задано початкових значень змінної y . Але для того, щоб виконувалось друга крайова умова, початкове значення $y(0)$ повинно мати строго визначене значення.

Крайові задачі можна сформулювати для диференціальних рівнянь високого ступеня. У випадку задачі Коші для рівнянь 2-го ступеня необхідно задати у початковій точці значення функції-розв'язку та її першої похідної. У випадку крайової задачі можна задати значення функції-розв'язку у двох точках. Приклад - диференціальне рівняння:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = x - y, \quad y(0) = 0, \quad y(1) = 2 \quad (5.28)$$

На практиці крайові задачі для систем ЗДУ використовуються у такій постановці: наявна система з m ЗДУ, що містить:

- ✓ m невідомих $x_1, x_2, \dots, x_m$;
- ✓ r граничних умов, що задані у точці $t = a$. Вони мають вид:

$$x_k(a) = x_{a_k} \quad (k=1, 2, \dots, r), \quad (5.29)$$

- ✓ $m - r$ граничних умов, що задані у точці $t = b$. Вони мають вид:

$$x_p(b) = x_{b_p} \quad (p=r+1, r+2, \dots, m), \quad (5.30)$$

Не порушуючи спільності, можна вважати, що $b > a$

Для розв'язання таких систем часто використовують наступний метод:

а) свавільно задають серію початкових умов для невідомих x_p ($p=r+1, r+2, \dots, m$) у виді $x_p(a) = z_{p-r}$,

б) проводять інтегрування системи при цих початкових умовах, знаходять розв'язки у другій крайовій точці $t=b$: $x_p(b)|_{z_{p-r}}$.

Неперервне змінюючи початкові умови по п. б), одержуємо неперервні залежності розв'язків у точці $t = b$ від початкових умов.

г) серед розв'язків знаходять ту початкову умову, вектор розв'язків у точці b , що за заданою нормою відрізняється від заданих крайових умов у цій точці в межах заданої точності.

Фактично мова йде про розв'язання системи нелінійних рівнянь з m -г невідомими початковими умовами. Особливістю цієї системи є те, що ліві частини кожного рівняння – це розв'язки диференціальних рівнянь, що одержують чисельно.

Описаний метод на першому етапі схожий на стрільбу по мішені, тому в літературі його називають *методом стрільби або пристрілки (shooting)*.

Розв'язання крайової задачі методом стрільби легко організувати у середовищі Scilab. При цьому вдається сумістити розв'язок нелінійної системи з одночасним розв'язанням диференціальних рівнянь.

Приклад 5.4

Методом стрільби в інтервалі часу $t = 0 \div 1,5$ розв'язати систему диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_1 \cdot x_2; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = x_1 - x_3^2; & x_2(1) = 2; \\ \frac{dx_3}{dt} = x_2 + x_3 \cdot t & x_3(1) = 2.4; \end{cases} \quad (5.31)$$

Побудувати графіки інтегральних кривих.

Розв'язання

Для розв'язання задачі укладаємо скрипт (лістинг 5.4). Лістинг містить

визначення змінних x_0 і t_0 , як глобальних, для їх використання у підпрограмах-функціях.

Зовнішня функція $f_i(t,x)$ розраховує праві частини системи (5.31). Зовнішня функція $f_{du}(z)$ розраховує систему ЗДУ (5.31), вихідна величина – вектор розв'язків функцій x_2 і x_3 у точці часу $t=1$. Ці значення є вхідними для функції `solve()`, що розв'язує систему неявних нелінійних рівнянь, які через розв'язок системи (5.31) виражають зв'язок між початковими умовами і значеннями в крайовій точці.

Лістинг 5.4

```
global x0
global t0

function [z]=fi(t,x)
    z(1)=x(1)*x(2)
    z(2)=x(1)-x(3)^2
    z(3)=x(2)+x(3)*t
endfunction

function [zz]=fdu(z)
x0(1)=1;
x0(2)=z(1);
x0(3)=z(2)

[y]=ode(x0,t0,1,fi);
zz(1)=(y(2)-2)^2
zz(2)=(y(3)-2.4)^2;
endfunction

//Початок розрахунків
t0=0;
```

```

z(1)=0
z(2)=0
//Розв'язок нелінійних рівнянь
zs=fsolve([z(1),z(2)],fdu)
xx0=[1;zs(1);zs(2)]
//Розв'язання системи при виявлених початкових умовах,
//побудова графіка інтегральних кривих
t=0:0.01:1.5;
[y]=ode(xx0,t0,t,fi);
plot(t,y)
xgrid()

```

Внаслідок розв'язання нелінійних рівнянь, одержали наступні початкові умови: $x_2(0) = 1.0706409$, $x_3(0) = 0.1020372$. Графіки інтегральних кривих, одержаних при цих початкових умовах наведені на рис. 5.5. Як випливає з рис. 5.5, дійсне, інтегральні криві для x_2 і x_3 прохо́дять через точки $(1;2)$ і $(1;4)$, відповідно, тобто, крайові умови виконуються і система розв'язана вірно.

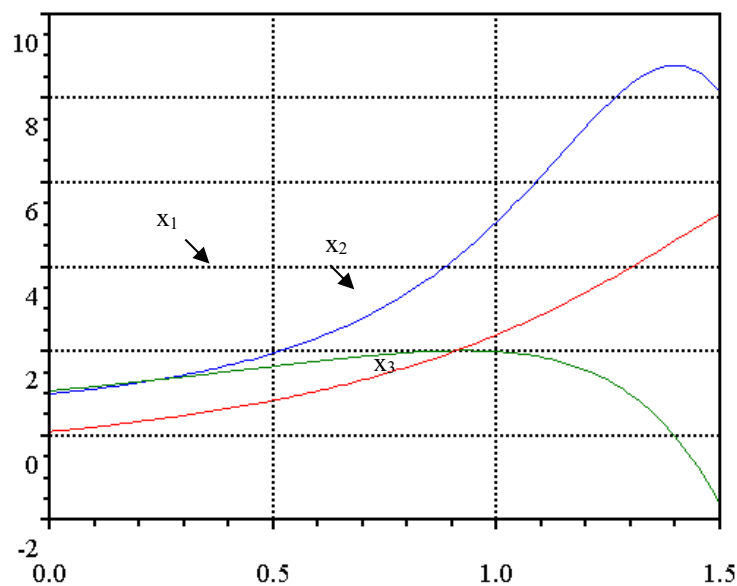


Рисунок 5.5 – Інтегральні криві системи (5.31).

Якщо у системі є 2 змінні, те можна побудувати алгоритм стрільби, оснований на розв'язанні одного нелінійного рівняння, наприклад, методом дихотомії (див. частина 1 лекц. 4):

а) спочатку шляхом підбору знаходять два початкових розв'язку $y(0) = a$, $y(0)=b$, а також – різниці:

$$\begin{cases} \delta a = y_a(t_1) - y(t_1); \\ \delta b = y_b(t_1) - y(t_1). \end{cases} \quad (5.32)$$

Значення a і b підбирають таким чином, щоб одна з різниць (5.29) була *негативною*, а друга – *позитивною*. Для визначеності будемо вважати, що $\delta a < 0$, $\delta b > 0$

б) розраховують:

$$y(0) = c = \frac{a + b}{2}; \quad (5.33)$$

в) розв'язують систему з початковою умовою (5.30), розраховують $\delta c = y_c(t_1) - y(t_1)$;

г) перевіряють умову закінчення розрахунків:

$$|a-b| < \varepsilon, \quad (5.34)$$

де ε - задане мале позитивне число (міра точності);

- якщо умова (5.34) виконується - вважають, що друга початкова умова є $y(0)=c$ і закінчують розрахунки.

- якщо умова (5.34) не виконується – перевіряємо знак δc :

- якщо $\delta c < 0$ – перепозначаємо $a=c$, $\delta a = \delta c$ і переходимо на етап б);

- якщо $\delta c > 0$ – перепозначаємо $b=c$, $\delta b = \delta c$ і переходимо на етап б).

Після отримання початкової умови систему надалі розв'язують звичайними

методами.

Контрольні запитання

- 1 Зміст поняття «жорстка система»
- 2 Як впливає швидка складова жорсткої системи на розв'язок системи ЗДУ?
- 3 Що таке «пограничний шар»?
- 4 У чому особливості чисельного розв'язання жорстких систем? Що є їхнім основним протиріччям?
- 5 Яким чином можна визначити на практиці, чи є система диференціальних рівнянь жорсткою?
- 6 У чому полягає сутність неявного методу Ейлера?
- 7 Що дозволяє неявний метод Ейлера для розв'язання жорстких систем у порівнянні із звичайним?
- 8 Як можна використати неявний метод Ейлера для розв'язання жорсткої системи нелінійних ЗДУ?
- 9 Сутність алгоритму Розенброка розв'язання ЗДУ для автономних жорстких систем
- 10 Як можна за допомогою методу Розенброка розв'язувати неавтономні системи жорстких ЗДУ?
- 11 Яким чином у методі Розенброка організовано вибір кроку інтегрування?
- 12 Зміст поняття «крайова задача» для ЗДУ та їх систем
- 13 Чи можна побудувати крайову задачу для звичайного диференціального рівняння першого ступеня?
- 15 Сутність алгоритму стрільби
- 16 Як можна реалізувати алгоритм методу стрільби в середовищі Scilab?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 5.1

- а) Перевірити, чи є жорсткими системи, що наведені в таблиці 5.1;

- б) Проінтегрувати системи в інтервалі часу від 0 до 2 при заданих початкових умовах, склавши скрипт Scilab;
- в) побудувати графіки інтегральних кривих;
- г) на основі розрахунків власних значень якобіану визначити, які зі змінних є швидкими, а які – повільним.

Таблиця 5.1 – Варіанти завдання 5.1

Система	№ вар	k_1	k_2	k_3	k_4
$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1 x_1 x_2 + k_2 x_3; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_1 x_1 x_2 + k_2 x_3; & x_2(0) = 1,2; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1 x_1 x_2 - (k_2 + k_3) x_3; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_3 x_3 - k_4 x_4; & x_4(0) = 0; \\ \frac{dx_5}{dt} = k_4 x_4; & x_5(0) = 0; \end{cases}$	1	10^6	1	1	1
	2	1	10^6	1	1
	3	1	1	10^6	1
	4	1	1	1	10^6
	5	10^6	1	1	10^6
	6	10^6	1	10^6	1

Продовження табл. 5.1

Система	№ ва р	k_1	k_2	k_3	k_4
$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 - k_2x_1x_2 + k_3x_3; & x_1(0) = 1.2; \\ \frac{dx_2}{dt} = k_1x_1 - k_4x_2x_4; & x_2(0) = 0; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1x_1 - k_3x_1x_3 + k_3x_4; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_2x_1x_3 - k_3x_4 - k_4x_2x_4; & x_4(0) = 0; \\ \frac{dx_5}{dt} = k_4x_2x_4; & x_5(0) = 0; \end{cases}$	7	10^6	1	1	1
	8	1	10^6	1	1
	9	1	1	10^6	1
	10	1	1	1	10^6
	11	10^6	1	1	10^6
	12	10^6	1	10^6	1
$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1x_2 - k_3x_1x_3 + k_2x_3; & x_1(0) = 1.2; \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_1x_1x_2 - k_4x_2x_4 + k_2x_3; & x_2(0) = 1; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1x_1x_2 - k_2x_3 - k_3x_1x_3; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_3x_1x_3 - k_4x_2x_4; & x_4(0) = 0; \\ \frac{dx_5}{dt} = k_4x_2x_4; & x_5(0) = 0; \end{cases}$	13	10^6	1	1	1
	14	1	10^6	1	1
	15	1	1	10^6	1
	16	1	1	1	10^6
	17	10^6	1	1	10^6
	18	10^6	1	10^6	1

$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1 x_1; & x_1(0) = 1.2; \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_2 x_2 x_3 + k_3 x_4; & x_2(0) = 1; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1 x_1 + k_3 x_4 - k_2 x_2 x_3; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_2 x_2 x_3 - (k_3 + k_4) x_4; & x_4(0) = 0; \\ \frac{dx_5}{dt} = k_4 x_4; & x_5(0) = 0; \end{cases}$	19	10_6	1	1	1
	20	1	1_0^6	1	1
	21	1	1	1_0^6	1
	22	1	1	1	1_0^6
	23	10_6	1	1	1_0^6
	24	10_6	1	1_0^6	1

Продовження табл. 5.1

Система	№ ва р	k_1	k_2	k_3	k_4
$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1 x_1 x_2^2 - k_3 x_1 x_3 + k_2 x_3; & x_1(0) = 1; \\ \frac{dx_2}{dt} = \frac{1}{2} k_2 x_3 - k_1 x_1 x_2^2 - k_4 x_2 x_4; & x_2(0) = 0.8; \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1 x_1 x_2^2 - k_1 x_1 x_3 + k_3 x_4; & x_3(0) = 0; \\ \frac{dx_4}{dt} = k_3 x_1 x_3 - k_4 x_2 x_4; & x_4 = 0; \\ \frac{dx_5}{dt} = k_4 x_2 x_4; & x_5 = 0; \end{cases}$	25	10_6	1	1	1
	26	1	1_0^6	1	1
	27	1	1	1_0^6	1
	28	1	1	1	1_0^6
	29	10_6	1	1	1_0^6

	30	10 6	1	1 0 ⁶	1
--	----	---------	---	---------------------	---

Завдання 5.2

Методом стрільби розв'язати системи рівнянь, що наведені у табл. 5.2. Інтегрування провести від початкових до крайових вимог

Таблиця 5.2 – Варіанти завдань – системи з крайовими умовами

№	Система	Початкові умови	Граничні умови	Кінцева точка
1	$\begin{cases} x_1' = -2 \cdot x_1^2 - x_1 \cdot x_2 \\ x_2' = 2 \cdot x_1^2 + x_1 \cdot x_2 - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_1(0)=1$	$x_2(1)=2,$ $x_3(2)=1$	3
2	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_2^2 \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_2^2 - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_1(0)=1$ $x_2(0)=0$	$x_3(1)=1$	2

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Граничні умови	Кінцева точка
3	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_2 \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_2 - 2 \cdot x_2 \\ x_3' = 2 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_3(0)=0$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=2$	3
4	$\begin{cases} x_1' = -x_1^{0,5} - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1^{0,5} + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_1(0)=0,5$ $x_2(0)=1$	$x_3(1)=1$	2
5	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_1(0)=1$	$x_2(1)=1$ $x_3(1)=1$	2
6	$\begin{cases} x_1' = -x_1 - x_1^2 \cdot x_3 \\ x_2' = x_1 + x_1^2 \cdot x_3 - 2 \cdot x_2 \\ x_3' = 2 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_2(0)=0$ $x_3(0)=0$	$x_1(1)=1$	2
7	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + \ln[x_1 \cdot x_3^{1,5}] - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_2(0)=0,5$	$x_1(1)=1,5$ $x_2(1)=1$	2
8	$\begin{cases} x_1' = -x_1 \cdot x_2 - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_3(0)=0$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=2$	3
9	$\begin{cases} x_1' = x_1 \cdot t \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=3$	$x_3(2)=2$	3

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Граничні умови	Кінцева точка
10	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} \\ x_2' = x_1 + x_1 \cdot x_3^{1,5} - 3 \cdot x_2 \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{aligned} x_1(1) &= 1 \\ x_3(1) &= 1,5 \end{aligned}$	$x_2(2) = 2$	3
11	$\begin{cases} x_1' = \exp(-x_1 \cdot x_2) - x_1 \cdot x_3^{1,5} + t \\ x_2' = x_1 + \ln[x_1 \cdot x_3^{1,5}] - 3 \cdot x_2 - t \\ x_3' = 3 \cdot x_2 \end{cases}$	$\begin{aligned} x_1(1) &= 1 \\ x_3(1) &= 1 \end{aligned}$	$x_2(2) = 2$	3
12	$\begin{cases} x_1' = x_1 \cdot t - x_3 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = \exp(x_2) + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{aligned} x_1(1) &= 1 \\ x_2(1) &= -1 \end{aligned}$	$x_3(2) = 2$	3
13	$\begin{cases} x_1' = x_1 \cdot t - x_3 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \end{cases}$	$\begin{aligned} x_1(0) &= 1 \\ x_2(0) &= 1 \end{aligned}$	$x_3(2) = 1$	2
14	$\begin{cases} x_1' = \exp(x_1 \cdot t) - x_3 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_3(0) = 1$	$\begin{aligned} x_1(1) &= 1 \\ x_2(1) &= 1 \end{aligned}$	2
15	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} \\ x_2' = \exp(x_1 - x_3 \cdot t) \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$\begin{aligned} x_1(0) &= 1, \\ x_2(0) &= -1 \end{aligned}$	$x_3(1) = 0,5$	2
16	$\begin{cases} x_1' = \frac{x_2 \cdot t}{x_1} \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_3(0) = 0$	$\begin{aligned} x_1(1) &= 1 \\ x_2(1) &= 2 \end{aligned}$	3

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Граничні умови	Кінцева точка
17	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_3 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=-1$	$x_3(2)=2$	3
18	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_3(1)=1,5$	$x_2(2)=2$	3
19	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_1(0)=1,$ $x_2(0)=-1$	$x_3(1)=0,5$	2
20	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_3(1)=1,5$	$x_2(2)=2$	3
21	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_3(1)=1$	$x_2(2)=2$	3
22	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{0,5} - x_2 \\ x_2' = x_1 - x_3 \cdot t \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=-1$	$x_3(2)=2$	3
23	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \cdot t \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$x_3(0)=0$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=2$	3
24	$\begin{cases} x_1' = (x_1 \cdot t)^{1,5} + x_2 \cdot x_1 \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t \end{cases}$	$x_1(0)=0,5$ $x_2(0)=1$	$x_3(1)=1$	2

Продовження табл. 4.4

№	Система	Початкові умови	Граничні умови	Кінцева точка
25	$\begin{cases} x_1' = \frac{(x_1 \cdot t)^{1,5}}{x_2 + x_1 \cdot t} \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_3(1)=1,5$	$x_2(2)=2$	3
26	$\begin{cases} x_1' = x_1 - x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_3(1)=1$	$x_2(2)=2$	3
27	$\begin{cases} x_1' = x_1 - x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t + \frac{x_3}{x_1 \cdot x_2} \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=-1$	$x_3(2)=2$	3
28	$\begin{cases} x_1' = x_1 + x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \cdot x_3 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \end{cases}$	$x_1(0)=1$ $x_2(0)=1$	$x_3(2)=1$	2
29	$\begin{cases} x_1' = x_1 \cdot x_2 \cdot t \\ x_2' = x_1 \cdot x_3 \cdot t \cdot \\ x_3' = x_2 + x_3 \cdot x_1 \cdot t^2 \end{cases}$	$x_3(0)=1$	$x_1(1)=1$ $x_2(1)=1$	2
30	$\begin{cases} x_1' = x_1 + x_3 \\ x_2' = x_2 \cdot t - x_1 \\ x_3' = x_1 \cdot x_2 \end{cases}$	$x_1(0)=1,$ $x_2(0)=-1$	$x_3(1)=0,5$	2

ЛЕКЦІЯ 6 МЕТОД СІТОК ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ

Мета лекції

- 1 Ознайомити слухачів з загальними відомостями про рівняння математичної фізики, їх типів і постановки задач їх розв'язання.
- 2 Ознайомитись з основами методу сіток, принципами побудови шаблонів і апроксимації похідних
- 3 Ознайомитися з організацією розрахунків за методом сіток для розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа

План лекції

[6.1 Загальні відомості про рівняння математичної фізики](#)

[6.2 Початкові та крайові умови](#)

[6.3 Метод сіток](#)

[6.4 Задача Діріхле для рівняння Лапласа](#)

[6.5 Розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа методом сіток](#)

[Контрольні запитання](#)

6.1 Загальні відомості про рівняння математичної фізики

Диференціальні рівняння у часткових похідних моделюють різноманітні фізичні процеси, у яких функція, що досліджується, залежить від декількох змінних. Моделі такого типу носять назву „моделі з розподіленими параметрами”. У цьому розділі будуть розглянуті чисельні методи розв'язку деяких задач для диференціальних рівнянь з частковими похідними другого порядку з двома незалежними змінними. Такі рівняння ще носять назву рівнянь математичної фізики. У загальному випадку вони мають вид:

$$F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy})=0, \quad (6.1)$$

де x, y – незалежні змінні,

u – функція, що шукається;

$u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}$ – її перші та другі часткові похідні по аргументам.

Розв'язок рівняння (1) – функція $u = u(x, y)$, яка переводить рівняння (6.1) у тотожність. Графік рішення – поверхня у просторі $Oxuy$ (інтегральна поверхня). Приклад наведено на рис. 6.1.

Приклад 6.1

Розв'язати рівняння:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (6.2)$$

Розв'язання

Інтегруючи це рівняння по y 2 рази, отримаємо:

$$u = y \cdot \varphi(x) + \psi(x), \quad (6.3)$$

де $\varphi(x)$, $\psi(y)$ – свавільні функції від x .

Інтегральні поверхні – це лінійчаті поверхні, твірні якої є паралельними координатної площині Oxy .

Рівняння (6.1) носить назву *цілком лінійного* (або просто *лінійного*), якщо воно водночас:

- ✓ є рівнянням *першого ступеня* відносно функції u і усіх її перших та других похідних;
- ✓ *не містить добутків похідних*.

Це означає, що лінійне рівняння може бути записано у виді:

$$A \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} + cu = F(x, y), \quad (6.4)$$

де коефіцієнти A, B, C, a, b, c можуть залежити від x та y .

Зокрема якщо ці коефіцієнти не залежать від x та y – рівняння (6.4) є *лінійним диференціальним рівнянням з постійними коефіцієнтами*.

Величина

$$D = A \cdot C - B^2 \quad (6.5)$$

носить назву *дискримінанта рівняння*. В залежності від знака функції D лінійне диференціальне рівняння відноситься у даної області до одного з наступних типів¹⁾:

¹⁾ Назви типів рівнянь використані за аналогією з аналітичною геометрією, де, як відомо, віднесення до одного з трьох типів рівнянь відбувається за знаком детермінанту квадратичної форми відповідного канонічного рівняння

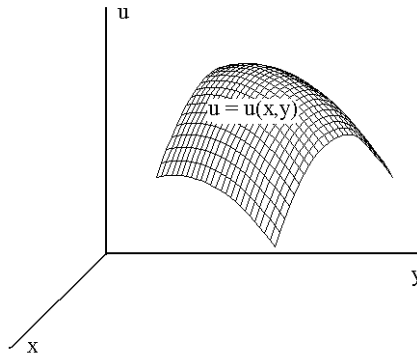


Рисунок 4.1 – Інтегральна поверхня – розв'язок рівняння (4.1)

- $D > 0$ — еліптичний тип;
- $D = 0$ — параболічний тип;
- $D < 0$ — гіперболічний тип;
- D не зберігає постійного знаку — змішаний тип.

Тип лінійного рівняння (6.4) є його важливою особливістю. Він зберігається при будь-якому не виродженому перетворенні виду:

$$\xi = \varphi(x, y), \quad \eta = \psi(x, y). \quad (6.6)$$

Нагадаємо, що перетворення (6.6) називається *невиродженим* у випадку, коли його якобіан не дорівнює нулю:

$$\frac{\partial(\varphi, \psi)}{\partial(x, y)} \neq 0. \quad (6.7)$$

Найважливіші типи рівнянь математичної фізики:

а) *рівняння Лапласа*:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (6.8)$$

Це рівняння описує температуру $u = u(x, y)$ платівки у точці (x, y) при

стаціонарному розподілі і відсутності джерел тепла. Рівняння (6.8) відноситься до еліптичного типу, в ньому $A = 1$, $B = 0$, $C = 1$, $D > 0$;

б) рівняння теплопровідності:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F(x, t), \quad (6.9)$$

де $u=u(x, t)$ – температура точки однорідного тонкого стержня на відстані x від початку для кожного моменту часу t ,

a – постійна, що залежить від фізичних властивостей стержня,

$F(x, t)$ – функція, що зв'язана з густиною джерел розподілу тепла.

Якщо у стержні відсутні джерела тепла, рівняння теплопровідності має вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (6.10)$$



ЛАПЛАС П'ЄР СИМОН
(1749-1827)

великий французький математик і астроном. Зробив дуже значений внесок в більшість розділи математики, зокрема в теорію диференціальних рівнянь і теорію ймовірностей. Член Французької Академії наук. Брав участь у експедиції Наполеона в Єгипет, був короткий час при ньому міністром, але вважав за краще творчу наукову діяльність

Якщо увести заміну $\tau = a^2 t$, то в нових координатах одержимо *приведене* рівняння теплопровідності:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (6.11)$$

Для рівняння теплопровідності $A = 0$, $B = 0$, тобто $D = 0$ і рівняння (6.9-6.11) належать до *параболічного* типу;

в) *хвильове* рівняння:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F(x, t), \quad (6.12)$$

де $u = u(x, t)$ – поперечний зсув точки однорідної струни з абсцисою x при наявності зовнішньої сили для кожного моменту часу t (рис. 6.2),

a – постійна,

$F(x, t)$ – функція що залежить від зовнішньої сили

Рівняння (6.12) є *неоднорідним* і носить назву *рівняння коливань струни*. Якщо зовнішня сила відсутня, то рівняння (6.12) перетворюється у однорідне рівняння (6.13) яке носить назву *рівняння вільних коливань струни*.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (6.13)$$

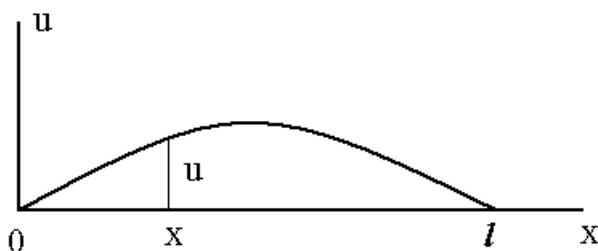


Рисунок 6.2 – Поперечний зсув струни

Рівняння (6.12) і (6.13) відносяться до *гіперболічного типу*.

З лінійним диференціальним рівнянням (6.4) зв'язане звичайне диференціальне рівняння:

$$A(dy)^2 - 2Bdx dy + C(dx)^2 = 0, \quad (6.14)$$

яке носить назву *характеристичного рівняння*.

Розв'язки рівняння (6.14) називаються *характеристиками* рівняння (6.4).

6.2 Початкові та крайові умови

Диференціальні рівняння у часткових похідних у загальному випадку мають нескінченну множину розв'язків. Якщо фізичний процес описується такими рівняннями, для однозначної характеристики необхідно приєднати *початкові та граничні умови*.

Відрізнити початкові і граничні умови можна лише у випадку, коли перша із змінних – час, а друга – просторова координата. Тоді:

- ✓ умови, що відносяться до *початкового моменту часу* є початковими,
- ✓ умови, що відносяться до *фіксованих значень координат* (що, як правило, лежать на межі області допустимих значень) – крайовими (граничними).

Розглянемо на прикладі рівняння теплопровідності (6.11) типи умов. У початковий момент часу t_0 для внутрішніх точок стержня задають початковий розподіл температури. Це приводить до початкових умов:

$$u(x, t_0) = f(x), \quad (6.15)$$

де $0 < x < \ell$,

ℓ - довжина стержня

Однак однієї умови (6.15) недостатньо для забезпечення однозначності розв'язку диференціального рівняння: розподіл температури по стержню у наступні моменти часу *залежить* від того, у якому режимі знаходяться *кінці стержня* $x=0$ і $x=l$ (чи є нагрів або витік тепла);

В залежності від теплового режиму кінця стержня $x = 0$ маємо наступні крайові умови:

а) на кінці $x = 0$ стержня *підтримується заданий температурний закон*:

$$u(0,t) = \varphi(t), \quad (6.16)$$

де $\varphi(t)$ – відома функція.

Якщо $\varphi(t) = 0$ – крайова умова має вид:

$$u(0,t) = 0; \quad (6.17)$$

б) кінець стержня $x = 0$ є *теплоізованим*, витік тепла в навколишнє середовище відсутній:

$$u_x(0,t) = 0; \quad (6.18)$$

в) на кінці стержня відбувається *випромінювання тепла* у навколишнє середовище, температура середовища змінюється за заданим законом:

$$u(0,t) + \alpha \cdot u_x(0,t) = \varphi(t), \quad (6.19)$$

де α - постійна випромінювання,

$\varphi(t)$ – відома функція.

Якщо температура зовнішнього середовища дорівнює нулю, то:

$$u(0,t) + \alpha \cdot u_x(0,t) = \varphi(t), \quad (6.20)$$

Змішану крайову умову (6.19) можна вважати *загальною*, оскільки:

а) при $\alpha = 0$ з (6.19) отримаємо крайову умову (6.16);

б) при $\alpha = \infty$ отримаємо крайову умову (6.18).

Аналогічні крайові умови можуть бути сформульовані для правого кінця стержня з $x = \ell$. Наприклад умова (6.19) переходить до:

$$u(\ell, t) + \alpha \cdot u_x(\ell, t) = \varphi(t). \quad (6.21)$$

Комбінуючи крайові умови для $x = 0$ і $x = \ell$, отримаємо крайові задачі для стержня, що при наявності початкової умови (6.15) будуть мати єдиний розв'язок.

Загальна постановка задачі з початковими умовами: нехай дано диференціальне рівняння:

$$\begin{aligned} A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + \\ + b(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + c(x, y)u = F(x, y). \end{aligned} \quad (6.22)$$

Пошук розв'язку $u = u(x, y)$ рівняння (6.22), що задовольняє початковим умовам:

$$u(x, y_0) = \varphi(x); \quad u_y(x, y_0) = \varphi_1(x), \quad (6.23)$$

називається *задачею Коші*, а самі умови називаються *початковими даними Коші*.

Геометрична інтерпретація задачі Коші: треба знайти інтегральну поверхню $u = u(x, y)$ рівняння (6.22), що

а) *проходить* через дану просторову криву:

$$y = y_0, u = \varphi(x); \quad (6.24)$$

б) і *дотикається* у точці $M(x, y_0, u)$ цієї кривої заданої системи векторів $\mathbf{a}$, що:

- 1) розташовані у площині $x = \text{const}$;
- 2) складають з віссю Oy кут β , який визначається рівнянням:

$$\operatorname{tg} \beta = \varphi_1(x). \quad (6.25)$$

Геометрична інтерпретація наведена на рис. 6.3.

Умови (6.23) задають початкові дані Коші на прямої $y = y_0$. Це не є обов'язковим: можна задавати початкові умови *на будь якій гладкій кривій*:

$$\Phi(x, y) = 0. \quad (6.26)$$

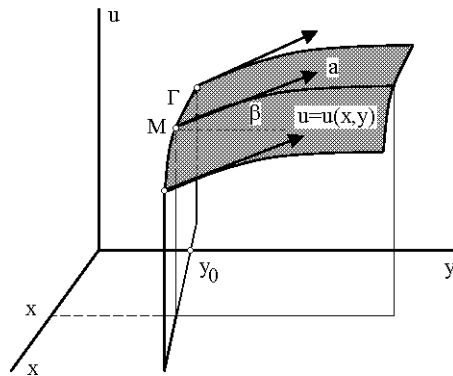


Рисунок 6.3 – Інтерпретація початкових умов Коші

Таким чином приходимо до *загальної задачі Коші*: знайти рішення $u = u(x, y)$ диференціального рівняння (6.22), що задовольняє початковим умовам:

$$u|_{\gamma} = \varphi(x, y); \quad \frac{\partial u}{\partial x}|_{\gamma} = \varphi_1(x, y). \quad (6.27)$$

де символ $|_{\gamma}$ означає, що умови задані на *кривій* Γ

Задача Коші ставиться для рівнянь (6.22):

- а) гіперболічного типу;
- б) параболічного типу.

Для рівнянь еліптичного типу задача Коші як правило *не розглядається*. Це пов'язано з тим, що для рівнянь еліптичного типу ця задача є *некоректно поставленою*: мізерно малі зміни початкових даних можуть призвести до суттєвих змін рішення.

6.3 Метод сіток

Найбільш розповсюдженим методом наближеного рішення крайових задач математичної фізики є *метод сіток* або *метод скінчених різниць*, ідея якого належить Л.Ейлеру. Сутність методу сіток:

- ✓ область D *неперервної* зміни аргументів у початкової задачі замінюється на *дискретну* множину точок (вузлів) G , що називається *сіткою*;
- ✓ диференціальні рівняння замінюються *скінчено-різницеви*ми рівняннями. При цьому *похідні* замінюються *розділеними різницями*. Внаслідок цього отримують системи алгебраїчних рівнянь для функцій дискретних аргументів;
- ✓ початкові та крайові умови замінюються різницевиими початковими та крайовими умовами для сі точної функції;
- ✓ отриману систему скінчено-різницевих алгебраїчних рівнянь можна розв'язувати будь-яким методом і визначати чисельні значення шуканої функції у вузлах сітки.

Сітку для розв'язку можна побудувати декількома способами, з врахуванням конкретних умов задачі, що розв'язується. На площині використовують такі типи сіток:

- квадратні,
- прямокутні,
- трикутні,
- шестикутні.

Ми обмежимося розглядом прямокутної сітки, що створюється системою прямих: $x_i = x_0 + i \cdot h$; $y_k = y_0 + k \cdot \ell$ ($i, k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Позитивні постійні числа h і ℓ називаються *кроками сітки* по осі OX та OY , відповідно.

Точки перетину прямих (x_i, y_k) називаються *вузлами сітки*.

Два вузли називаються *сусідніми*, якщо вони вилучені друг від друга у напрямку осей ОХ та ОУ на відстань, що дорівнює кроку сітки у тому напрямку.

Вузли сітки:

- ✓ або належать області D;
- ✓ або відстоять від її границі Γ на відстані, що є меншою за крок.

Вузол сітки називається *внутрішнім*, якщо усі його чотири сусідніх вузла належать області D (рис. 6.4). Якщо вузол лежить на границі або має не більше трьох сусідніх вузлів, що належать області D, він називається *граничним вузлом*.

Апроксимація диференціального рівняння різницеvim:

а) позначимо значіння шуканої функції $u(x, y)$ у вузлі (x_i, y_k) через $u_{i,k}$;

б) у кожному *внутрішньому* вузлі сітки замінімо часткові похідні функції їх кінцевими різницями, користуючись формулами чисельного диференціювання:

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,k} - u_{i-1,k}}{2h}; \\ \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial y} \approx \frac{u_{i,k+1} - u_{i,k-1}}{2\ell}; \end{cases} \quad (6.28)$$

в) в *граничних* точках використовують менш точні формули для похідних:

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,k} - u_{i,k}}{h}; \\ \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial y} \approx \frac{u_{i,k+1} - u_{i,k}}{\ell}; \end{cases} \quad (6.29)$$

г) другі часткові похідні в кожному *внутрішньому* вузлі заміняють різницями:

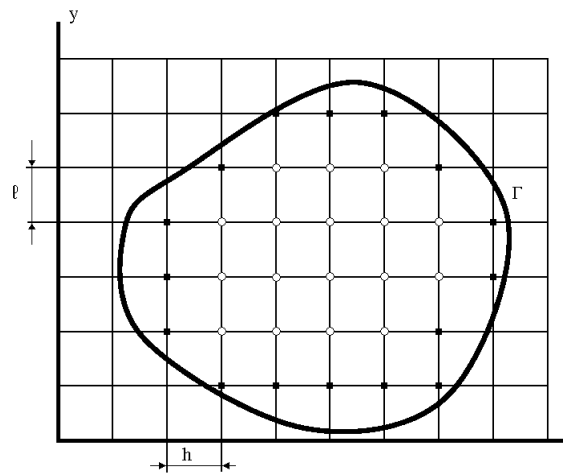


Рисунок 6.4 – Прямокутна сітка. Γ – границя області D , $\bullet$ – граничні вузли сітки, $\circ$ – внутрішні вузли сітки

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{\ell^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} \approx \frac{u_{i+1,k+1} - u_{i+1,k-1} - u_{i-1,k+1} + u_{i-1,k-1}}{4h\ell}. \end{cases} \quad (6.30)$$

В результаті заміни у кожному внутрішньому вузлі отримаємо кінцево-різницеве алгебраїчне рівняння, що зв'яже значення функції u_{ik} і значення шуканої функції у сусідніх вузлах. Тобто одержуємо *різницеву апроксимацію* диференціального оператора вхідного рівняння.

Апроксимація граничних умов. Граничні вузли, як правило, не будуть знаходитись на границі Γ . Тому необхідно замінити граничні умови для диференціального рівняння граничними умовами для різницевого рівняння, що укладається тільки для внутрішніх вузлів сітки. Найбільш широко використовуються 2 методи:

а) *простого зсуву*, тобто прийняти, що значення функції u_{ik} у граничних вузлах,

що помічені квадратиками (рис. 6.3), дорівнює функції $f(x,y)$ у найближчій точці границі Γ :

$$u|_{\Gamma} = f(x,y), \quad (6.31)$$

де $u|_{\Gamma}$ – крайова умова задачі;

б) методом лінійної інтерполяції Коллатца.

У методі Коллатца для кожного вузла A розглянемо на прямій сітці:

- ✓ найближчу точку B , що лежить на границі Γ і вилучена від A на відстань $\delta < h$;
- ✓ найближчий внутрішній вузол C (рис. 6.5)

Вважаємо, що на лінії BC зміна граничної функції від u_B у точці B до функції $u(C)$ у внутрішній точці C відбувається за лінійним законом:

$$u(X) = a + b \cdot X, \quad (6.32)$$

де X – будь яка точка на прямій CB , що лежить між B та C на відстані X від точки C ;

Вважаємо точку C за початок відріку, тобто цій точці $X = 0$. Звідси з (6.32):

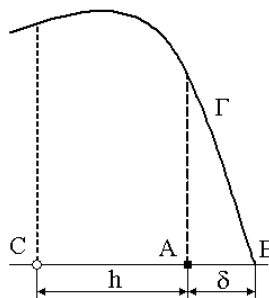


Рисунок 6.5 – Метод лінійної інтерполяції Коллатца

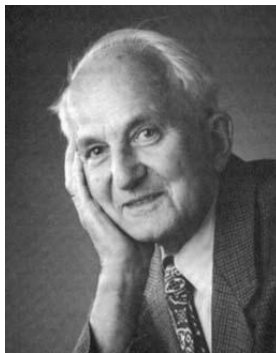
$$a = u(C); \quad (6.33)$$

- у точці В, що знаходиться на відстані $X = h + \delta$ від С:

$$f(B) = f(B) = a + b \cdot (h + \delta) = u(C) + b \cdot (h + \delta), \quad (6.34)$$

звідси:

$$b = \frac{f(B) - u(C)}{h + \delta}; \quad (6.35)$$



КОЛЛАТЦ ЛОТАР

(1910-1990)

Німецький математик, професор Дрезденського технічного університету, відомий роботами з диференціальних рівнянь, алгебри, прикладної математики. Автор 9 книг з математики, декілька з них були перекладені на російську мову у 60-70 рр.

Підставимо у (6.32) вирази (6.33) і (6.35), при $X = h$ отримаємо:

$$u_A = f(h) = \frac{u(C) \cdot \delta + f(B) \cdot h}{h + \delta}. \quad (6.36)$$

Формула Коллатца (6.36) дозволяє *перенести граничні умови* на граничний вузол сітки з погрішністю порядку h^2 . Якщо область D є прямокутною, значення функції у граничних точках точно дорівнюють значенням граничної функції.

Погрішність методу сіток складається з:

- ✓ погрішності за рахунок заміни диференціального рівняння різницеvim;

- ✓ погрішності апроксимації граничних умов;
- ✓ погрішності наближеного рішення різницевого рівняння.

Різницева задача повинна мати властивості *стійкості* і *збіжності*.

Стійкість різницевої схеми означає, що малим змінам початкових умов відповідають малі зміни розв'язку різницевої задачі.

Збіжність схеми означає, що при необмеженому зменшенні параметрів сітки послідовність рішень буде рівномірно збігатися з точним рішенням крайової задачі.

6.4. Задача Діріхле для рівняння Лапласа

Постановка задачі: необхідно знайти неперервну функцію $u=u(x,y)$, що задовольняє всередині деякої кінцевої області D еліптичному рівнянню Лапласа:

$$\Delta u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad (6.37)$$

а на границі Γ цієї області – умові:

$$u(x,y)|_{\Gamma} = f(x,y) \quad (4.38)$$

де $f(x,y)$ – задана неперервна на Γ функція.

Вважаємо, що Γ – простий кусково-гладкий контур.

Задачу пошуку розв'язання еліптичного рівняння 2-го порядку, за умовою, що розв'язок на границі приймає наперед задане значення, називається *задачею Діріхле* або *першою крайовою задачею*.

Для розв'язання:

- а) оберемо квадратну сітку з кроком h ;
- б) для укладання різницевого рівняння скористуємося формулою (6.30);
- в) визначаємо *шаблон* сітки. Множина вузлів, значення сіткової функції u_{ik} яких входять в різницеве рівняння, називається шаблоном. В різницевого аналог рівняння (4.37):

$$\frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2} + \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{h^2} = 0 \quad (4.39)$$

наявні елементи, що розташовані справа, зліва, зверху та знизу від елементу u_{ik} (рис. 6.6), тобто, шаблон має форму хреста і носить назву шаблон-хрест;

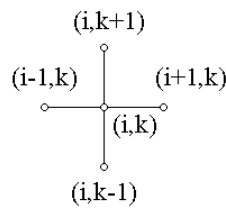


Рисунок 6.6 – Шаблон „хрест” для еліптичного рівняння

г) перетворимо рівняння (6.39) до виду (6.40):

$$u_{ik} = \frac{1}{4} \cdot (u_{i-1,k} + u_{i+1,k} + u_{i,k+1} + u_{i,k-1}) \quad (6.40)$$

Отримали систему лінійних алгебраїчних рівнянь (6.40). Доведено, що система (6.40) завжди сумісна і має єдине рішення. Розв'язок системи можна отримати методом Гауса. При наявності великої кількості вузлів доцільно використовувати метод прогонки або ітераційні методи.

Специфічним ітераційним методом для розв'язку системи (6.40) є метод *осереднення Лібмана*, який є варіантом методу Гауса-Зейделя:

а) обираємо початкові наближення ;

б) послідовні наближення для внутрішніх вузлів сіткової області розраховуємо по формулі:



ДІРІХЛЕ ПЕТЕР ГУСТАВ
ЛЕЖЕН
(1805-1859)

видатний німецький математик, професор Берлінського і Гетінгенського університетів, член Берлінської і Паризької академій наук, іноземний член Петербурзької академії наук. Зробив суттєвий внесок в математичний аналіз, теорію чисел, диференціальні рівняння і математичну фізику.

$$u_{i,k}^{(n)} = \frac{1}{4} \cdot (u_{i-1,k}^{(n-1)} + u_{i+1,k}^{(n-1)} + u_{i,k-1}^{(n-1)} + u_{i,k+1}^{(n-1)}), \quad n = 1, 2, \dots; \quad (6.41)$$

в) ітераційний процес продовжують, поки не стане виконуватися нерівність:

$$|u_{i,k}^{(n+1)} - u_{i,k}^{(n)}| < \varepsilon, \quad (6.42)$$

де ε - мале наперед задане число, що характеризує точність розрахунків.

Доведено, що для будь-якого кроку h процес Лібмана збігається до точного розв'язку незалежно від вибору початкового наближення.

Погрішність наближеного рішення має порядок $O(h^2)$.

Для вибору початкового наближення часто користуються таким правилом: оскільки значення шуканої функції u_{ik} завжди обмежено зверху і знизу:

$$m = \min_D f(x, y) \leq u_{i,k} \leq M = \max_D f(x, y), \quad (6.43)$$

розумно обирати за $u_{i,k}^{(0)}$ середнє арифметичне величин $u(x, y)$ у 4-х граничних точках, що розташовані на одній горизонталі та вертикалі з точкою $u_{i,k}$.

Доведено, що погрішність від заміни диференціального рівняння (6.37) різницевиими рівняннями (6.40) має порядок $O(h^2)$ і оцінюється за допомогою нерівності:

$$|R_{ik}| \leq \frac{h^2}{6} \cdot M_1; \quad M_1 = \max_D \left\{ \left| \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right|, \left| \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right| \right\}. \quad (6.44)$$

Різницева схема (6.40) має властивості стійності та збіжності.

6.5 Розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа методом сіток у прямокутній області.

У цьому підрозділі будуть розглянуті деталі розв'язання задачі Діріхле для рівняння Лапласа методом сіток.

Приклад 6.2

Нехай функція $u(x, y)$ задовольняє всередині прямокутної області $D = \{(x, y) / 0 \leq x \leq 4; 0 \leq y \leq 3\}$ рівнянню Лапласа (6.37) з граничними умовами:

$$\begin{aligned} u|_{x=0} &= 0; \quad u|_{y=0} = 0; \\ u|_{x=4} &= \frac{y^2}{9}; \quad u|_{y=3} = \frac{x^2}{16}; \end{aligned} \quad (6.45)$$

Необхідно розв'язати задачу крайову задачу Діріхле, обрав квадратну сітку з кроком $h = 1$

Розв'язання

Схема граничної області та сітки наведена на рис. 6.7. Оскільки в Scilab не передбачено використання нульового індексу елементів матриць, починаємо нумерацію індексів з номеру 1. На рис. 6.7 наведено нумерацію вузлів у відповідності з цим.

Розв'язання задачі проведемо методом Лібмана. Алгоритм розв'язання буде таким:

а) задаємо вхідні дані:

- 1) координати прямокутної області (нижнього лівого та крайнього правого кутів) ;
- 2) кількість кроків по кожній зі змінних;
- 3) ϵ - точність розв'язання системи рівнянь ([6.41](#));

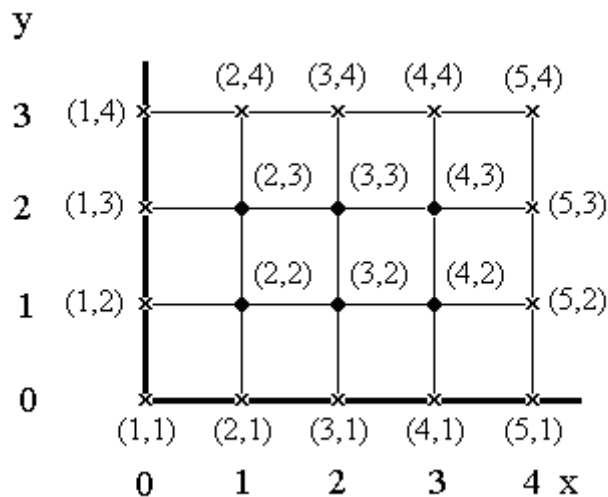


Рисунок 6.7 – Гранична область і крайові умови задачі Діріхле

б) створюємо 4 підпрограми-функції для розрахунків крайових умов. В разі переходу до задачі з іншими крайовими умовами у них необхідно вносити відповідні зміни;

в) задаємо початкові наближення для внутрішніх точок. За них обираємо *середні значення точок крайових умов*, що лежать на осях x і y , що проходять через точку, тобто:

$$u^0(i, j) = \frac{u(1, j) + u(nx + 1, j) + u(i, 1) + u(ny + 1, 1)}{4}; \quad (6.46)$$

г) реалізуємо ітераційний метод Лібмана, до тих пір, поки для крайньої з внутрішніх точок буде виконуватися умова збіжності:

$$|u^k(n-1, m-1) - u^{k-1}(n-1, m-1)| < \varepsilon; \quad (6.47)$$

д) друкуємо результати

Для розв'язання задачі укладаємо скрипт (лістинг 6.2). У скрипті наведені коментарі, що дозволяють зясувати зміст кожної дії.

Лістинг 6.2

```
//*****РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ДІРІХЛЕ*****  
//*****Підпрограми-функції для крайових умов  
function y=Nach_Niz(x)  
    y= 0  
endfunction  
function y=Nach_Verx(x)  
    y = x ^ 2 / 16  
endfunction  
function z=Nach_Lev(y)  
    z = 0  
endfunction  
function z=Nach_Prav(y)  
    z = y ^ 2 / 9  
endfunction
```

```
//*****Початок розрахунків*****  
// ***Уведення координат кутових точок платівки  
x0=0, y0=0; //Лівий нижній кут  
x1=4, y1=3; // Правий верхній кут  
nx=4; //Кількість кроків по осі x  
ny=3; //Кількість кроків по осі y  
dx=(x1-x0)/nx; // Крок по осі X  
dy=(y1-y0)/ny; // Крок по осі y  
u=zeros(ny+1,nx+1); //визначення й обнуління матриці u  
//**** Формування крайових умов на границі сітки****  
for i = 2:nx+1  
    x = x0 + (i-1) * dx;  
    u(1, i) = Nach_Niz(x);  
    u(ny+1, i) = Nach_Verx(x);  
end  
for i = 2:ny+1  
    y = y0 + (i-1) * dy;  
    u(i, 1) = Nach_Lev(y);  
    u(i,nx+1) = Nach_Prav(y);  
end  
for i=2:ny;  
    for j=2:nx;  
        u(i,j)=(u(i,1)+u(i,nx+1)+u(1,j)+u(ny+1,j))/4;  
    end  
end  
//Метод Лібмана  
d=1  
while d>1e-5  
    a = u(ny, nx)  
    for i = 2:ny
```

```

for k = 2:nx
    u(i, k) = (u(i - 1, k) + u(i + 1, k) + u(i, k - 1) +
u(i, k + 1)) / 4;
end
end
d = abs(a - u(ny, nx));
end

```

Після закінчення розрахунків розв'язок – вектори u , x , матрицю u можна вивести на екран. Результати наведені у табл. 6.1.

Таблиця 6.1 – Результат розв'язання прикладу 6.2

	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4
y=0	0	0	0	0	0
y=1	0	0,0405074	0,0898696	0,1331149	0,1111111
y=2	0	0,0722196	0,1858920	0,3314878	0,4444444
y=3	0	0,0625	0,25	0,5625	1

Для більш точного розв'язання можна розділити область на більш дрібну сітку. Для наочного представлення результатів доцільно користуватися побудовою трьохвимірного графіка за допомогою комп'ютерних засобів.

Приклад 6.3

Побудувати розв'язок задачі з прикладу 6.2 при кроці 0,1 по кожній з осей і його графічне зображення

Розв'язання

Для розв'язання користуємося скриптом, що наведений у лістингу 6.2. Задаємо кількість кроків по x : 40, по y : 30, що забезпечує задану величину кроку.

Після розв'язання в режимі безпосередніх розрахунків уводимо наступні оператори:

`x=x0:dx:x1;`//визначення масиву значень x ,

`y=y0:dy:y1;`// визначення масиву значень y

`plot3d(y,x,u,45,45,'Y@X@Z',[38,2,4])` /побудова трьохвимірного графіку.

В останньому операторі:

45,45 – кути Ейлера для початкової орієнтації зображення (можуть змінюватися при подальшому редагуванні зображення),

'Y@X@Z', - позначення осей координат зображення,

[38,2,4] – вектор, компонентами якого є:

38 – колір заливки (безбарвний);

2 – управління масштабом графіка (границі визначаються величиною змінних),

4 – визначає наявність рамки навколо зображення.

Після виконання з'являється графічне віконце Scilab, де міститься графік. Після його обертання для вибору найбільш наочного представлення, копіюємо графік у документ (рис. 6.8).

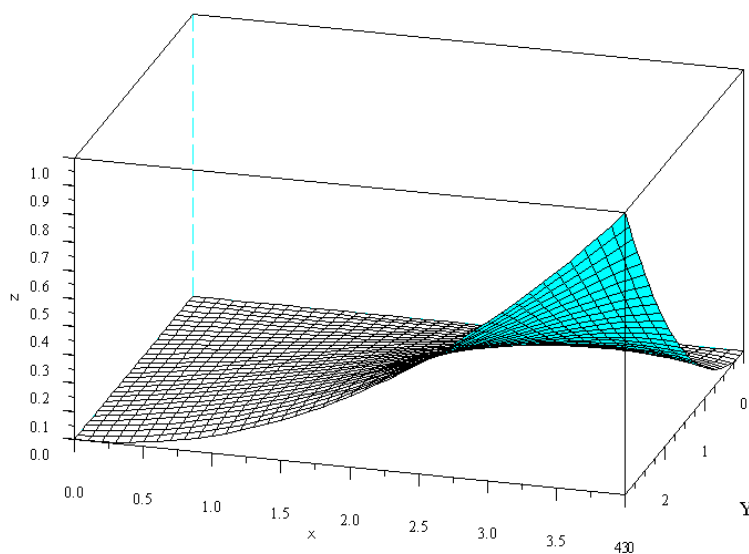


Рисунок 6.8 – Трьохвимірне зображення розв'язку задачі (приклад 6.2) при кроці

Приклад 6.4

Оцінити погрішність розв'язання прикладу 6.2 у точці: $x=2$, $y=2$ в залежності від величини кроку.

Розв'язання

Для оцінки скористуємося таким міркуванням. Будемо вважати, що модель погрішності описується рівнянням:

$$|\Delta y| = k \cdot h^m, \quad (6.48)$$

де h – крок методу,

k – коефіцієнт пропорційності,

m – порядок методу.

Якщо в обчислювальному процесі відбувається однобічний рух до асимптотичного точного значення, то абсолютна погрішність Δy має постійний знак. Звідси рівняння (6.48) можна записати у виді:

$$\Delta y = y - y_0 = k \cdot h^m, \quad (6.49)$$

або:

$$y = y_0 + k \cdot h^m, \quad (6.50)$$

де y_0 – точне значення розв'язку.

Рівняння (6.50) є рівнянням прямої відносно аргументу h^m . При цьому порядок погрішності m є цілочисельним. Тоді для його оцінки можна використовувати імітаційне моделювання з використанням методу лінійної регресії за таким алгоритмом:

а) задаємо серію значень h , при яких одержуємо серію значень y ;

б) будуємо графіки залежності y від h^m для серії цілих $m = 1, 2, 3, 4, \dots$;

в) визначаємо, при якому значенні m одержуємо прямолінійну залежність. Це можна виявити:

а) візуально по графіку,

б) за допомогою значення коефіцієнту детермінації або залишкової суми квадратів: для найкращої прямої одержуємо мінімальну суму квадратів відхилень і коефіцієнт детермінації, що є максимально близьким до 1.

У нашому випадку будуємо квадратну сітку і обираємо крок від 1 до 0.1. Для розрахунків будемо користуватися [лістингом 6.2](#).

Для кожної пари значень розв'язуємо задачу у цілому і знаходимо значення u в точці $x=2$, $y=2$. Треба мати на увазі, що перша точка масиву відповідає граничним умовам, тому номер точки треба збільшувати на 1. Наприклад при наявності кількості кроків 4 і 3 точці (2,2) відповідає елемент масиву $u(5,5)$.

Увага! Слід мати на увазі, що в лістингі 6.2 у функції u *першим аргументом є y , а не x !* Це зроблено для більш наочного представлення розв'язку у вигляді таблиці.

Результати розрахунків наведені на скриншоті (рис. 6.9). Як випливає з рис. 6.9, найкращим чином пряма проходить через точки при $m = 2$. При цьому точки практично ідеально лежать на прямій. Для $m = 1$ і $m=2$ коефіцієнт детермінації є помітно меншим, і візуально пряма є відхилення точок від прямої.

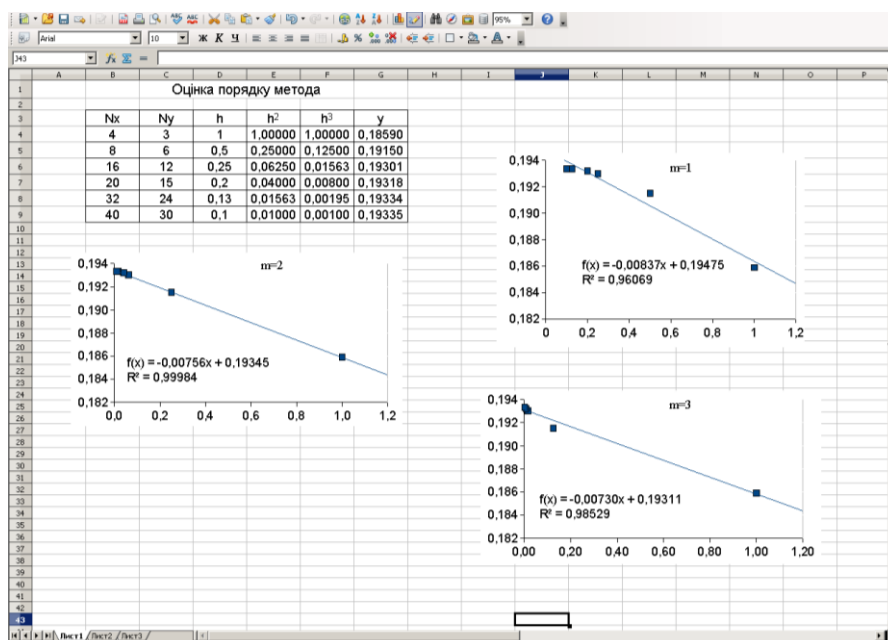


Рисунок 6.9- Оцінка порядку погрішності розв'язання задачі Діріхле

Таким чином, наведені дані свідчать, що погрішність є пропорційною h^2 , що й показує теорія.

Контрольні запитання

- 1 Навести загальний вид рівнянь математичної фізики
- 2 Що є розв'язком рівнянь математичної фізики?
- 3 Зміст поняття «лінійне рівняння математичної фізики»
- 4 Зміст поняття «дискримінант рівнянь математичної фізики»
- 5 Яким чином класифікуються рівняння математичної фізики?
- 6 Яке перетворення називається не виродженням?
- 7 Записати рівняння Лапласа
- 8 Записати рівняння теплопровідності
- 9 Записати хвильове рівняння
- 10 Зміст поняття «характеристичне рівняння» стосовно рівнянь математичної фізики
- 11 Що треба додати до рівнянь математичної фізики, щоб їх розв'язки були однозначними?
- 12 Як відрізняються між собою початкові і граничні умови для рівнянь математичної фізики?
- 13 Записати типи граничних і початкових умов для задачі розподілу температури стержня.
- 14 Зміст загальної постановки задачі з початковими умовами для рівнянь математичної фізики
- 15 Геометрична інтерпретація задачі Коші для рівнянь математичної фізики
- 16 Чому задачу Коші не будують для рівнянь еліптичного типу?
- 17 У чому полягає ідея методу сіток?
- 18 Які типи сіток можна використовувати для розв'язання рівнянь математичної фізики?
- 19 Які типи вузлів сітки існують?

- 20 Запишіть формули для апроксимації перших похідних у внутрішніх вузлах сітки.
- 21 Запишіть формули для апроксимації похідних у граничних вузлах сітки.
- 22 У чому сутність методу зсуву для граничних умов?
- 23 у чому сутність методу лінійної інтерполяції Коллатца? Для чого він використовується?
- 24 У чому зміст понять стійкості і збіжності різницевої схеми?
- 25 Зміст поняття «задача Діріхле для рівнянь еліптичного типу»
- 26 Що називається шаблоном сітки? Нарисувати шаблон для розв'язання задачі Діріхле.
- 27 До якої задачі зводиться задача Діріхле при використанні різницевої схеми?
- 28 Алгоритм методу осереднення Лібмана. Для чого він використовується?
- 29 Яким чином обирають початкове наближення для методу Лібмана?
- 30 Якою є погрішність розв'язання задачі Діріхле методом сіток?
- 31 Як можна оцінити погрішність методу сіток шляхом комп'ютерного експерименту?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 6.1

Розв'язати задачу Діріхле для рівняння Лапласа в області:

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq 4; \\ 0 \leq y \leq 3; \end{cases}$$

Крайові умови наведені у таблиці 6.2

Використовували квадратну сітку з довжиною кроку від 1 до 0,01. Оцінити порядок похибки розрахунків у точці (x_0, y_0) . Побудувати трьохвимірний графік розв'язку

Таблиця 6.2 – Варіанти завдання 6.1

Варіант	$u _{x=0}$	$u _{y=0}$	$u _{x=4}$	$u _{y=3}$	(x_0, y_0)
1	$-y^2$	x^2	$16-8y-y^2$	x^2-6x-9	$(2;2)$
2	$-y^2$	x^2	$16+8y-y^2$	x^2+6x-9	$(3;2)$
3	$-y^3$	0	$48y-y^2$	$9x^2-27$	$(1;2)$
4	0	0	$4y$	$3x$	$(2;2)$
5	$4y-12$	$3x-12$	$4y$	$3x$	$(3;1)$
6	$12-4y$	$12-3x$	0	0	$(3;2)$
7	$-4y$	0	0	$3x-12$	$(1;2)$
8	$-4y$	$3x$	$12-4y$	$3x-12$	$(2;2)$
9	0	x^3	$64-12y^2$	x^3-27x	$(3;1)$
10	$-y^3$	0	$52y-y^3$	$9x^2+3x-27$	$(3;2)$
11	y^2	x^2	$y^2-4y+16$	x^2-3x+9	$(1;2)$
12	y^2	x^2-3x	$14+y^2$	x^2-3x+9	$(3;1)$

Продовження табл. 6.2

Варіант	$u x=0$	$u y=0$	$u x=4$	$u y=3$	(x_0, y_0)
13	$12-4y$	$12-3x$	$4y$	$3x$	$(3;2)$
14	0	0	$16y-4y^2$	$3x^2-9x$	$(1;2)$
15	0	$3x$	$12-4y$	0	$(2;2)$
16	y^2	$-x^2$	$y^2+8y-16$	$9+6x-x^2$	$(3;1)$
17	y^2	$-x^2$	$y^2-8y-16$	$9-6x-x^2$	$(3;2)$
18	y^3	0	y^3-48y	$27-9x^2$	$(1;2)$
19	0	0	$-4y$	$-3x$	$(3;1)$
20	$12-4y$	$12-3x$	$-4y$	$-3x$	$(3;2)$
21	$4y-12$	$3x-12$	0	0	$(1;2)$
22	$4y$	0	0	0	$(2;2)$
23	$4y$	$-3x$	$4y-12$	$12-3x$	$(3;1)$
24	0	$-x^3$	$12y^2-64$	$27x-x^3$	$(3;2)$
25	y^3	0	y^3-52y	$27-9x^2-3x$	$(1;2)$
26	$-y^2$	$-x^2$	$4y-y^2-16$	$3x-x^2-9$	$(3;1)$
27	$-y^2$	$3x-x^2$	$-14-y^2$	$3x-x^2-9$	$(3;2)$
28	$4y-12$	$3x-12$	$-4y$	$-3x$	$(1;2)$
29	0	0	$4y^2-16y$	$9x-3x^2$	$(2;2)$
30	0	$-3x$	$4y-12$	0	$(3;1)$

ЛЕКЦІЯ 7. МЕТОДИ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ

Мета лекції

1 Ознайомити слухачів з явними та неявними методами сіток для розв'язання рівнянь параболічного та гіперболічного типів. На прикладах розв'язання задач продемонструвати особливості кожного з методів та їх програмування

2 Ознайомити слухачів з алгоритмом наближеного розв'язання рівнянь математичної фізики методом прямих (диференціально-різницеvim методом), особливостями розв'язання та програмування задач

3 Ознайомити слухачів з використанням варіанту методу Монте-Карло – методу випадкових блукань для розв'язання задач еліптичного типу

План лекції

[7.1 Розв'язання першої крайової задачі для рівняння параболічного типу методом сіток](#)

[7.2 Неявна схема для розв'язання рівнянь параболічного типу](#)

[7.3 Розв'язання методом сіток першої крайової задачі для рівняння гіперболічного типу](#)

[7.4 Диференціально-різницеvim метод \(метод прямих\)](#)

[7.5 Розв'язання задачі Діріхле методом випадкових блукань](#)

[Контрольні запитання](#)

[Завдання для самостійної роботи](#)

Матеріал лекції:

7.1 Розв'язання першої крайової задачі для рівняння параболічного типу методом сіток

Розглянемо чисельне розв'язання методом сіток рівняння теплопровідності:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (7.1)$$

Нехай шукана функція $u(x,t)$ визначає температуру у будь якої точці x стержня довжиною ℓ у момент часу t , від початкового до кінцевого T . В області:

$$D = \{(x,t)/0 \leq x \leq \ell; 0 \leq t \leq T\} \quad (7.2)$$

задано:

а) *початкові умови*: розподіл температур у початковий момент часу:

$$u(x,0) = f(x), 0 \leq x \leq \ell; \quad (7.3)$$

б) *крайові умови* першого роду, що описують теплові режими на кінцях стержня:

$$\begin{cases} u(0,t) = \varphi(t), \\ u(\ell,t) = g(t), \end{cases} \quad (7.4)$$
$$0 \leq t \leq T.$$

Функції $f(x)$, $\varphi(t)$, $g(t)$ вважають *неперервними*.

В системі координат xOt побудуємо прямокутну сітку:

- з кроком h по осі x ;
- з кроком τ по осі t .

Уведемо позначення:

$$(7.5)$$

Замінімо частинні похідні у рівнянні (7.1) їх різницеви́ми апроксимаціями:

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,k} - u_{i,k}}{h}; \\ \frac{\partial u(x_i, y_k)}{\partial y} \approx \frac{u_{i,k+1} - u_{i,k}}{\ell}; \end{cases} \quad (7.6)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{\ell^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} \approx \frac{u_{i+1,k+1} - u_{i+1,k-1} - u_{i-1,k+1} + u_{i-1,k-1}}{4h\ell}. \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{\ell^2}; \\ \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} \approx \frac{u_{i+1,k+1} - u_{i+1,k-1} - u_{i-1,k+1} + u_{i-1,k-1}}{4h\ell}. \end{cases} \quad (7.7)$$

Для заміни використаємо шаблон, наведений на рис. 7.1 а. При цьому рівняння (7.1) апроксимуємо скінчено-різницеви́м рівнянням:

$$\frac{u_{i,k+1} - u_{i,k}}{\tau} = a^2 \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}. \quad (7.8)$$

Приведемо (7.8) до виду:

$$u_{i,k+1} = \left(1 - \frac{2a^2\tau}{h^2}\right) \cdot u_{i,k} + a^2 \cdot \frac{\tau}{h^2} \cdot (u_{i+1,k} + u_{i-1,k}) \quad (7.9)$$

У математичної фізиці розрахункові схеми, що є розв'язаними відносно значень невідомої називаються *явними*. Тому схема розрахунків, що описується формулою (7.9), є явною схемою.

По формулі (7.9) можна розрахувати значення шуканої функції $u(x,t)$ у вузлах $k+1$ -го часового шару при $t = t_{k+1}$, якщо відомі її значення у вузлах k -го шару. При цьому:

а) при $t = 0$ значення функції отримаємо з початкових умов:

$$u_{i,0} = f(x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n-1), \quad (i=1, 2, \dots, n-1); \quad (7.10)$$

б) у крайніх лівому і правому вузлах кожного шару (при $i=0$ та $i=n$) значення функції визначаються з граничних умов:

$$\begin{cases} u(0, t_k) = \varphi(t_k), \\ u(\ell, t_k) = g(t_k), \end{cases} \quad (k = 0, 1, 2, \dots, m) \quad (7.11)$$

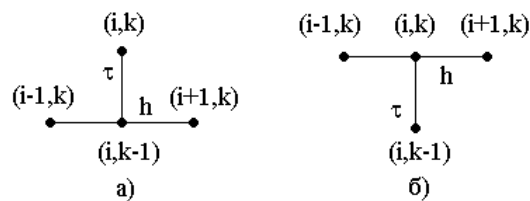


Рисунок 7.1 – Шаблони для розв'язання задачі параболічного типу

Виходячи з явної схеми (7.9), розрахунки відбуваються по чергово для усіх шарів. Недоліком цієї схеми є обмеження на сітку: значення кроків по незалежним змінним повинні вибиратися із співвідношення:

$$0 < \tau \leq \frac{h^2}{2a^2} \quad . \quad (7.12)$$

При $\tau = \frac{h^2}{2a^2}$ формула (7.9) суттєво спрощується:

$$u_{i,k+1} = \frac{1}{2} \cdot (u_{i+1,k} + u_{i-1,k}). \quad (7.13)$$

При $\tau > \frac{h^2}{2a^2}$ процес розв'язання становиться *нестійким*.

Обмеження (7.12) на вибір кроку може сильно збільшити об'єм розрахунків.

Приклад 7.1

Однорідний стержень має довжину 1 м. У момент часу $t = 0$ температура лівого кінця 0°C , правого 100°C , розподіл температури вздовж стержня описується рівнянням:

$$T_{t=0}(x) = 100 \cdot x. \quad (7.14)$$

Починаючи з моменту часу $t = 0$ на обох кінцях стержня підтримують температуру $T = 0^\circ\text{C}$.

Необхідно побудувати за явною схемою розподіл температур через різні проміжки часу. Прийняти $a = 0,1$.

Розв'язання:

а) оберемо крок по просторовій координаті $h=0,1$. У цьому випадку максимальний крок по часовій координаті, у відповідності до формули (7.12) складе:

$$\tau = \frac{0,1^2}{2 \cdot 0,1^2} = 0,5; \quad (7.15)$$

б) побудуємо сітку по кожній змінній з вказаними кроками, складемо скрипт для виконання розрахунків (лістинг 7.1). При укладанні скрипта беремо до уваги наступне:

- ✓ для наочного представлення розв'язку функцію u розглядаємо, як матрицю. При цьому x змінюється вздовж номерів стовпчиків, а час – вздовж номерів рядків. Тому, з врахуванням прийнятої системи позначення елементів матриць (спочатку номер рядку, а потім – номер стовпчику), функція u має структуру:

$$u=u(t,x); \quad (7.16)$$

- ✓ оскільки матриці у Scilab не мають нульової індексації, розв'язок будуємо у вигляді матриці розмірами $(ns+1) \times (nx+1)$, де ns – кількість шарів часу, nx – кількість інтервалів по осі x . Виходячи з цього, формула (7.9) приймає вид:

$$u_{i,k} = \left(1 - \frac{2a^2\tau}{h^2}\right) \cdot u_{i-1,k} + a^2 \cdot \frac{\tau}{h^2} \cdot (u_{i-1,k+1} + u_{i-1,k-1}); \quad (7.17)$$

$$(i=2,3,\dots,ns+1; j=2,3,\dots,nx)$$

Лістинг 7.1

```

//*****Розв'язання задачі теплопровідності явним методом*****
//Вхідні дані
a=0.1
tau=0.5
nx=10;//кількість кроків по осі x
h=1/nx//Крок по осі x
k1=1-2*a^2*tau/h^2
k2=a^2*tau/h^2
ns=20//кількість шарів
u=zeros(ns+1,nx+1);
//нульовий шар по часу
for i= 1:nx+1
    x(i)= h*(i-1);
    u(1,i)=100*x(i);
end
//Крайові умови за часом
for i = 1:ns+1
    u(i,1)=0;

```

```
u(i,nx+1)=0;
t(i)=tau*(i-1);
end
//*****Початок розв'язання*****
for i = 2:ns+1;
    for k=2:nx;
        u(i,k)=k1*u(i-1,k)+k2*(u(i-1,k+1)+u(i-1,k-1));
    end
end
end
```

Далі, в режимі безпосередніх розрахунків, можна вивести матрицю u на екран або побудувати трьохвимірний графік. Але, вважаючи фізичний зміст задачі, доцільно виводити не трьохвимірний графік, а серію двовимірних графіків розподілу температури по довжині стержня в різні моменти часу. Для цього у безпосередньому режимі можна увести послідовність операторів:

```
for i=2:2:20;plot(x,u(i,:)); end
```

Результати наведені на рис. 7.2.

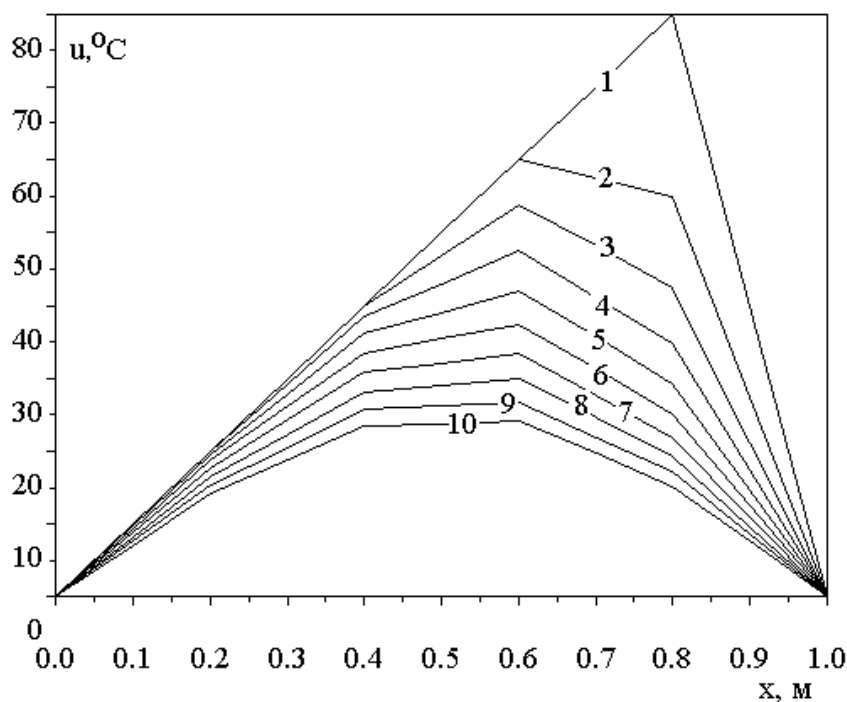


Рисунок 7.2 – Проект «Розв'язання крайової задачі для рівняння параболічного типу». Цифри вказують момент часу від початку спостережень

Приклад 7.2

Виявити, у чому складається явище нестійкості. Для цього в лістингі 7.1 обрати $nx=20$.

Розв'язання

У розглянутому випадку $h = 0.05$ і буде спостерігатися порушення умови збіжності (7.12):

$$\frac{h^2}{2a^2} = \frac{0,05^2}{2 \cdot 0,1^2} = 0,125 \leq \tau = 0,5$$

Результати розрахунків наведені на рис. 7.3. Як випливає з рис. 7.3, спостерігається дуже різке (на 16 порядків) коливання значень u в залежності від часу. Це є типовим проявом нестійкості розрахунків

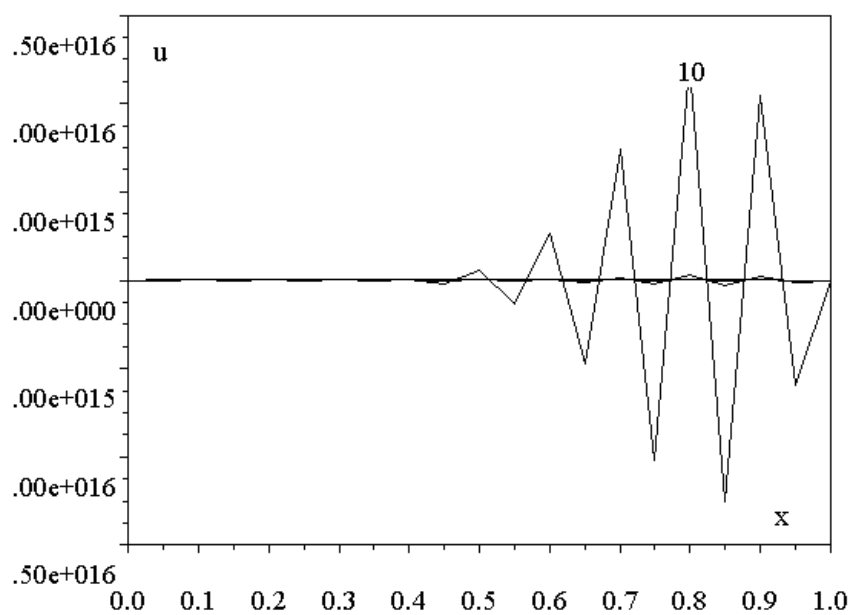


Рисунок 7.3 – Прояв нестійкості розрахунків при розв'язанні параболічного рівняння в разі порушення умови (7.12) (до прикладу 7.2)

7.2 Неявна схема для розв'язання рівнянь параболічного типу

Як відмічено у 7.1, недоліком явної схеми є нестійкість розв'язків при невиконанні співвідношення (7.12). Це обмеження може сильно збільшити обсяг розрахунків.

Для подолання цього недоліку для різницевої апроксимації використовують шаблон, що зображений на [рис. 7.1 6](#)), якщо виконаємо таку різницеву апроксимацію:

$$\frac{\partial u(x_i, t_k)}{\partial t} \approx \frac{u_{ik} - u_{i,k-1}}{\tau}. \quad (7.18)$$

Така схема носить назву *неявної*.

В рамках апроксимації (7.18) рівняння (7.1) замінюється *системою лінійних рівнянь*:

$$\frac{u_{i,k} - u_{i,k-1}}{\tau} = a^2 \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}, \quad (7.19)$$

яку можна перетворити до виду:

$$\frac{a^2 \tau}{h^2} u_{i-1,k} - \left(1 + 2 \cdot \frac{a^2 \tau}{h^2} \right) u_{i,k} + \frac{a^2 \tau}{h^2} u_{i+1,k} = -u_{i,k-1}. \quad (7.20)$$

З крайових умов (7.11) випливають рівняння:

$$u_{0,k} = \varphi(t_k); \quad u_{n,k} = g(t_k); \quad (k = 0, 1, 2, \dots, m). \quad (7.21)$$

Система різницевих рівнянь (7.17), (7.18) визначає наближене значення функції $u(x, t)$ на k -му часовому шарі ($t=t_k$), виходячи з її відомих значень на $k-1$ —му шарі. На нульовому шарі ($k=0$) значення $u_{i,0}$ визначаються з початкових умов (7.10):

$$u_{i,0} = f(x_i), (i=1,2,\dots,n-1), \quad (7.22)$$

Система рівнянь (7.22) має наступні властивості:

- а) ця система є трьох діагональною;
- б) завжди спостерігається *діагональна перевага*, оскільки завжди:

$$\left(1 + 2 \frac{a^2 \tau}{h^2}\right) > \frac{a^2 \tau}{h^2} \quad (7.23)$$

Внаслідок цього для розв'язання системи можна використовувати спеціалізований і ефективний метод прогону, який, внаслідок б) буде стійким при будь-якому виборі кроків h і τ (див. частину 1, лекція 3). Порядок апроксимації різницевої схеми: $O(\tau + h^2)$.

Розрахункові схеми, в яких значення невідомих функцій задані у вигляді неявних співвідношень, зокрема систем рівнянь, називаються *неявними*. Тому схема (7.19), (7.23) є неявною.

Приклад 7.3

Розв'язати за допомогою неявної схеми задачу прикладу 7.1

Розв'язання:

Для наочності є сенс використовувати замість функції $u(x,y)$ транспоновану функцію $u(y,x)$, як це було обґрунтовано у [прикладі 7.1](#). З врахуванням нумерації елементів матриць це надає можливості представити матрицю u у вигляді, зображеному на схемі 7.1

Схема 7.1 – Матриця u

$u(1,1)$	$u(1,2)$	$u(1,3)$		$u(1,nx)$	$u(1,nx+1)$
$u(2,1)$	$u(2,2)$ $xx(1)$	$u(2,3)$ $xx(2)$		$u(2,nx)$ $xx(nx-1)$	$u(2,nx+1)$
....					
$u(ns+1,1)$	$u(ns+1,2)$	$u(ns+1,3)$		$u(ns+1,nx)$	$u(ns+1,nx+1)$

На схемі 7.3:

- ✓ сірим кольором виділені елементи, що відповідають *граничним умовам*
- ✓ $ns + 1$ – кількість шарів часу (з врахуванням, того, що моменту часу $t=0$ відповідає перший рядок матриці,
- ✓ $nx+1$ – кількість точок по осі x (з врахуванням того, що точці $x=0$ відповідає перший стовпчик)

У цьому випадку на кожному шарі необхідно розв'язати систему рівнянь виду:

$$\frac{a^2 \tau}{h^2} u_{i,j-1} - \left(1 + 2 \cdot \frac{a^2 \tau}{h^2} \right) u_{i,j} + \frac{a^2 \tau}{h^2} u_{i,j+1} = -u_{i-1,j}, \quad (7.24)$$

де $i = 2, \dots, ns+1$ - шари часу,

$j = 1, 2, \dots, nx$ – точки по осі x .

Кількість рівнянь на кожному шарі часу: $nx-1$

Для зручності уведемо:

- ✓ для розв'язання на кожному i -му шарі нові змінні
- ✓

$$xx(j) = u(i, j+1) \quad (j = 1, 2, \dots, nx-1),$$

- ✓ позначення:

$$\alpha_1 = \frac{a^2 \tau}{h^2}; \quad \alpha_2 = 1 + 2\alpha_1$$

$$j = 2, 3, \dots, nx-1$$

б) розрахувати послідовно величини xx за наступною рекурентною формулою:

$$\begin{cases} xx(nx-1) = \varphi(nx-1); \\ xx(j) = \varphi(j) + k(j) \cdot x(j+1); \\ (j = nx-2, nx-3, \dots, 2, 1) \end{cases} \quad (7.30)$$

Скрипт для проведення розрахунків наведено у лістингі 7.3

Лістинг 7.3

```
//*****Розв'язання задачі теплопровідності неявним
методом*****
//Вхідні дані
a1=0.1
tau=0.5
nx=10;//кількість кроків по осі x
h=1/nx//Крок по осі x
alfa2=1+2*a1^2*tau/h^2;
alfa1=a1^2*tau/h^2;
ns=20//кількість шарів
u=zeros(ns+1,nx+1);//визначення матриці результатів
// заповнення першого шару
for i=2:nx+1
    x(i)=(i-1)*h;
end
for i=2:nx
    u(1,i)=10*(i-1);
end
[y]=0:tau:tau*ns;
//Пощаровий розрахунок
a=zeros(nx-1);
```

```
b=zeros(nx-1);
c=zeros(nx-1);
d=zeros(nx-1);
ka=zeros(nx-1);
fi=zeros(nx-1);
xx=zeros(nx-1)
for i=2:ns
//***формування коефіцієнтів для прогону***
    for j=1:nx-1
        b(j)=-alfa2;
        if j==1
            a(j)=0;
        else a(j)=alfa1;
        end//if j==1
        if j==nx-1
            c(j)=0;
        else c(j)=alfa1;
        end//j==nx-1
    end//j
    d(1)=-alfa1*u(i,1)-u(i-1,2);
    d(nx-1)=-u(i-1,nx-1)-alfa1*u(i-1,nx);
    for j=2:nx-1
        d(j)=-u(i-1,j+1);
    end//j
//***Прямий хід***
    ka(1)=-c(1)/b(1);
    fi(1)=d(1)/b(1);
    for j=2:nx-1
        R=b(j)+a(j)*ka(j-1);
        ka(j)=-c(j)/R;
```

```

    fi(j)=(-a(j)*fi(j-1)+d(j))/R;
end
/**Зворотний хід**
xx(nx-1)=fi(nx-1);
for j=nx-2:-1:1
    xx(j)=fi(j)+ka(j)*xx(j+1);
end
for j=2:nx
    u(i,j)=xx(j-1);
end
end //кінець циклу по i

```

Використання неявного алгоритму дозволяє позбавитися розбіжності розв'язків при порушенні умови збіжності (7.12) - граничного співвідношення між h і τ , характерного для явного методу. На рис. 7.4 зображені розв'язки для прикладу 7.3 у випадку, коли:

$$\frac{h^2}{2a^2} = \frac{0,01^2}{2 \cdot 0,1^2} = 0,005 \leq \tau = 0,05$$

Завдяки дрібному кроку по x вдається одержати порівняно гладка криві для розв'язків по шарам. У випадку явного методу у даному випадку спостерігається розбіжність, що є аналогічною [рис. 7.3](#). Таким чином, не зважаючи на декілька більш складний алгоритм розрахунків, неявний метод має суттєві переваги перед явним методом розв'язання рівнянь параболічного типу.

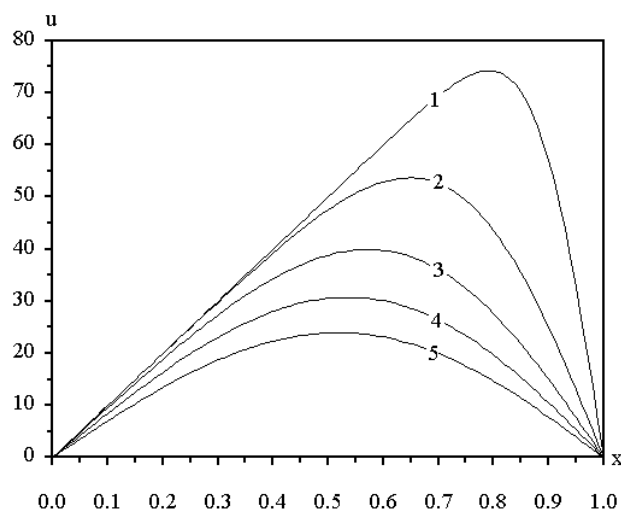


Рисунок 7.4 – Розв'язання прикладу 7.3 при $h = 0,01$, $\tau = 0.05$. Кількість шарів часу: 12 (1), 50 (2), 100 (3), 150 (4), 200 (5)

7.3 Розв'язання методом сіток першої крайової задачі для рівняння гіперболічного типу

Розглянемо розв'язання рівнянь гіперболічного типу на прикладі рівняння малих поперечних коливань струни:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (7.31)$$

$$(0 \leq x \leq \ell; \quad 0 \leq t \leq T)/$$

Для першої крайової задачі шукане відхилення струни у будь-якої точці x в момент часу t повинно задовольняти:

а) початковим умовам:

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad \frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = g(x), \quad 0 \leq x \leq \ell; \quad (7.32)$$

б) крайовим умовам:

$$u(0,t) = \alpha(t), \quad u(\ell,t) = \beta(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (7.33)$$

Побудуємо в області $D = \{(x,y)|0 \leq x \leq \ell, 0 \leq t \leq T\}$ прямокутну сітку:

$$\begin{cases} x_i = i \cdot h, & (i = 0, 1, \dots, n); \\ t_k = k \cdot \tau & (k = 0, 1, \dots, m); \end{cases} \quad \begin{cases} x_i = i \cdot h, & (i = 0, 1, \dots, n); \\ t_k = k \cdot \tau & (k = 0, 1, \dots, m); \end{cases} \quad (7.34)$$

Замінімо частинні похідні в рівнянні (7.31) різницями на шаблоні типа «хрест» (рис. 7.5)

Для кожного вузла сітки всередині одержимо скінчено-різницеve рівняння:

$$\frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{\tau^2} = a^2 \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}. \quad (7.35)$$

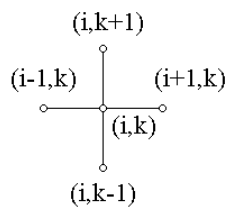


Рисунок 7.5- Шаблон «хрест» для задачі гіперболічного типу

Його можна перетворити до виду:

$$u_{i,k+1} = 2 \cdot \left(1 - \frac{\tau^2 a^2}{h^2} \right) \cdot u_{ik} + \frac{a^2 \tau^2}{h^2} (u_{i+1,k} + u_{i-1,k}) - u_{i,k-1}. \quad (7.36)$$

Схема (7.36) є явною, вона дозволяє наближено розраховувати наближене значення функції у вузлах $k+1$ -го шару, виходячи з її значень на двох попередніх шарах.

На перших двох шарах значення функції визначаються з початкових умов (7.32):

а) вважаємо, що:

$$u_{i,0} = \varphi(x_i), \quad (i = 0, 1, \dots, n); \quad (7.37)$$

б) для похідної з часу використовуємо різницеву апроксимацію:

$$\frac{\partial u(x_i, 0)}{\partial t} \approx \frac{u_{i1} - u_{i0}}{\tau} = g(x_i); \quad (7.38)$$

в) звідси:

$$u_{i1} = u_{i0} + \tau \cdot g(x_i). \quad (7.39)$$

Порядок різницевої апроксимації складає $O(\tau + h^2)$. Схема розрахунків буде стійкою, якщо виконується умова Куранта:

$$\tau < h \quad (7.40)$$

При $\tau < h$ розв'язок різницевої задачі (7.34) – (7.37) рівномірно прагне до розв'язку вхідної крайової задачі при $h \rightarrow 0$ і $\tau \rightarrow 0$.

Приклад 7.4

Розв'язати чисельно гіперболічне рівняння коливань струни $u_{tt} - a^2 \cdot u_{xx} = 0$ при початкових умовах: $\varphi(x) = \sin(2\pi x)$, $g(x) = 0$, кінці струни закріплені у точках $x = 0$ і $x = 1$, крайові умови: $u(0, t) = u(1, t) = 0$, амплітуда $a = 0,1$. Використати 400 часових шарів з кроком $\tau = 0,05$ і 100 кроків по осі x з кроком $h = 0,01$, Результати навести у вигляді графіків залежності u від x в різні моменти часу.

Розв'язання

Алгоритм розв'язання задачі:

а) будемо шукати розв'язок у вигляді матриці u , для якої:

- ✓ номери стовпчиків є *пропорційними* x ,
- ✓ номери рядків є *пропорційними* t ,
- ✓ моменту часу $t = 0$ відповідає рядок з номером 1;
- ✓ часовим точкам для $x = 0$ відповідає рядок 1.

Таким чином, розмірність матриці u складає $(ns+1) \times (nx+1)$, де ns – кількість часових шарів, nx – кількість кроків по довжині струни;

б) будуємо перший шар для $t=0$, виходячи із заданих початкових умов:

$$u(1,i) = \sin(2 \cdot \pi \cdot (i-1) \cdot h) \quad (i = 2, 3, \dots, nx); \quad (7.41)$$

в) будуємо другий шар для $t = \tau = 0,05$ згідно з формулою (7.32), що стосовно матриці прийме вид:

$$u(2,i) = u(1,i) + \tau \cdot g(x_i) = u(1,i) \quad (i = 2, 3, \dots, nx); \quad (7.42)$$

г) будуємо крайові умови:

$$u(1,j) = 0, \quad u(nx+1,j) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, ns+1); \quad (7.43)$$

д) будуємо формули для розрахунків інших елементів, для чого модифікуємо формулу (7.29):

$$u_{k,i} = 2 \cdot \left(1 - \frac{\tau^2 a^2}{h^2} \right) \cdot u_{k-1,i} + \frac{a^2 \tau^2}{h^2} (u_{k-1,i+1} + u_{k-1,i-1}) - u_{k-2,i}. \quad (7.44)$$

Скрипт для проведення розрахунків наведено в лістингу 7.4

Лістинг 7.4

```
ns=200;//кількість шарів часу
nx=100;// кількість кроків по x
a=0.01
h=1/nx;
tau=.005
[x]=0:h:1;//масив значень x
[t]=0:tau:1;//масив значень t
u=zeros(ns+1,nx+1);// визначення матриці
for i = 2:nx
    u(1,i)=sin(2*%pi*h*(i-1));
    u(2,i)=u(1,i);
end
k2=a^2*tau^2/h^2;
k1=2*(1-k2);
//Розрахунок
for k=3:ns+1;
    for i=2:nx;
        u(k,i)=k1*u(k-1,i)+k2*(u(k-1,i+1)-u(k-1,i-1))-u(k-2,i);
    end
end
```

Після виконання скрипту у безпосередньому режимі генеруємо графік за допомогою послідовності команд

```
for i=1:100:401; plot(x,u(i,:)); end
```

Результати наведені на рис. 7.6

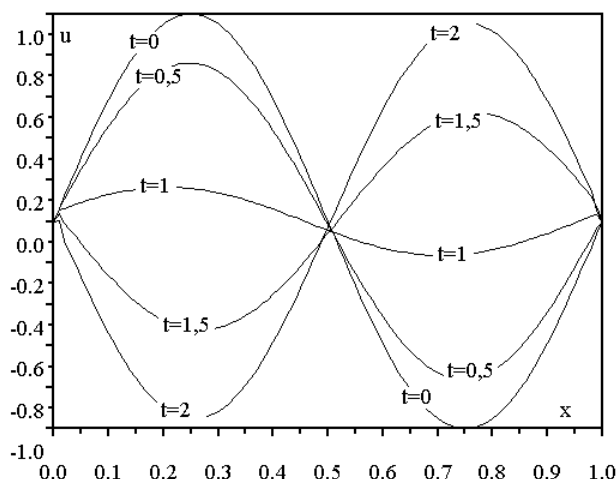


Рисунок 7.6- Результати розв'язання задачі (приклад 7.4)

7.4 Диференціально-різницевий метод (метод прямих)

Разом з методом сіток, для розв'язання рівнянь математичної фізики використовуються також інші методи, серед яких найбільш широко використовується : диференціально-різницевий метод (метод прямих).

Основна ідея *методу прямих* (або *диференційно-різницевого методу*) складається у зведенні розв'язання рівнянь у частинних похідних до розв'язання системи звичайних диференціальних рівнянь.

Це досягається використанням методу скінчених різниць по одній змінній, тобто розв'язання рівнянь у частинних похідних зводиться до системи звичайних диференціальних рівнянь уздовж деякого сімейства прямих.

Нехай у прямокутній області: $D(a < x < b, c < y < d)$ необхідно знайти розв'язок диференціального рівняння:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + u = f(x, y), \quad (7.45)$$

що задовольняє заданим граничним умовам:

$$\begin{cases} u(x, c) = \varphi(x); & u(x, d) = \varphi_1(x); & (a \leq x \leq b); \\ u(a, y) = \psi(y); & u(b, y) = \psi_1(y); & (c \leq y \leq d). \end{cases} \quad (7.46)$$

Виконаємо наступні дії:

а) розіб'ємо область інтегрування сімейством прямих, що є:

- ✓ паралельними осям x або y ,
- ✓ рівновіддаленими друг від друга на відстані h .

Для визначеності візьмемо прямі $y = c + kh$ ($k=0,1,2,\dots,n$).

б) замінімо похідні по y наближеними різницевиими виразами:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=y_k} = \frac{1}{2h} [u(x, y_{k+1}) - u(x, y_{k-1})]; \quad (7.47)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{y=y_k} = \frac{1}{h^2} [u(x, y_{k+1}) - 2u(x, y_k) + u(x, y_{k-1})]; \quad (7.48)$$

в) при фіксованому значенні y_k різниця $u_k(x) - u(x, y_k)$ є функцією від однієї змінної x . Тому розв'язання рівняння (7.48) зводиться до розв'язання системи звичайних диференціальних рівнянь другого порядку:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 u_k(x)}{dx^2} + \frac{u_{k+1}(x) - 2u_k(x) + u_{k-1}(x)}{h^2} + \frac{du_k(x)}{dx} + \\ & + \frac{u_{k+1}(x) - u_{k-1}(x)}{2h} + u_k(x) = f_k(x) \end{aligned} \quad (7.49)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n)$$

Приклад 7.5

Розв'язати методом прямих задачу про розподіл температури вздовж стержня ([приклад 7.1](#)).

Розв'язання

В цій задачі вигідніше отримати систему ЗДУ не другого, а першого порядку. Для цього:

а) розділимо стержень на n інтервалів однакової довжини h ;

б) другу частинну похідну в рівнянні (7.1) наближено представляємо через скінченні різниці:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T(x_{i-1}) - 2 \cdot T(x_i) + T(x_{i+1}))}{h^2}; \quad (7.50)$$

в) підставимо (7.50) в (7.1), одержимо систему диференціальних рівнянь першого порядку:

$$\frac{dT(x_i)}{dt} = \frac{a^2}{h^2} \cdot [T(x_{i-1}) - 2 \cdot T(x_i) + T(x_{i+1}))]; \quad (7.51)$$

г) у системі (7.43) для крайніх 0-го та n -го рівнянь, беря до уваги крайові умови (постійність температури в 0°C на кінцях), запишемо:

$$\frac{dT_0}{dt} = \frac{dT_n}{dt} = 0; \quad (7.52)$$

д) за початкові умови для розв'язання кожного з рівнянь системи використовуємо розподіл температур у нульовий момент часу, що задається рівнянням (7.14);

е) на кожному інтервалі систему рівнянь (7.51), (7.52) можна проінтегрувати одним з методів інтегрування систем ЗДР, наприклад методом Рунге-Кути. Чим менше буде крок по x , тим точніше буде розв'язок.

Скрипт для проведення розрахунків наведено у лістингі 7.5. На рис. 7.7 наведені результати розрахунків у формі графіка часових шарів.

Лістинг 7.5

global n

```
global a
global h
function y=fi(t,T)
    y=zeros(n,1)
    y(1)=0
    y(n)=0
    for i=2:n-1
        y(i)=(T(i-1)-2*T(i)+T(i+1))*a^2/h^2
    end
endfunction
a=0.1
n=10;
t0=0
h=1/n;
n=n+1;
[x]=0:h:1;
for i=1:n;
    T0(i)=100*(i-1)*h;
end;

T0(n)=0;
t=0:0.2:1;
u=ode(T0,t0,t,fi);
```

Метод прямих можна використовувати для різноманітних рівнянь математичної фізики, у тому числі, нелінійних. У останньому випадку часто виникають жорсткі системи, які слід розв'язувати за допомогою відповідних неявних методів.

7.5 Розв'язання задачі Діріхле методом випадкових блукань

Для розв'язання задачі Діріхле для рівнянь еліптичного типу можна

використовувати варіант методу Монте-Карло – метод випадкових блукань.

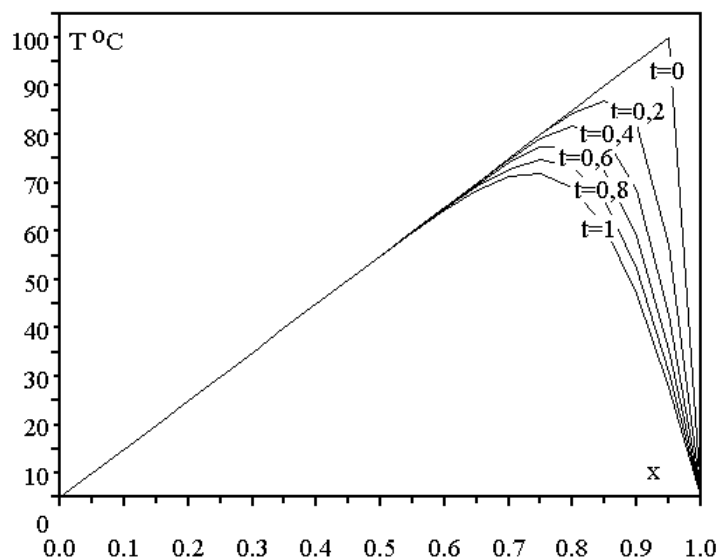


Рисунок 7.7 – Розподіл температури по довжині у різні моменти часу (приклад 7.5)

Нехай в області D з кусково-гладкою границею Γ задано рівняння еліптичного типу:

$$\Delta u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad . \quad (7.53)$$

а на границі Γ цієї області задані крайові умови

$$u(x,y)|_{\Gamma} = f(x,y) \quad (7.54)$$

Побудуємо в області D квадратну сітку S з кроком h вздовж x і y . Будемо вважати, що граничні вузли сітки створюють її границю Γ_h , яка апроксимує границю Γ області D (рис. 7.5). У першому наближенні границя Γ_h – це лінійний ряд точок $M_{pq}(x_{pq})$, що апроксимує границю Γ області D з точністю h .

Уявимо собі деяку частинку M , що *блукає за випадковим законом* по вузлах сітки. Це означає наступне. Якщо частинка у деякий момент часу знаходиться у внутрішньому вузлі (i,j) , то у наступний момент часу вона з ймовірністю $1/4$ може перейти у один з наступних станів:

- а) піднятися у сусідній вузол *зверху* $(i,j+1)$;
- б) опуститься у сусідній вузол *знизу*; $(i,j-1)$;
- в) перейти у сусідній вузол з *лівого боку* $(i-1,j)$;
- г) перейти у сусідній вузол з *правого боку* $(i+1,j)$.

Частинка може блукати по вузлах сітки доти, доки вона не попаде на *граничні вузли*, де відбувається її *поглинання*.

Сукупність вузлів, у яких побувала частинка, починаючи з вхідного вузла (i,j) і закінчуючи вузлом на границі, називається *траєкторією блукання*.

Перенесемо крайові умови (7.46) на границі Γ області D на граничні вузлові точки сітки, отримаємо сукупність дискретних значень $f_{pq}=f(x_{p,q})$, де p,q – індекси граничних вузлових точок сітки.

Позначимо через $P(i,j,p,q)$ ймовірність того, що траєкторія частинки, яка вийшла з внутрішнього вузла (i,j) закінчилась у вузлі (p,q) на границі сітки. Оскільки рано чи пізно блукання окремої частинки закінчується у одному з вузлів сітки, то:

$$\sum_{p,q} P(i,j,p,q) = 1. \quad (7.55)$$

З цій точки зору суму:

$$v_{ij} = \sum_{p,q} P(i,j,p,q) \cdot f_{pq} = \bar{f}_{pq}, \quad (7.56)$$

слід розглядати, як математичне сподівання (середнє значення) функції $f(x,y)$ на границі сітці Γ_h для траєкторій, що починаються у вузлі (i,j) .

Якщо частинка у деякий момент часу знаходиться у вузлі (i,j) , то вона могла попасти у цій вузол з ймовірністю $1/4$ з вузлів:

$$(i,j-1); (i,j+1); (i+1,j), (i-1,j)$$

По формулі повної ймовірності маємо:

$$P(i,j,p,k) = \frac{1}{4} P(i,j-1,p,q) + \frac{1}{4} P(i,j+1,p,q) + P(i,j,p,k) = \frac{1}{4} P(i,j-1,p,q) + \frac{1}{4} P(i,j+1,p,q) + \frac{1}{4} P(i+1,j,p,q) + \frac{1}{4} P(i-1,j,p,q) \quad (7.57)$$

Звідси,

а) помножив обидві частини рівності (7.53) на граничні значення f_{pq} ,

б) підсумовуючи за усіма можливими значеннями p і q з врахуванням (7.52), одержимо:

$$v_{ij} = \frac{1}{4} \cdot (v_{i,j-1} + v_{i,j+1} + v_{i-1,j} + v_{i+1,j}). \quad (7.58)$$

При цьому, на границі сітці, за визначенням:

$$v_{pq} = f_{pq} \quad (7.59)$$

Порівнюючи формули (7.58) і (7.59) з формулою для розв'язання задачі Діріхле методом сіток (7.60) (див. [6.4](#)):

$$u_{ik} = \frac{1}{4} \cdot (u_{i-1,k} + u_{i+1,k} + u_{i,k+1} + u_{i,k-1}) \quad (7.60)$$

знаходимо, що вони збігаються з точністю до позначень. Таким чином, розв'язок u_{ij} задачі Діріхле для еліптичного рівняння у точці (i,j) можна розглядати, як математичне сподівання v_{ij} .

Величини v_{ij} можна визначити методом Монте-Карло за таким алгоритмом:

а) задаємо, як вхідні, такі дані:

- 1) координати сітки і вузла, для якого треба отримати розв'язок;
- 2) значення крайових умов на границі сітки;
- 3) кількість випадкових випробувань NW;

б) дорівнюємо нулю значення шуканої змінної u ;

в) протягом NW разів проводимо розіграш одиничного жеребу:

- 1) повертаємо початкові значення індексів початкової точки (i,j) ;
- 2) генеруємо ціле число C , що рівно ймовірно приймає значення 1,2,3,4;
- 3) виконуємо зміни індексів за таким правилом:

- якщо $C=1$, то $j = j-1$;
- якщо $C=2$, то $j = j+1$;
- якщо $C=3$, то $i = i-1$;
- якщо $C=4$, то $i = i+1$;

4) якщо нові індекси (i,j) відповідають вузлу, що не є граничним, то повертаємось на крок 2;

5) якщо нові індекси відповідають граничному вузлу – величину u збільшуємо на значення граничної функції f_{pq} у вузлі (p,q) , де закінчується дане блукання;

г) знаходимо оцінку математичного сподівання, поділив величину u на кількість випробувань NW.

На відмінність від інших сіткових методів, метод випадкових блукань дозволяє знаходити наближений розв'язок, незалежно від розв'язків в інших вузлах сітки.

Недоліком методу випадкових блукань є необхідність проведення значної кількості випадкових блукань. Точність результатів збільшується пропорційно квадратному кореню з кількості випробувань (це є загальною властивістю методів Монте-Карло). Але це компенсується простотою програмування і можливістю розв'язання задач зі складними граничними умовами.

Метод випадкових блукань на сітці є частковим випадком важливого методу імітаційного комп'ютерного моделювання – *методу клітинних автоматів*. Сутність його полягає в тому, що в разі складності або неможливості укладання диференціальних рівнянь розглядають сітку на необхідній області і потім проводять

випадкові блукання по неї, виходячи з правил переходу з однієї клітини (вузлу) до сусідніх. Ці правила можуть бути достатньо складними, у відповідності з відомим механізмом явища, що моделюється.

Приклад 7.6

За допомогою методу випадкових блукань побудувати розв'язок рівняння Лапласа на круговій області:

$$D = \{(x-0,5)^2 + (y-0,5)^2 \leq 0,25\}; \quad (7.61)$$

На границі якої задано крайову умову:

$$F(x,y) = 3x^2 + 5y^2. \quad (7.62)$$

Область розділити квадратною сіткою з $h = 0,1$. Кількість випадкових випробувань на кожному кроці: 10000.

Розв'язання

Область визначення – круг діаметру 1 з центром в точці (0,5;0,5). Сітку тільки у цій області будувати незручно тому:

а) побудуємо квадрат довжини 1 з лівою нижньою вершиною у точці $(x_0, y_0) = (0;0)$. Покриємо квадрат сіткою з кроком $h=0,1$ і впишемо в нього коло (рис. 7.8);

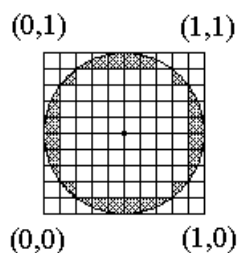


Рисунок 7.8 – Область інтегрування і сітка для прикладу 7.6

б) визначимо 2 матриці розміром 11×11 з нульовими елементами:

- u – матриця, елементи якої є значення шуканої функції,
- v – матриця для знаходження граничних точок. Її елементи дорівнюють:
 - 0 - у внутрішніх точках області;
 - 1 - в інших точках (граничних або тих, що лежать поза областю).

Нумерація елементів матриць починається з 1 і для наочності базується на природному представленні матриці u :

$$u(i,j) = u(x(i),y(j)) \quad (7.63)$$

в) виділимо граничну область (обмежена заштрихованими квадратами)

На граничні точки сітки перенесемо граничні умови області таким чином:

а) починаємо обхід усіх точок сітки наступним чином:

присвоюємо x і y поточні значення, що знаходяться у вузлах сітки (i,j)

$$\begin{cases} x = x_0 + (i-1) \cdot h, \\ y = y_0 + (j-1) \cdot h, \end{cases} \quad (7.64)$$

перевіряємо, чи лежать точки на граничній лінії, що має рівняння:

$$(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 = 0.25 \quad (7.65)$$

Якщо (7.65) виконується - присвоюємо у цій точці значення згідно з граничними умовами (7.62):

$$\begin{cases} u(i,j) = 3 \cdot x^2 + 5 \cdot x^2; \\ v(i,j) = 1 \end{cases} \quad (7.66)$$

Якщо умова (7.65) не виконується перевіряємо, чи знаходиться точка (x,y) всередині кола:

$$(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 < 0.25 \quad (7.67)$$

Якщо умова (7.67) не виконується – присвоюємо у розглянутому вузлі $u(i,j)=0$; $v(i,j) = 1$ переходимо до наступного вузла сітки.

Якщо умова (7.67) виконується – перевіряємо, чи є точка (i,j) зовнішнім вузлом сітки. Якщо вузол (i,j), що вивчається, є зовнішнім, те повинно виконуватися одна з умов (7.60 – 7.63)

$$(x - h - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 < 0.25, \quad (7.68)$$

$$(x + h - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 < 0.25, \quad (7.69)$$

$$(x - 0.5)^2 + (y - h - 0.5)^2 < 0.25, \quad (7.70)$$

$$(x - 0.5)^2 + (y + h - 0.5)^2 < 0.25, \quad (7.71)$$

У цьому випадку відбувається присвоєння згідно (7.66).

Надалі проводимо розрахунки. Для кожного з вузлів сітки, для яких виконується умова $v(i,j)=0$ проводимо $n_w = 10000$ випадкових випробувань:

а) запам'ятаємо поточні координати точки: $p = i$; $q = j$;

б) генеруємо ціле випадкове число s , що має рівномірний розподіл від 1 до 4;

в) в залежності від величини s , проводимо зміну координат точки за таким правилом

якщо $c = 1$, то $p = p-1$,

якщо $c = 2$, то $p = p+1$,

якщо $c = 3$, то $q = q-1$,

якщо $c = 4$, то $q = q+1$,

г) продовжуємо кроки б) і в), поки не вийдемо на границю області, де $v(p,q)=1$. У цьому випадку додаємо до змінної $u(i,j)$ величину $u(p,q)$ на границі області,

д) по закінченні nw випробувань знаходимо середнє значення змінної $u(i,j)$

Після завершення розрахунків одержані результати видаємо на друк або будуємо графіки. При цьому, для зручності представлення слід транспонувати матрицю u , щоб рядки відповідали осі ординат, а стовпчики – осі абсцис.

Текст скрипту для виконання розрахунків наведено у лістингу 7.6.

Лістинг 7.6

```
u=zeros(11,11);
v=zeros(11,11);
h=0.1
nw=10000
for i = 1:11
    for j=1:11
        x=(i-1)*h;
        y=(j-1)*h;
        if (x-0.5).^2+(y-0.5).^2==0.25
            u(i,j)=3*x.^2+5*y.^2;
            v(i,j)=1;
        end
        if (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 > 0.25
            u(j, i) = 0;
            v(j, i) = 1;
        end
        if (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 < 0.25
```

```
        if (x-h-0.5)^2 + (y-0.5)^2 > 0.25
            u(i, j) = 3 * x ^ 2 + 5 * y ^ 2;
            v(i, j)=1;
        elseif (x+h-0.5)^2 + (y-0.5)^2 > 0.25
            u(i, j) = 3 * x ^ 2 + 5 * y ^ 2;
            v(i, j)=1;
        elseif (x-0.5)^2 + (y-h-0.5) ^ 2 > 0.25
            u(i, j) = 3 * x ^ 2 + 5 * y ^ 2;
            v(i, j)=1;
        elseif (x-0.5)^ 2 + (y+h-0.5)^2 > 0.25
            u(i, j) = 3 * x ^ 2 + 5 * y ^ 2;
            v(i, j)=1;
        else u(i,j)= 0; v(i,j)=0;
        end
    end
end //циклу j
end// циклу i
//*****calculation*****
for j = 1:11
    for i = 1:11
        if v(j, i) == 0
            u(j, i) = 0;
            for k = 1:nw
                p = i;
                q = j;
                while v(q, p)<>1
                    c = int(4 * rand()) + 1;
                    if c == 1
                        p = p - 1;
                    end
                end
            end
        end
    end
end
```



```
        if c == 2
            p = p + 1;
        end
        if c == 3
            q = q - 1;
        end
        if c == 4
            q = q + 1;
        end
    end//while
    u(j, i) = u(q, p) + u(j, i);
end//циклу k
    u(j, i) = u(j, i) / nw;
end //if v(j,i)=0
end // циклу j
end // циклу i
x=[0:0.1:1];
y=[0:0.1:1];
u'
```

Значення функції u наведені у таблиці 7.1. За цими даними можна побудувати трьохвимірний графік або серію двовимірних графіків, що відображають «зрізи» по одній з осей. Оскільки точок небагато, вид графіків не є «презентабельним», тому ми обмежилися таблицею.

Таблиця 7.1 – Результати розрахунків функції u в прикладі 7.6.

		x										
		0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
y	0	0	0	0	0	0	0,8	0	0	0	0	0
	2	0	0	0,17	0,32	0,53	0,94	1,13	1,52	0	0	0
	3	0	0,23	0,52	0,76	1,03	1,36	1,60	1,88	2,12	2,63	0
	4	0	0,48	0,87	1,18	1,48	1,81	2,07	2,35	2,60	2,88	0
	5	0	0,83	1,26	1,64	1,92	2,26	2,57	2,80	3,06	3,23	0
	6	1,3	1,43	1,76	2,10	2,42	2,74	3,01	3,29	3,54	3,81	4,3
	7	0	1,83	2,23	2,63	2,93	3,26	3,49	3,80	4,04	4,23	0
	8	0	2,48	2,79	3,13	3,48	3,81	4,06	4,33	4,60	4,88	0
	9	0	0	3,32	3,69	4,02	4,34	4,61	4,89	5,1	0	0
	10	0	0	4,17	4,32	4,53	4,95	5,13	5,52	0	0	0
	11	0	0	0	0	0	5,8	0	0	0	0	0

Контрольні запитання

- 1 Постановка задачі для рівняння теплопровідності.
- 2 Які є вимоги для крайових умов рівняння теплопровідності?
- 3 Який шаблон використовується для явного розв'язання рівняння теплопровідності?
- 4 Зміст поняття «явна схема» стосовно рівняння теплопровідності
- 5 Алгоритм явної схеми для рівняння теплопровідності
- 6 У чому полягають недоліки явної схеми розв'язання рівняння теплопровідності?
- 7 Зміст поняття «неявна схема» стосовно рівняння теплопровідності.
- 8 Який шаблон використовують для неявної схеми для рівняння теплопровідності?

- 9 Який вид має система рівнянь для розв'язання рівняння теплопровідності за неявною схемою?
- 10 Чому розв'язок системи рівнянь неявної схеми для рівняння теплопровідності є стійким?
- 11 У чому на практиці проявляється нестійкість розв'язків рівняння параболічного типу за явною схемою?
- 12 Як на практиці реалізувати алгоритм неявного методу для розв'язання рівняння параболічного типу?
- 13 До чого на практиці приводить стійкість розв'язків рівняння параболічного типу за неявним методом?
- 14 Постановка задачі розв'язання рівняння гіперболічного типу
- 15 Який шаблон використовують для розв'язання рівняння гіперболічного типу?
- 16 Алгоритм розв'язання рівняння гіперболічного типу методом сіток
- 17 У якому випадку схема розв'язання рівняння гіперболічного типу буде стійкою?
- 18 У чому полягає основна ідея диференціально-різницевого методу?
- 19 Алгоритм побудови схеми диференціально-різницевого методу
- 20 Побудувати диференціально-різницеву схему для рівняння теплопровідності.
- 21 Ідея методу випадкових блукань для розв'язання задачі Діріхле.
- 22 Алгоритм методу випадкових блукань.
- 23 Як можна практично наближено побудувати граничні умови для кусково-неперервної області (на прикладі кругової) при програмуванні при простому перенесенні граничних умов?

Завдання для самостійної роботи

Завдання 7.1

Стержень довжиною 1 м прогріли рівномірно по довжині, так, що температура у будь якої точці склала T_1 °C. Після цього обидва кінця стержня помістили у постійні температурні середовища з температурами T_2 і T_3 .

Коефіцієнт у рівнянні теплопровідності дорівнює a . Користуючись неявною схемою,

а) підібрати час, через який середня температура вздовж стержня складе T_4 °С, побудувати залежність середньої температури від

а) побудувати графіки температурних профілів стержня через окремі проміжки часу,

б) підібрати час, через який середня температура вздовж стержня складе T_4 °С, побудувати залежність середньої температури від часу.

Використовувати кроки $h=0,01$; $\tau = 0,05$. Вхідні дані наведені в табл. 7.2.

Примітка. Для розрахунків середньої температури використати інтегрування методом трапецій по формулі:

$$\bar{T} = \frac{\int_0^{\ell} T(x) dx}{\ell} = \frac{1}{\ell} \int_0^{\ell} T(x) dx$$

Таблиця 7.2 – Вхідні дані для завдання 7.1

Варіант	a	T ₁	T ₂	T ₃	T ₄
1	0,1	100	0	10	30
2	0,15	0	100	100	50
3	0,2	50	100	100	80
4	0,1	20	50	100	70
5	0,15	0	100	90	70
6	0,2	70	20	0	40
7	0,1	10	70	90	40
8	0,15	100	0	10	30
9	0,2	0	100	100	50
10	0,1	50	100	100	80
11	0,15	20	50	100	70
12	0,2	0	100	90	70
13	0,1	70	20	10	40
14	0,15	10	70	90	40
15	0,2	100	100	0	60
16	0,1	50	100	100	80
17	0,15	20	50	100	70
18	0,2	0	100	90	70
19	0,1	70	20	0	40
20	0,15	10	70	90	40
21	0,2	100	0	10	30
22	0,1	0	100	100	50
23	0,15	50	100	100	80
24	0,2	20	50	100	70
25	0,1	0	100	90	70
26	0,15	70	20	10	40

Завдання 7.2

Перевірити результати для побудови змін температурного профілю від часу (дані завдання 7.1) методом прямих

Завдання 7.3

Розв'язати задачу [завдання 6.1](#) методом випадкових блукань. Порівняти з результатами розв'язання методом сіток

Навчальне видання

Навчальний посібник

з дисципліни

**«Чисельні методи. Частина 2. Чисельні методи аналізу. Диференціальні
рівняння»**

для здобувачів першого (бакалаврського) рівня освіти

за спеціальністю

(для студентів спеціальностей

121 «Інженерія програмного забезпечення»,

126 «Інформаційні технології та системи»)

(Електронне видання

Укладач:

Кондратов Сергій Олексійович. Іванов Віталій Геннадійович

Оригінал-макет В. Г. Іванов

Підписано до друку __. __. 202__.

Формат 60x84 1/16. Папір типогр. Гарнітура Times.

Друк офсетний. Умов. друк. арк. __. Обл.-вид. арк. __.

Тираж __ екз. Вид. № __. Замов. № __. Ціна договірна.

Видавництво Східноукраїнського національного університету
імені Володимира Даля

Свідоцтво про реєстрацію: серія ДК № 1620 від 18.12.03 р.

Адреса університета: вул. Іоанна Павла II, 17

м. Київ, 01042, Україна

e-mail: vidavnictvosnu.ua@gmail.com