

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ТЕХНОЛОГІЙ ТА
ДИЗАЙНУ**

В.Ю. Щербань, С.М. Краснитський, В.Г. Резанова

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В САПР

Обрані розділи та приклади застосування

Рекомендовано Вченою радою Київського національного
університету технологій та дизайну
як навчальний посібник

Київ КНУТД 2011

УДК 517.1:519.6
Щ 51

В.Ю. Щербань, С.М. Краснитський, В.Г. Резанова. Математичні моделі в САПР. Обрані розділи та приклади застосування: Навчальний посібник. – К.: КНУТД, 2011. – 219 с.: - Бібліогр.: 214 с.: - бібліогр. назв 52.: - іл. 67.: - табл. 6. Укр. Мовою.

Навчальний посібник «Математичні моделі в САПР» складається з шести великих розділів, до кожного з яких належить декілька підрозділів, а також включає 16 додатків.

Перший розділ присвячений методам розв'язання систем лінійних рівнянь.

У другому розділі розглядаються нелінійні рівняння та системи.

У третьому розділі наводяться теоретичні поняття та методи розв'язання диференціальних рівнянь та їх систем.

У четвертому розділі подаються методи апроксимації функцій.

П'ятий розділ дає теоретичні основи лінійного регресійного аналізу.

Шостий розділ – планування експерименту: від початкових понять до практичної реалізації.

У кожному розділі наводяться конкретні математичні моделі, реалізовані за допомогою описаних методів.

У додатках наведено лістинги програмних процедур, що реалізують математичні методи. Також у додатки винесено деякий теоретичний матеріал, необхідний для розуміння матеріалу, наведеного в основних розділах.

Навчальний посібник якнайширше охоплює всі проблеми і аспекти, пов'язані з математичним моделюванням в САПР і може бути використаний як викладачами, так і студентами, що займаються даною проблематикою.

Рецензенти

Мацак Іван Каленикович,

доктор фізико-математичних наук, професор Київського Національного університету ім. Т.Шевченка

Опанасенко Володимир Миколайович,

доктор технічних наук, зав.відділом інституту кібернетики ім. В.М.Глушкова
НАН України

Здоренко Валерій Георгійович

доктор технічних наук, професор Київського національного університету технологій та дизайну

Рекомендовано Вченою радою Київського національного університету технологій та дизайну

як навчальний посібник

Протокол № 4 від 24.11.2010 р.

ISBN

© В.Ю. Щербань, С.М. Краснитський,
В.Г. Резанова, 2011
© КНУТД, 2011

Передмова

В дослідженнях технічного, технологічного, економічного напрямків часто доводиться створювати і аналізувати математичні моделі реальних явищ та процесів. Наукові задачі легкої промисловості не становлять тут винятку. Різноманітні питання прикладної механіки, теорії машин і механізмів легкої промисловості, хімії волокон та полімерів, матеріалознавства, економіки галузей, побудови розкрийних схем, організації технологічних процесів та прогнозування характеристик їх вихідних продуктів — далеко не повний перелік тих областей досліджень, які потребують якісного математичного моделювання для одержання вагомих і надійних результатів.

Мета математичного моделювання може бути різною. Часто такою метою буває передбачення (прогнозування) поведінки тих чи інших характеристик досліджуваних об'єктів. Типи застосовуваних математичних моделей є вельми різноманітними. Звичайно, використання конкретного типу моделі залежить від розв'язуваної задачі і властивостей об'єкту дослідження. Але попри всю відзначену різноманітність об'єктів дослідження і їх математичних моделей, можна вказати деякі математичні об'єкти або структури, які найчастіше фігурують в якості математичних моделей явищ, процесів, систем або в якості компонентів таких моделей.

Велике значення мають математичні моделі у вигляді диференціальних рівнянь, які є одним з головних знарядь дослідження найрізноманітніших явищ і процесів. Фундаментальність і глибину відображення суті справи диференційними рівняннями (детермінованими або стохастичними) та їх системами забезпечено в разі адекватного відображення явища «в малому» за допомогою послідууючої дії інтегрування.

Процес зазначеного інтегрування може виявитися дуже складним, і одним із шляхів подолання складнощів є заміна диференційних операторів скінченнорізницеvими, що у багатьох випадках дозволяє звести задачу до розв'язання деяких систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Лінійні алгебраїчні рівняння зовсім не обов'язково виступають як апроксимуючий засіб. У багатьох ситуаціях вони дають безпосередній опис досліджуваного явища. Такими є, зокрема, ситуації, що зводяться до деякої кількості співвідношень «балансового» типу. Прикладами тут можуть бути задачі збалансування галузей економіки, розподілу ресурсів (різної природи), деякі схеми електротехніки тощо.

Звичайно, не завжди вдається дати адекватний опис досліджуваного процесу за допомогою лінійних рівнянь або їх систем. Нелінійні зв'язки між фрагментами матеріальних систем, різними змінними, що впливають на хід процесу тощо є скоріш правилом, ніж виключенням. Так, диференціальні рівняння, що описують досліджуваний процес, зовсім необов'язково є лінійними, а загальні інтеграли таких рівнянь є, взагалі кажучи, нелінійними співвідношеннями між змінними. Навіть при розв'язанні звичайних лінійних диференціальних рівнянь із сталими коефіцієнтами порядку вище першого доводиться мати справи з їх характеристичними рівняннями, що також є нелінійними. Тож при математичному моделюванні досліджуваного явища досить часто доводиться мати справу нелінійними рівняннями (алгебраїчними або трансцендентними) або їх системами, і досліднику треба мати в розпорядженні методи розв'язанні таких співвідношень.

До досить специфічних задач математичного моделювання у легкій промисловості відноситься підбір математичних виразів для опису різноманітних кривих ліній та поверхонь. Згадані криві можуть бути, наприклад, контурами реальних деталей виробів одягу або взуття, а поверхні — просторовими фрагментами таких виробів. Відповідні математичні вирази можуть використовуватися у різних цілях, серед яких важливими є, наприклад, створення розкрійних схем або розкладок деталей за допомогою комп'ютерної техніки. Зазначений підбір математичних виразів є природнім виконувати, використовуючи різноманітні методи апроксимації функцій однієї та кількох змінних — інтерполяцію, рівномірне наближення, сплайни тощо.

Ряд важливих виробничих та економічних задач (не тільки легкої промисловості) природним чином об'єднуються не стільки за змістом, скільки за методами їх розв'язання. Так, у багатьох випадках недоцільною є велика точність апроксимації числових реалізацій зв'язків між змінними, що описують функціонування деякої системи, а натомість потрібне адекватне моделювання головних тенденцій розвитку і прогнозування результатів такого розвитку з прийнятною точністю. Прикладом тут може служити процес зміни властивостей того чи іншого матеріалу в процесі його переробки, коливання цін на продукцію з часом та ринковою ситуацією тощо. Адекватні математичні моделі таких ситуацій часто включають в себе стохастичну складову і є надзвичайно різноманітними. Серед зазначених моделей досить часто використовуються моделі регресійного аналізу і, особливо, лінійного регресійного аналізу. Дані для побудови таких моделей можуть поступати незалежно від побажань дослідника (пасивний експеримент) або в результаті деяких спланованих дій (активний експеримент). І перша, і друга ситуації можуть природним чином виникати на практиці. Наприклад, при аналізі діючого технологічного процесу може статися, що надання параметрам такого процесу бажаних значень є надто складною задачею в умовах реального виробництва. В той же час проведення лабораторних експериментів, наприклад, із складами хімічних речовин, часто буває спряжене з можливістю надавати параметрам заздалегідь спланованих значень, і задача тоді полягає в оптимізації такого надання (у тому чи іншому сенсі).

Дана робота призначена, в першу чергу, молодим науковцям-початківцям. Для можливості роботи з нею, в основному, достатньо попереднього опанування дисциплін математичних напрямків, що викладаються на протязі перших трьох років навчання у технічних або економічних вищих навчальних закладах.

У роботі наводяться необхідні відомості відносно тих типів математичних моделей, про які вище йшла мова (розділи 1 — 6). Автори ставили на меті дати результати з відповідних галузей, які вони вважають основними або такими, що

являють собою досить ґрунтовне введення у предмет обговорювання. З цієї причини викладення матеріалу в роботі носить, в принципі, концептуально - рецептурний характер, в ній майже не міститься математичних доведень, за винятком, в основному, тих випадків, коли такі доведення можуть правильно налаштувати читача на методику застосувань теоретичних положень (зокрема, це стосується матеріалу розділу 5) або є зовсім простими. З іншого боку, з метою створення у читача адекватного розуміння можливостей представленого у роботі математичного апарату, наведено ряд прикладів, що носять не ілюстративний, а досить-таки реальний характер і є, по суті, фрагментами прикладних досліджень з окремих питань прикладної механіки і фізичної хімії.

Крім того, в додатках 1 — 12 наведено лістинги алгоритмів, що відповідають процедурам побудови і використання вказаних моделей. Для зручності опанування матеріалу розділу 5 (загальна лінійна модель регресійного аналізу) у додатку 13 наводяться деякі допоміжні відомості з теорії ймовірностей, в основному, щодо векторних випадкових величин і багатовимірного нормального розподілу — тем, що часто лише мимохідь висвітлюються у стандартних курсах для майбутніх інженерів. З цією ж метою наводяться також основні відомості з теорії статистичного оцінювання і перевірки статистичних гіпотез (додаток 14).

РОЗДІЛ 1. СИСТЕМИ ЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ

1.1 Вступні положення

При проведенні досліджень механічних систем часто доводиться зустрічатися з необхідністю розв'язання систем лінійних рівнянь. Тут можна говорити про їх використання не тільки при вивченні рівноваги механічних об'єктів, але і при розв'язанні систем диференціальних рівнянь як звичайних, так і в частинних похідних, що описують поведінку механічних систем з великим числом степенів волі.

У загальному випадку систему лінійних рівнянь можна представити таким чином:

$$\left. \begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2, \\ \dots & \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

де a_{ij} ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$) — коефіцієнти при невідомих величинах;

x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) — невідомі (при розв'язанні задач статички і динаміки це можуть бути реакції зв'язків, узагальнені координати, швидкості і прискорення);

b_i ($i = 1, 2, \dots, m$) — постійні;

n — число невідомих, що входять в систему;

m — число рівнянь.

Систему рівнянь (1.1) зручно представити у векторній формі

$$Ax = b \quad (1.2)$$

де A — матриця коефіцієнтів a_{ij} ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$); $x = (x_1, \dots, x_n)$ — шуканий n - компонентний вектор; $b = (b_1, \dots, b_m)$ — заданий m - компонентний вектор (вектор правих частин).

Задачі з області механіки, що розглядатимуться нижче, в основному, є статично визначеними (число невідомих дорівнює числу можливих рівнянь,

1.2 Методи розв'язання систем лінійних рівнянь

1.2.1 Формули Крамера

Точний розв'язок системи (1.3) в явному вигляді може бути отриманий з використанням формул Крамера. Суть методу полягає в послідовному діленні перетвореного визначника (у якого відповідний стовпець коефіцієнтів лівої частини системи замінюється стовпцем b_1, b_2, \dots, b_n) на початковий визначник, що складається з коефіцієнтів лівої частини системи рівнянь (1.3). Таким чином,

вектор розв'язків системи $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}$ може бути визначений наступним чином:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Delta_n \end{bmatrix}, \quad (1.5)$$

де $\Delta_i = \sum_{j=1}^n A_{ji} b_j = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1,i-1} & b_1 & a_{1,i+1} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2,i-1} & b_2 & a_{2,i+1} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{n,i-1} & b_n & a_{n,i+1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$ — визначники,

отримані з визначника Δ шляхом заміни його i -го стовпця стовпчиком вільних членів системи (1.3).

З рівності (1.5) отримуємо *формули Крамера*

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, x_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}, \dots, x_n = \frac{\Delta_n}{\Delta} \quad (1.6)$$

Приклад 1. Розв'язати систему лінійних рівнянь

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + x_2 - 5x_3 + x_4 &= 8, \\ x_1 - 3x_2 - 6x_4 &= 9, \\ 2x_2 - x_3 + 2x_4 &= 5, \\ x_1 + 4x_2 - 7x_3 + 6x_4 &= 0. \end{aligned} \right\}$$

Розв'язання. Визначник цієї системи

$$\Delta = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 & 1 \\ 1 & 3 & 0 & 6 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 7 & 6 \end{vmatrix} = 27 \neq 0$$

Обчислюючи

додаткові

визначники,

отримаємо:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 8 & 1 & 5 & 1 \\ 9 & 3 & 0 & 6 \\ 5 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 4 & 7 & 6 \end{vmatrix} = 81; \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 2 & 8 & 5 & 1 \\ 1 & 9 & 0 & 6 \\ 0 & 5 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 7 & 6 \end{vmatrix} = -108;$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 8 & 1 \\ 1 & 3 & 9 & 6 \\ 0 & 2 & 5 & 2 \\ 1 & 4 & 0 & 6 \end{vmatrix} = -27; \quad \Delta_4 = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 5 & 8 \\ 1 & 3 & 0 & 9 \\ 0 & 2 & 1 & 5 \\ 1 & 4 & 7 & 0 \end{vmatrix} = 27.$$

Звідси

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{81}{27} = 3; \quad x_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{108}{27} = -4; \quad x_3 = \frac{\Delta_3}{\Delta} = -\frac{27}{27} = -1; \quad x_4 = \frac{\Delta_4}{\Delta} = \frac{27}{27} = 1.$$

Процедуру, що реалізує метод Крамера для розв'язання систем лінійних рівнянь мовою Object Pascal, наведено у додатку 2. Програму, що використовує наведену процедуру, розроблено в середовищі DELPHI.

Інтерфейс програми наведено на рис. 1.1.

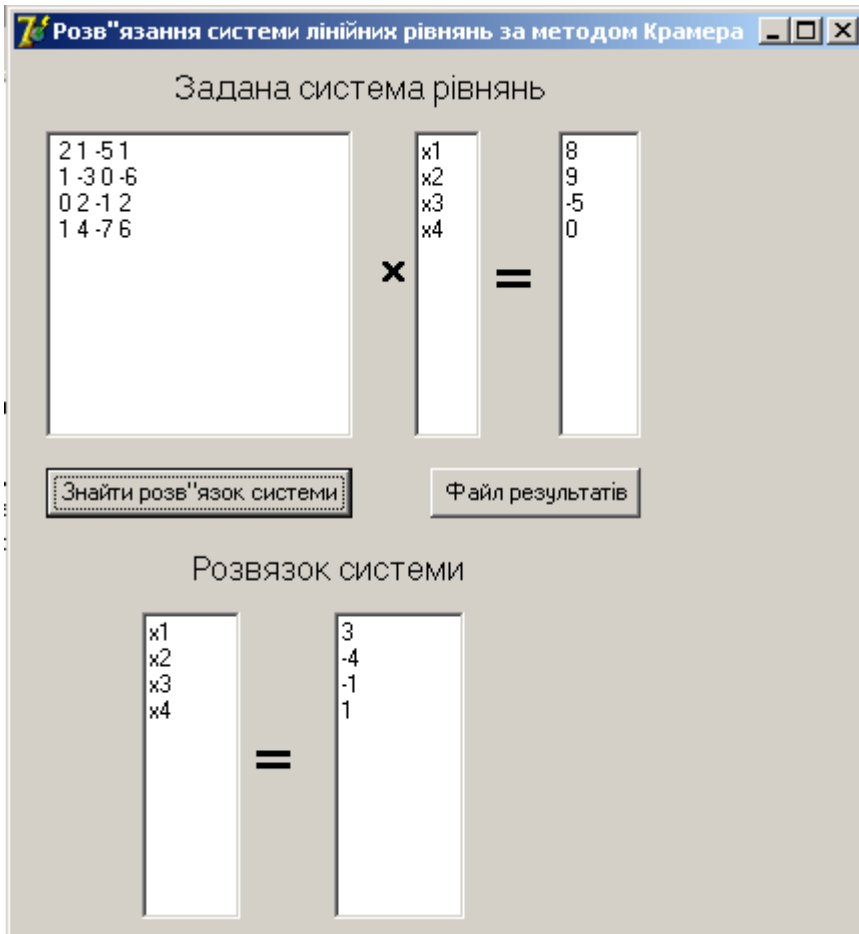


Рис.1.1. Інтерфейс програми, що здійснює розв'язання системи лінійних рівнянь методом Крамера.

Вхідні дані вводяться з файлу, зображеного на рис. 1.2.

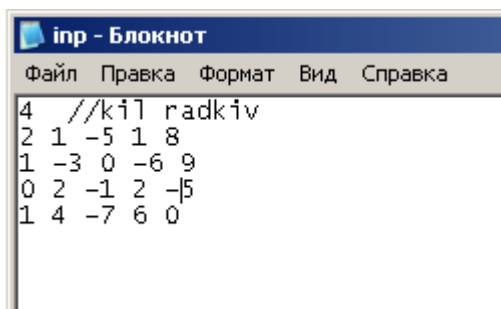


Рис. 1.2. Файл даних для розв'язання системи лінійних рівнянь методом Крамера.

Результати роботи програми виводяться в файл, який наведено на рис. 1.3.

```
out - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
Розв'язання системи лінійних рівнянь методом Крамера

Головна матриця системи
2.00 1.00 -5.00 1.00
1.00 -3.00 0.00 -6.00
0.00 2.00 -1.00 2.00
1.00 4.00 -7.00 6.00

Визначник головної матриці системи deltaA
27.00

Додатковий визначник при підстановці в 1 стовпчик
8.00 1.00 -5.00 1.00
9.00 -3.00 0.00 -6.00
-5.00 2.00 -1.00 2.00
0.00 4.00 -7.00 6.00

delta
81.00

Додатковий визначник при підстановці в 2 стовпчик
2.00 8.00 -5.00 1.00
1.00 9.00 0.00 -6.00
0.00 -5.00 -1.00 2.00
1.00 0.00 -7.00 6.00

delta
-108.00

Додатковий визначник при підстановці в 3 стовпчик
2.00 1.00 8.00 1.00
1.00 -3.00 9.00 -6.00
0.00 2.00 -5.00 2.00
1.00 4.00 0.00 6.00

delta
-27.00

Додатковий визначник при підстановці в 4 стовпчик
2.00 1.00 -5.00 8.00
1.00 -3.00 0.00 9.00
0.00 2.00 -1.00 -5.00
1.00 4.00 -7.00 0.00

delta
27.00

Розв'язок системи
x1= 3.000
x2= -4.000
x3= -1.000
x4= 1.000
```

Рис. 1.3. Файл результатів роботи програми – розв’язання системи лінійних рівнянь методом Крамера.

1.2.2 Метод Гаусса

Метод послідовного виключення невідомих (метод Гаусса) базується на послідовному пониженні порядку системи (1.3) за рахунок виключення невідомих x_1, x_2, \dots, x_{n-1} в лінійних рівняннях. Це призводить до отримання матриці коефіцієнтів a_{ij} ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$) трикутного вигляду. Ця послідовність процедур характеризується як прямий хід виключення змінних. Для його здійснення необхідно послідовно віднімати перше рівняння з подальших, множачи його ліву і праву частини на постійні коефіцієнти, що представляють частку від ділення постійних коефіцієнтів $m_{ij} = a_{ji} / a_{ii}$, де $i = 1, 2, \dots, n - 1; j = i + 1, i + 2, \dots, n$. Кінцева система рівнянь на прямому ході має вигляд

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1k}x_k + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2k}^{(1)}x_k + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \dots\dots\dots \\ a_{kk}^{(k-1)}x_1 + \dots + a_{kn}^{(k-1)}x_n = b_n^{(k-1)} \\ \dots\dots\dots \\ a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \end{array} \right\} \quad (1.7)$$

де $a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1}b_{1j}$ ($i, j \geq 2$), при цьому $b_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}}$ ($j > 2$);

$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)}b_{2j}^{(1)}$ ($i, j \geq 3$), при цьому $b_{3j}^{(2)} = \frac{a_{3j}^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}$ ($j > 3$), і т. д.

З системи (1.7) корені системи знаходяться тривіально.

Таким чином, процес розв'язання лінійної системи (1.3) за методом Гаусса зводиться до побудови еквівалентної системи (1.7), що має трикутну матрицю. Необхідною і достатньою умовою застосовності методу є нерівність нулю всіх «ведучих елементів». Процес знаходження коефіцієнтів трикутної системи зазвичай називається *прямим ходом*, процес отримання значень невідомих — *зворотнім ходом*.

Процедуру, що реалізує метод Гаусса для розв'язання систем лінійних рівнянь мовою Object Pascal, наведено у додатку 3. Програму, що використовує

наведену процедуру, розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 1.4.



Рис. 1.4. Інтерфейс програми для розв'язання системи лінійних рівнянь методом Гаусса

Вхідні дані вводяться з файлу, зображеного на рис. 1.5.

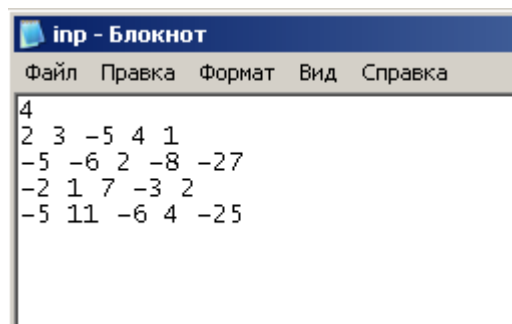


Рис. 1.5. Файл даних для розв'язання системи лінійних рівнянь методом Гаусса.

Результати роботи програми наведено на рис. 1.6.

```
out - Блокнот
Файл Правка Формат Вид Справка
Розв'язання системи лінійних рівнянь методом Гауса
Вхідна матриця системи
2.00 3.00 -5.00 4.00 1.00
-5.00 -6.00 2.00 -8.00 -27.00
-2.00 1.00 7.00 -3.00 2.00
-5.00 11.00 -6.00 4.00 -25.00
Ділимо рядок на діагональний елемент
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
-5.00 -6.00 2.00 -8.00 -27.00
-2.00 1.00 7.00 -3.00 2.00
-5.00 11.00 -6.00 4.00 -25.00
Перетворення - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.50 -10.50 2.00 -24.50
0.00 4.00 2.00 1.00 3.00
0.00 18.50 -18.50 14.00 -22.50
Ділимо рядок на діагональний елемент
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 4.00 2.00 1.00 3.00
0.00 18.50 -18.50 14.00 -22.50
Перетворення - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 30.00 -4.33 68.33
0.00 0.00 111.00 -10.67 279.67
Ділимо рядок на діагональний елемент
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 1.00 -0.14 2.28
0.00 0.00 111.00 -10.67 279.67
Перетворення - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 1.00 -0.14 2.28
0.00 0.00 0.00 5.37 26.83
Ділимо рядок на діагональний елемент
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 1.00 -0.14 2.28
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00
Перетворення - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 1.00 -0.14 2.28
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00
Кінець прямого ходу
1.00 1.50 -2.50 2.00 0.50
0.00 1.00 -7.00 1.33 -16.33
0.00 0.00 1.00 -0.14 2.28
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00
Зворотній хід - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 -2.50 0.00 -9.50
0.00 1.00 -7.00 0.00 -23.00
0.00 0.00 1.00 0.00 3.00
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00
Зворотній хід - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 1.50 0.00 0.00 -2.00
0.00 1.00 0.00 0.00 -2.00
0.00 0.00 1.00 0.00 3.00
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00
```

```

Зворотній хід - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 0.00 0.00 0.00 1.00
0.00 1.00 0.00 0.00 -2.00
0.00 0.00 1.00 0.00 3.00
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00

Зворотній хід - множимо на коефіцієнт і додаємо
1.00 0.00 0.00 0.00 1.00
0.00 1.00 0.00 0.00 -2.00
0.00 0.00 1.00 0.00 3.00
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00

Завершення розв'язання
1.00 0.00 0.00 0.00 1.00
0.00 1.00 0.00 0.00 -2.00
0.00 0.00 1.00 0.00 3.00
0.00 0.00 0.00 1.00 5.00

Розв'язок системи
x1= 1.000
x2= -2.000
x3= 3.000
x4= 5.000

```

Рис.1.6. Файл результатів роботи програми – розв’язання системи лінійних рівнянь методом Гаусса.

1.2.3 Ітераційні методи

При великій кількості невідомих лінійної системи схема метода Гаусса, що дає точний розв’язок, стає дуже складною. В цих умовах для знаходження коренів системи інколи зручніше використовувати наближені чисельні методи. Серед цих методів виділимо ітераційні методи [2, 3, 4].

Ітераційні методи розв’язання систем лінійних рівнянь розглянемо на прикладі методу простих ітерацій і методу Зейделя.

Розглянемо метод простих ітерацій, реалізація якого здійснюється з використанням наступної формули ітераційного процесу

$$x_{i(j+1)} = x_{i(j)} - \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{k=1}^n a_{ik} x_{k(j)} - b_i \right) \quad (1.8)$$

Обчислення продовжуються до тих пір, поки $|x_{i(j+1)} - x_{i(j)}| > \epsilon$, де ϵ - задана точність обчислення кореня системи лінійних рівнянь.

Декілька слів необхідно сказати про достатню умову збіжності методу простих ітерацій. Якщо

$$C = \max_{1 \leq i \leq n} (C_i) < 1, \quad (1.9)$$

де $C_i = \left(\sum_{j=1}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| - 1 \right)$, $i = 1, 2, \dots, n$, то система лінійних рівнянь (1.3) має єдиний

розв'язок і ітераційний процес збігається до розв'язку зі швидкістю геометричної прогресії. Умову (1.9) можна інтерпретувати і так: ітераційний процес збігається, якщо величина модуля кожного діагонального елементу матриці коефіцієнтів більше суми модулів решти елементів відповідного рядка (або стовпчика). Така умова вимагає, щоб матрицю коефіцієнтів (перед визначенням коренів системи лінійних рівнянь) перетворити до вигляду, коли на головній діагоналі матриці розташовуватимуться максимальні за модулем елементи.

Метод Зейделя організовує ітераційний процес за наступною формулою

$$x_{i(j+1)} = x_{i(j)} - \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_{k(j+1)} + \sum_{k=i}^n a_{ik} x_{k(j)} - b_i \right). \quad (1.10)$$

Його відмінність від методу простих ітерацій полягає в тому, що уточнені значення $x_{i(j+1)}$ відразу підставляються в подальші рівняння.

Достатньою умовою збіжності методу Зейделя є наступна нерівність

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq q, \quad i = 1 \dots n, \quad q < 1. \quad (1.11)$$

Зазвичай метод Зейделя збігається швидше, ніж метод простих ітерацій.

Декілька слів необхідно сказати про обумовленість матриці коефіцієнтів, яка визначається з виразу

$$m = \frac{\sup \left[\sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right)^2} \right]}{\inf \left[\sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right)^2} \right]} \geq 1, \quad (1.12)$$

де \sup та \inf беруться по множині дійсних векторів $x = x_1, x_2, \dots, x_n$ з одиничною евклідовою нормою.

Якщо обумовленість матриці коефіцієнтів m близька до 1, то для такої системи відносна помилка при відшуканні коріння рівнянь порівнянна з відносною похибкою, з якою задається права частина. Система буде погано обумовленою якщо $m \gg 1$.

Процедури, що реалізують методи простих ітерацій та Зейделя наведено відповідно у додатках 4 та 5. Програму, що використовує наведені процедури, розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 1.7.

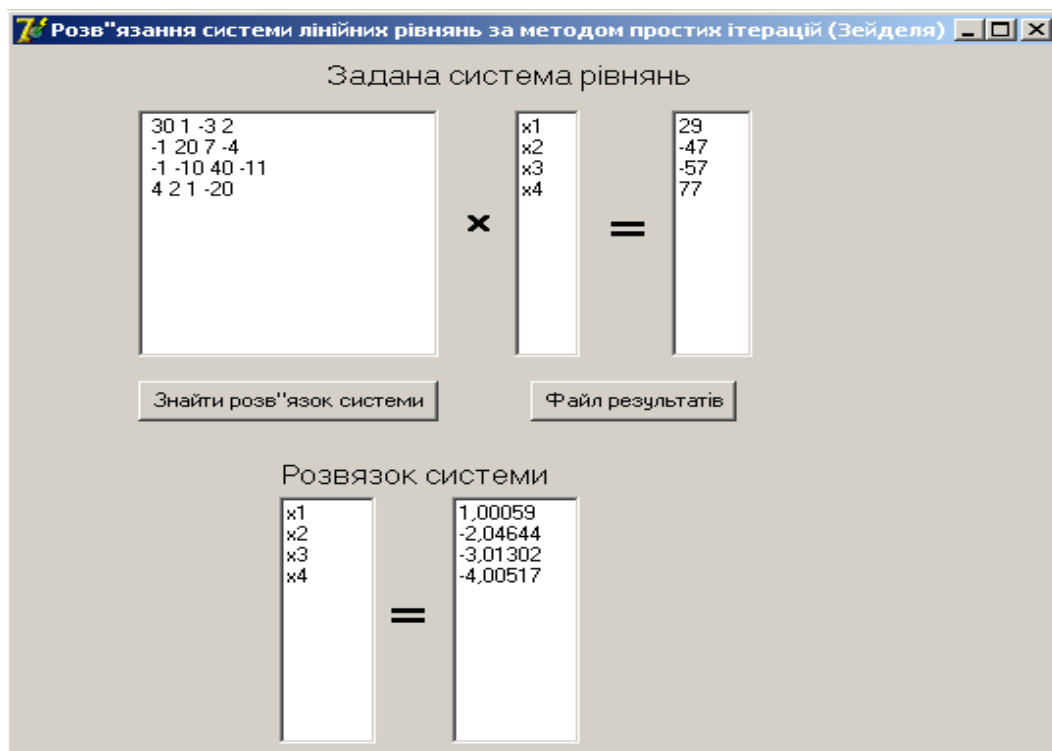


Рис. 1.7. Інтерфейс програми, що здійснює розв'язання системи лінійних рівнянь за методами простих ітерацій та Зейделя

Вхідні дані вводяться з файлу, зображеного на рис. 1.8.

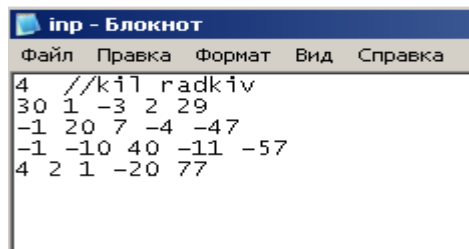
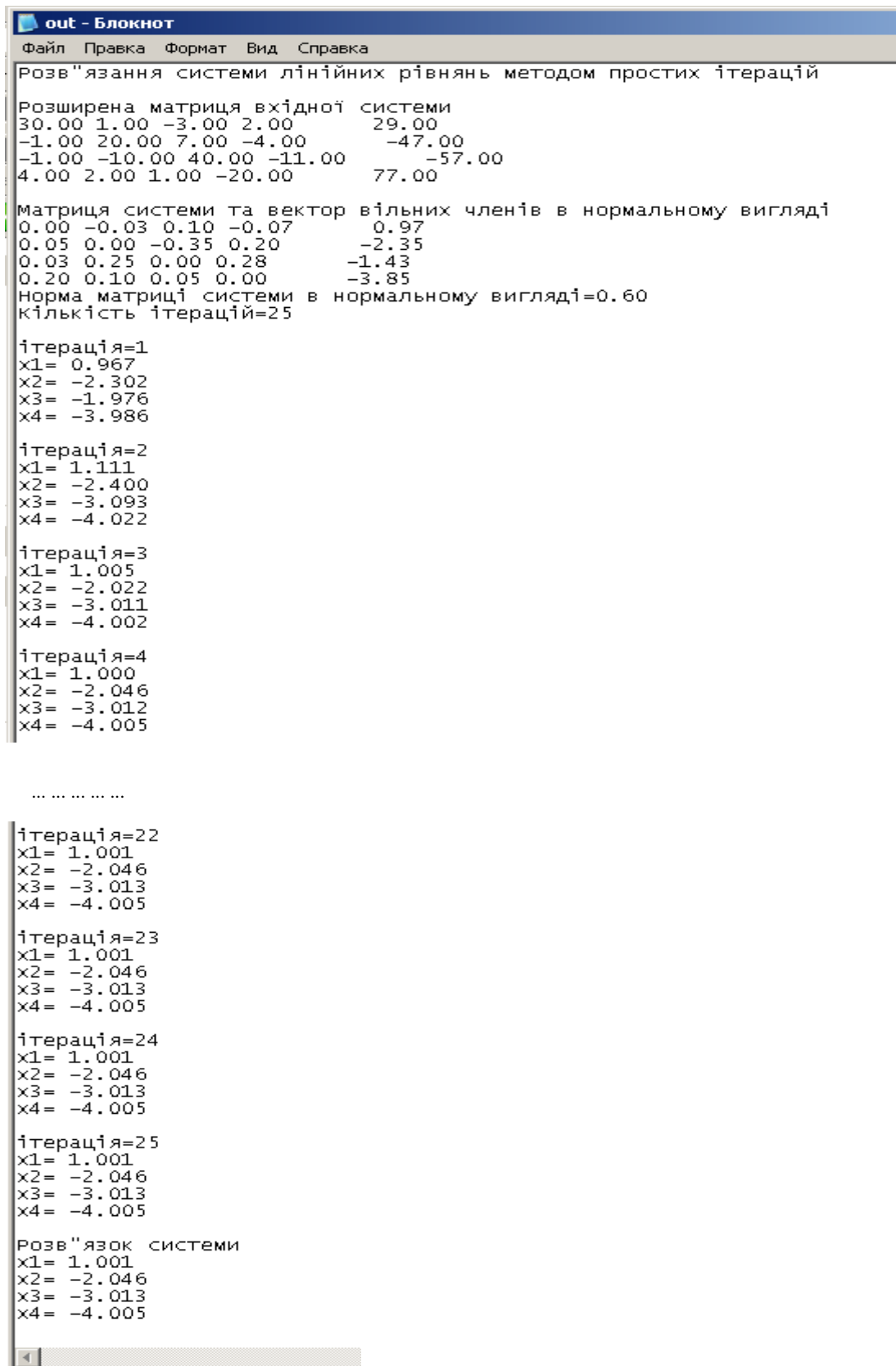


Рис. 1.8. Файл даних для розв'язання системи лінійних рівнянь методом простих ітерацій або Зейделя.

Результати роботи програми виводяться в файли, які наведено на рис. 1.9 та 1.10.



```
out - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
Розв'язання системи лінійних рівнянь методом простих ітерацій
Розширена матриця вхідної системи
30.00  1.00  -3.00  2.00      29.00
-1.00  20.00  7.00  -4.00     -47.00
-1.00  -10.00  40.00  -11.00    -57.00
4.00  2.00  1.00  -20.00     77.00
Матриця системи та вектор вільних членів в нормальному вигляді
0.00  -0.03  0.10  -0.07      0.97
0.05  0.00  -0.35  0.20     -2.35
0.03  0.25  0.00  0.28     -1.43
0.20  0.10  0.05  0.00     -3.85
Норма матриці системи в нормальному вигляді=0.60
кількість ітерацій=25
ітерація=1
x1= 0.967
x2= -2.302
x3= -1.976
x4= -3.986
ітерація=2
x1= 1.111
x2= -2.400
x3= -3.093
x4= -4.022
ітерація=3
x1= 1.005
x2= -2.022
x3= -3.011
x4= -4.002
ітерація=4
x1= 1.000
x2= -2.046
x3= -3.012
x4= -4.005
...
ітерація=22
x1= 1.001
x2= -2.046
x3= -3.013
x4= -4.005
ітерація=23
x1= 1.001
x2= -2.046
x3= -3.013
x4= -4.005
ітерація=24
x1= 1.001
x2= -2.046
x3= -3.013
x4= -4.005
ітерація=25
x1= 1.001
x2= -2.046
x3= -3.013
x4= -4.005
Розв'язок системи
x1= 1.001
x2= -2.046
x3= -3.013
x4= -4.005
```

Рис.1.9. Файл результатів роботи програми — розв'язання системи лінійних рівнянь за методом простих ітерацій

```
out - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
Розв'язання системи лінійних рівнянь методом Зейделя

Розширена матриця вхідної системи
30.00 1.00 -3.00 2.00      29.00
-1.00 20.00 7.00 -4.00    -47.00
-1.00 -10.00 40.00 -11.00  -57.00
4.00 2.00 1.00 -20.00     77.00

Матриця системи та вектор вільних членів в нормальному вигляді
0.00 -0.03 0.10 -0.07     0.97
0.05 0.00 -0.35 0.20     -2.35
0.03 0.25 0.00 0.28     -1.43
0.20 0.10 0.05 0.00     -3.85
Норма матриці системи в нормальному вигляді=0.60
delta - умова зупинки=0.00067

x1= 0.967
x2= -2.302
x3= -1.976
x4= -3.986
max (abs(x(k+1)-xk))=3.9856

x1= 1.111
x2= -2.400
x3= -3.093
x4= -4.022
max (abs(x(k+1)-xk))=0.0367

x1= 1.005
x2= -2.022
x3= -3.011
x4= -4.002
max (abs(x(k+1)-xk))=0.0207

x1= 1.000
x2= -2.046
x3= -3.012
x4= -4.005
max (abs(x(k+1)-xk))=0.0037

x1= 1.001
x2= -2.047
x3= -3.013
x4= -4.005
max (abs(x(k+1)-xk))=0.0001

Розв'язок системи
x1= 1.001
x2= -2.047
x3= -3.013
x4= -4.005
```

Рис. 1.10. Файл результатів роботи програми — розв'язання системи лінійних рівнянь за методом Зейделя

1.3 Деякі математичні моделі технічної механіки, що реалізуються з використанням чисельних методів

Приклад 1. Визначення тиску підйомного клину замкової системи циліндра на п'ятки голок. На рис. 1.11 представлена розрахункова схема рівноваги голки під дією прикладених до неї сил.

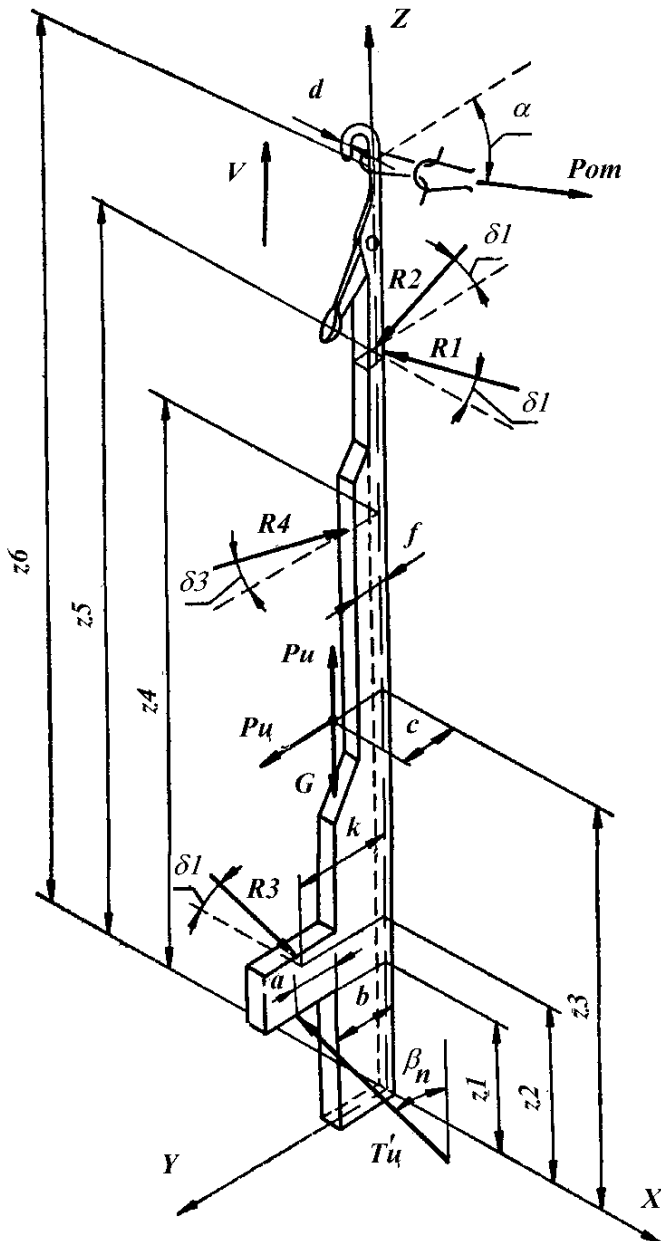


Рис. 1.11. Розрахункова схема для визначення тиску на п'ятку голки

Система рівнянь рівноваги має вигляд [5]

$$\left. \begin{aligned}
\sum_{i=1}^n X_i &= 0, \quad -\dot{O}_\delta \sin b_f - R_1 \cos d_1 + R_3 \cos d_1, \\
\sum_{i=1}^n Y_i &= 0, \quad -\dot{D}_\delta - \dot{D}_{i\dot{O}} \cos a + R_2 \cos d_1 - R_4 \cos d_3 = 0, \\
\sum_{i=1}^n Z_i &= 0, \quad \dot{O}_\delta \cos b_f - G + \dot{D}_u - \dot{D}_{i\dot{O}} \sin a - R_1 \sin d_1 - \\
&- R_2 \sin d_1 - R_3 \sin d_1 - R_4 \sin d_3 = 0, \\
\sum_{i=1}^n m_x(\mathbf{F}_i) &= 0, \quad -\dot{O}_\delta (a+b) \cos b_f + \dot{D}_\delta z_3 + (G \pm P_u)c - P_{i\dot{O}} (z_6 \cos a - \\
&- d \sin a) + R_2 z_5 \cos d_1 + R_3 k \sin d_1 - R_4 (z_4 \cos d_3 - f \sin d_3) = 0, \\
\sum_{i=1}^n m_y(\mathbf{F}_i) &= 0, \quad -\dot{O}_\delta (z_1 \sin b_f + \frac{\Delta}{2} \cos b_f) + R_1 (z_5 \cos d_1 - \\
&- \frac{\Delta}{2} \sin d_1) + R_2 \frac{\Delta}{2} \sin d_1 - R_3 (z_2 \cos d_1 - \frac{\Delta}{2} \sin d_1) = 0, \\
\sum_{i=1}^n m_z(\mathbf{F}_i) &= 0, \quad -\dot{O}_\delta (a+b) \sin b_f + R_2 \frac{\Delta}{2} \cos d_1 + R_3 k \cos d_1 = 0, \quad d_1 = d_3.
\end{aligned} \right\} (1.13)$$

де P_{OT} - сила відтяжки старої петлі; a - кут, що визначає положення петлі на голці при завершенні; $P_u = -mW$ - сила інерції голки; m - маса голки; W - прискорення руху центру тяжіння голки; $P_\delta = mrw^2$ - відцентрова сила інерції; R - радіус циліндра круглов'язальної машини; w - кутова швидкість обертання циліндра; T'_δ - тиск підйомного клину на п'яту голки; b_f - кут між напрямком сили T'_δ і нормаллю до профілю клину; R_4 - сила тиску пружинного поясочка циліндра круглов'язальної машини на голку; d_3 - кут між реакцією R_4 і нормаллю до поверхні голки в точці контакту з пружинним поясочком (кут тертя); R_1, R_2, R_3 - реакції стінок паза, що діють на голку і відхилені від нормалі до опор на кут тертя у бік, протилежний руху голки; z_1, z_2, z_3 - відповідні геометричні розміри; z_4, z_5, z_6 - геометричні розміри, які при підйомі голки при завершенні змінюються (для розрахунку вибираємо їх максимальне значення); a, b, c, d, f - постійні геометричні розміри.

Розглянемо конкретизацію системи рівнянь (1.13), використавши числові значення її параметрів з [5]: $d_1 = 9^\circ 4'$; $a = 5,2 \text{ м}$; $b = 3,8 \text{ м}$; $c = 1,4 \text{ м}$; $d = 0,4 \text{ м}$; $k = 4 \text{ м}$; $f = 1,6 \text{ м}$; $m = 0,7 \text{ м}$; $\alpha = 17^\circ$; $b_i = 49^\circ 4'$; $P_{от} = 14 \text{ сН}$; $G = 0,687 \text{ сН}$; $P_o = 0,14 \text{ сН}$; $z_1 = 11,5 \text{ м}$; $z_2 = 13 \text{ м}$; $z_3 = 29 \text{ м}$; $z_4(\text{max}) = 51,5 \text{ м}$; $z_5(\text{max}) = 80 \text{ м}$; $z_6(\text{max}) = 87 \text{ м}$.

Остаточно отримаємо

$$\left. \begin{aligned} -0,759\dot{O}_o - 0,987R_1 + 0R_2 + 0,987R_3 + 0R_4 &= 0, \\ 0\dot{O}_o - 0R_1 + 0,987R_2 + 0R_3 + -0,987R_4 &= 13,25, \\ 0,65\dot{O}_o - 0,163R_1 - 0,163R_2 - 0,163R_3 - 0,163R_4 &= 4,777, \\ -5,86\dot{O}_o + 0R_1 + 78,96R_2 + 0,65R_3 - 50,55R_4 &= 1157,9, \\ -6,83\dot{O}_o + 0R_1 + 0,247R_2 + 3,95R_3 + 0R_4 &= 0. \end{aligned} \right\} (1.14)$$

Задача звелася до розв'язання системи лінійних рівнянь (1.14). В результаті отримаємо корені системи: $T'_o = 48,259 \text{ сН}$; $R_1 = 44,774 \text{ сН}$; $R_2 = 24,951 \text{ сН}$; $R_3 = 81,885 \text{ сН}$; $R_4 = 11,527 \text{ сН}$.

Приклад 2. Силовий аналіз механізму зменшувача панчішного автомата.

На рис. 1.12 представлена розрахункова схема для статичного дослідження механізму зменшувача панчішного автомата [6].

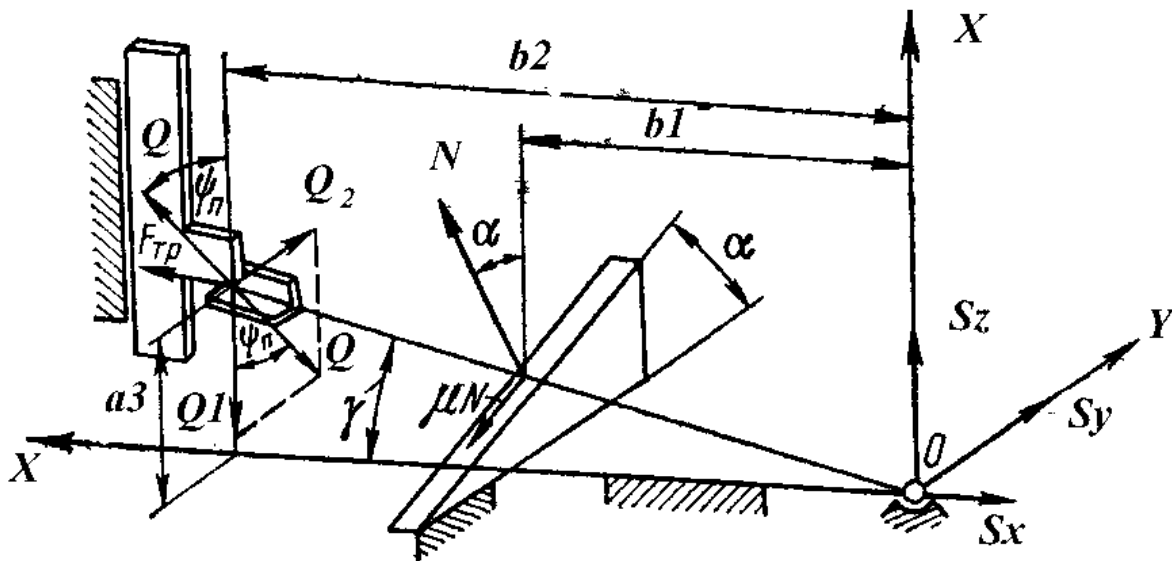


Рис. 1.12. Розрахункова схема механізму зменшувача

Система рівнянь рівноваги просторової системи сил, що діють на зменшувач, має вигляд:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n X_i &= 0, \quad -S_x + mN = 0, \\ \sum_{i=1}^n Y_i &= 0, \quad S_y - N \sin a - mN \sin a + Q_2 = 0, \\ \sum_{i=1}^n Z_i &= 0, \quad S_z + N \cos a - mN \sin a - Q_1 = 0, \\ \sum_{i=1}^n m_y(F_i) &= 0, \quad Nb_1 \cos a - mNb_1 \sin a - Q_1 b_2 - mNb_2 \operatorname{tg} g = 0, \\ \sum_{i=1}^n m_z(F_i) &= 0, \quad Nb_1 \sin a + mNb_1 \cos a - Q_2 b_2 = 0, \end{aligned} \right\} \quad (1.15)$$

де S_x, S_y, S_z - реакції в сферичному шарнірі зменшувача; N - нормальна реакція з боку направляючої планки; m - коефіцієнт тертя; a - кут нахилу направляючої планки механізму зменшувача до горизонталі; Q_1, Q_2 - реакції між п'ятою голки і зменшувачем; b_1, b_2 - постійні геометричні розміри; g - кут між зменшувачем і горизонтальною площиною в кінці підйому.

Конкретизуємо систему рівнянь (1.15). Для цього скористаємося наступними значеннями [5]: $a = 30^\circ$; $m = 0,2$; $b_2 = 2b_1$; $Q_1 = 100cH$; $g = 11,5^\circ$.

Остаточно отримаємо

$$\left. \begin{aligned} -1S_x + 0S_y + 0S_z + 0,2N + 0Q_2 &= 0, \\ 0S_x + 1S_y + 0S_z - 0,673N + 1Q_2 &= 0, \\ 0S_x + 0S_y + 1S_z + 0,766N + 0Q_2 &= 100, \\ 0S_x + 0S_y + 0S_z + 0,684N + 0Q_2 &= 200, \\ 0S_x + 0S_y + 0S_z + 0,673N - 2Q_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

Задача звелася до розв'язання системи лінійних рівнянь (1.16). В результаті отримаємо корені системи: $S_x = 58,48cH$; $S_y = 98,39cH$; $S_z = -123,98cH$; $N = 292,39cH$; $Q_2 = 98,39cH$.

Приклад 3. Визначення реакцій опор ткацького верстата, трикотажної машини. Розміщення і компоновка окремих механізмів і пристроїв трикотажних машин і ткацьких верстатів (навоїв, механізмів петлеутворення, відтяжки і накатки полотна та ін.) приводить до того, що центр мас даної механічної системи зміщений щодо центральних осей симетрії. Крім того, в процесі роботи маса окремих елементів змінюється (зменшується маса ниток навитих на навоїв, збільшується маса рулону навитого полотна або тканини), що приводить до зміни координат центру мас. Визначивши опорні реакції можна для кожної конкретної опори підібрати пружний елемент (наприклад, опорні пружини основов'язальної машини) необхідної жорсткості для забезпечення умови горизонтального розташування остову трикотажної машини або ткацького верстата.

На рис. 1.13 та 1.14 показані розрахункові схеми трикотажної машини ОВ-7 і ткацького верстата типу АТПР (умовно показаний тільки остов машини), які знаходяться в рівновазі під дією прикладеної системи просторових паралельних сил.

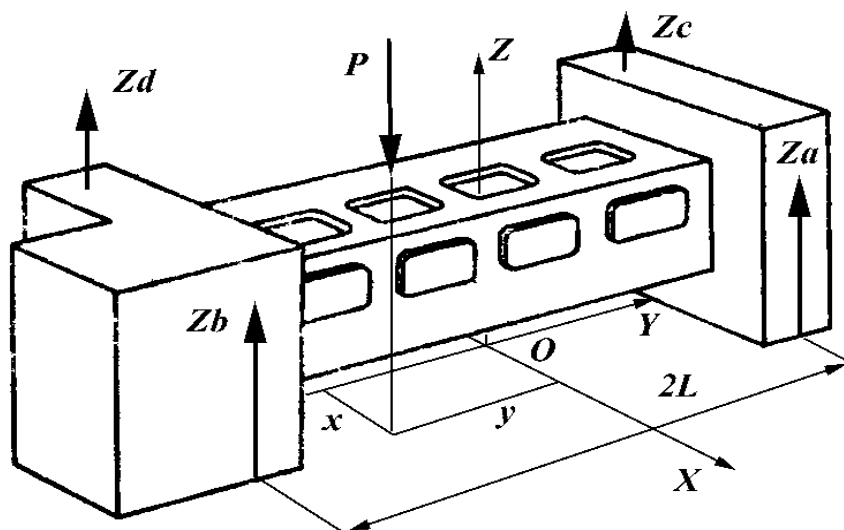


Рис. 1.13. Розрахункова схема для визначення реакцій опор основов'язальної машини ОВ-7

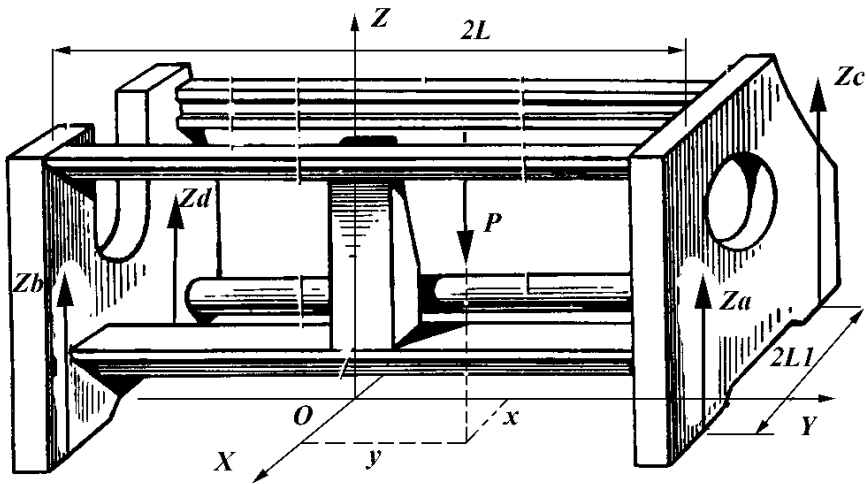


Рис. 1.14. Розрахункова схема для визначення реакцій опор ткацького верстата типу АТПР

Для таких систем можна скласти три рівняння рівноваги

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n X_i &= 0, \quad Z_A + Z_B + Z_C + Z_D - P = 0, \\ \sum_{i=1}^n m_x(\mathbf{F}_i) &= 0, \quad Z_A L + Z_C L - Z_B L - Z_D L - P y = 0, \\ \sum_{i=1}^n m_y(\mathbf{F}_i) &= 0, \quad -Z_A L_1 + Z_C L_1 - Z_B L_1 + Z_D L_1 + P x = 0, \end{aligned} \right\} \quad (1.17)$$

де Z_A, Z_B, Z_C, Z_D - відповідні реакції опор; P - вага трикотажно́ї машини або ткацького верстата; x, y - координати центру мас відносно центру перетину осей симетрії; $2L, 2L_1$ - відстані між вертикальними реакціями по довжині і ширині машини відповідно.

Таким чином, отримали систему трьох рівнянь з чотирма невідомими. Четверте рівняння отримаємо з урахуванням деформацій в точках контакту машини з опорами

$$\begin{aligned} Z_A &= \frac{P}{8L}(L + O_1) + \frac{P}{8L_1}(L_1 + O_2), \\ O_1 &= y + x \frac{\sqrt{2}}{2}, O_2 = x + y \frac{\sqrt{2}}{2}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

При розрахунках приймали (для верстата типу АТПР): $m = 1800 \text{ кг}$; $P = 17658 \text{ Н}$; $2L = 167 \text{ мм}$; $2L_1 = 110 \text{ мм}$; $x = 0 \dots -30 \text{ мм}$; $y = 0 \dots -40 \text{ мм}$. При спрощенні систем лінійних рівнянь (1.17) і (1.18) приймали $x = -15 \text{ мм}$; $y = -20 \text{ мм}$.

Після підстановки вказаних числових значень параметрів, отримаємо:

$$\left. \begin{aligned} 1Z_A + 1Z_B + 1Z_C + 1Z_D &= 17658, \\ 83,5Z_A - 83,5Z_B + 83,5Z_C - 83,5Z_D &= -353160, \\ -55Z_A - 55Z_B + 55Z_C + 55Z_D &= 264870, \\ 1Z_A + 0Z_B + 0Z_C + 0Z_D &= 2433,27. \end{aligned} \right\} \quad (1.19)$$

Задача звелася до розв'язання системи лінійних рівнянь (1.19). В результаті отримаємо корені системи: $Z_A = 2433,27 \text{ Н}$; $Z_B = 3987,82 \text{ Н}$; $Z_C = 4280,99 \text{ Н}$; $Z_D = 6955,91 \text{ Н}$.

РОЗДІЛ 2. НЕЛІНІЙНІ РІВНЯННЯ ТА СИСТЕМИ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ

2.1 Вступні положення

Важливу роль в історії математики, в розвитку її ідей і методів зіграли рівняння. Вони знаходять найширше розповсюдження при вирішенні теоретичних і прикладних завдань САПР устаткування і технологічних процесів легкої і текстильної промисловості. Великі труднощі виникають при розв'язанні алгебраїчних і трансцендентних рівнянь, у яких визначити явні вирази для коренів не представляється можливим. Крім того, в деяких випадках рівняння містить коефіцієнти, які відомі тільки приблизно, і, відповідно, сама задача про точне визначення коренів рівняння втрачає зміст. Тому важливого значення набувають способи наближеного знаходження коренів рівняння і оцінки степеня їх точності [2, 3, 4].

Розв'язання нелінійних рівнянь виду $f(x) = 0$ досить часто можна виконати у наступні два етапи. На першому етапі проводиться приблизне визначення кореня. Звичайно це можна здійснити графічним способом. На другому етапі проводиться уточнення значення кореня. При цьому часто стає у пригоді наступна відома теорема про існування кореня неперервної функції.

Теорема (Больцано — Коші). Якщо функція $f(x)$ визначена і неперервна на відрізку $[a, b]$, а на кінцях цього відрізка приймає значення різних знаків (так що $f(a)f(b) < 0$), то в інтервалі (a, b) існує принаймні один корінь рівняння $f(x) = 0$. Іншими словами, за вказаних умов знайдеться точка c , $a < c < b$, така, що виконується рівність $f(c) = 0$.

2.2 Розв'язання нелінійних рівнянь

2.2.1 Відділення коренів

З геометричної точки зору дійсний корінь рівняння

$$f(x) = 0 \tag{2.1}$$

є абсцисою точки перетину графіка функції $y = f(x)$ з віссю Ox . Це зауваження використовується для графічного відділення коренів рівняння (2.1) у випадках, коли дане рівняння не має близьких між собою коренів, а графік функції $y = f(x)$ побудований досить точно.

На практиці часто буває зручно рівняння (2.1) замінити рівносильним йому рівнянням

$$j(x) = y(x) \quad (2.2)$$

де функції $j(x)$ та $y(x)$ — більш прості, ніж функція $f(x)$. Тоді, побудувавши графіки функцій $y = j(x)$ та $y = y(x)$, шукані корені наближено отримаємо як абсциси точок перетину цих графіків.

Приклад 1. Графічно відділити корені рівняння

$$f(x) = -x^2 + \cos(x) + 1 = 0 \quad (2.3)$$

Розв'язання

Запишемо рівняння (2.3) у вигляді рівності

$$\cos(x) = x^2 - 1$$

Звідси ясно, що корені рівняння (2.3) можуть бути знайдені як абсциси точок перетину періодичної кривої $y = \cos(x)$ та параболи $y = x^2 - 1$. Побудувавши ці криві (рис. 2.1), відділимо, наприклад, додатній корінь $x \in [1; 1.5]$ рівняння (2.3).

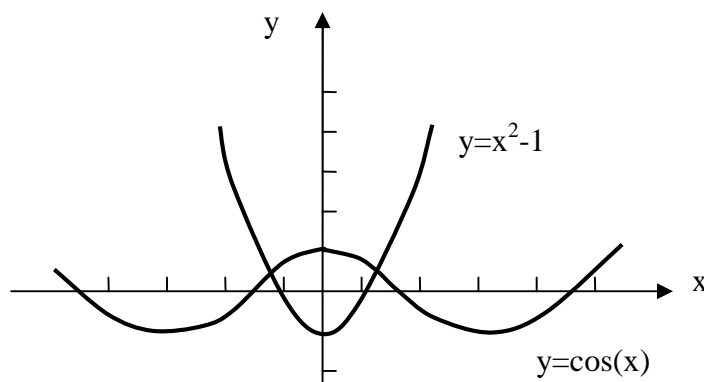


Рис. 2.1. Графічне відділення коренів рівняння $f(x) = -x^2 + \cos(x) + 1 = 0$.

Програму для графічного відділення коренів трансцендентних рівнянь розроблено в середовищі DELPHI. Зауважимо, що програмним чином

відбувається побудова графіка функції $f(x)$, тобто без заміни рівняння $f(x) = 0$ на еквівалентне рівняння $j(x) = y(x)$.

Інтерфейс програми наведено на рис. 2.2.

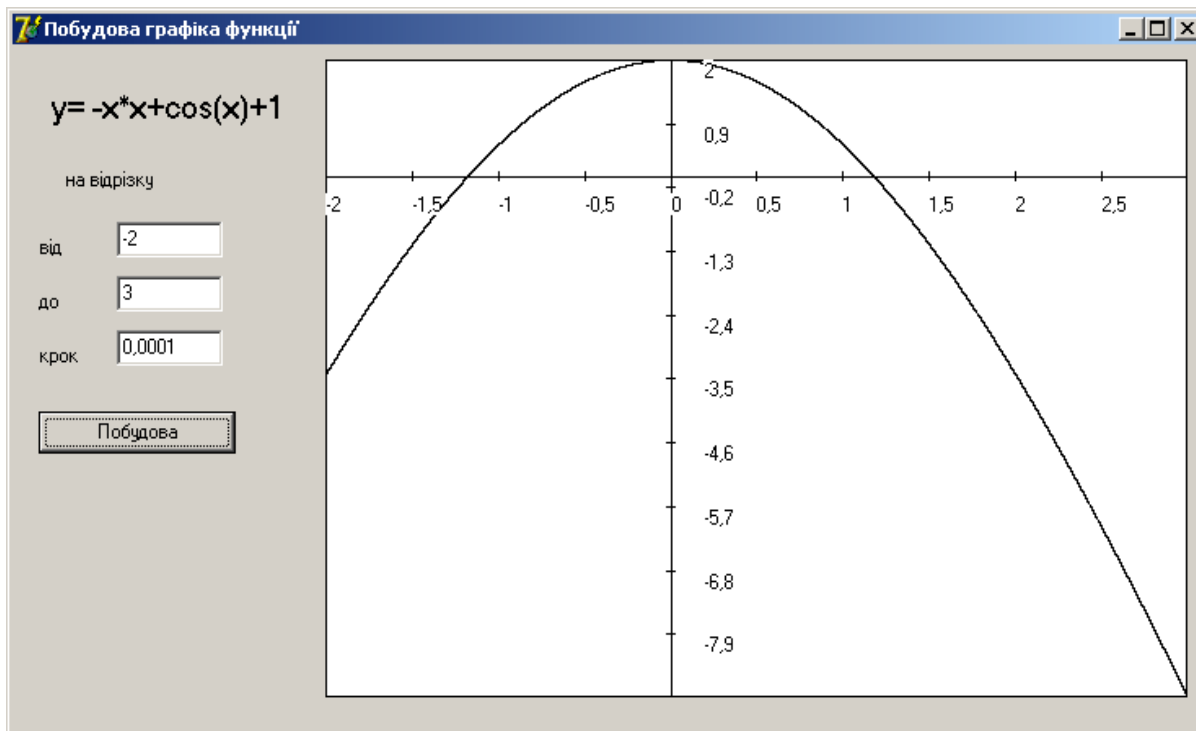


Рис. 2.2. Інтерфейс програми для графічного відділення коренів трансцендентних рівнянь.

2.2.2 Уточнення коренів

2.2.2.1 Метод половинного поділу

Розглянемо методу ділення відрізка навпіл (метод дихотомії). Суть методу полягає в побудові ітераційної послідовності вкладених один в одного відрізків, кінці яких представляють собою монотонні послідовності $\{a_n\}$, $\{b_n\}$, причому $a_n \leq x$, $b_n \geq x$, $n = 1, 2, \dots$, де x - корінь трансцендентного рівняння (2.1) на відріжку $[a, b]$.

Збіжність даного методу повільна. Проте при будь-якій величині відрізка збіжність гарантована.

Вважатимемо, що $f(a)f(b) < 0$ і $f(a) < 0$, $f(b) > 0$. Тоді знайдемо середину відрізка $[a, b]$ - точку $x_1 = \frac{a+b}{2}$. Обчислюємо в даній точці

значення функції $f(x)$. Припустимо, що $f(x_1) = 0$. В цьому випадку процес визначення кореня трансцендентного рівняння закінчується. Якщо $f(x_1) \neq 0$, то розглядаємо два відрізки $[a, x_1]$ та $[x_1, b]$. Вибираємо той з них, де виконується умова $f(a)f(x_1) < 0$ або $f(x_1)f(b) < 0$. Вибраний відрізок знову ділимо навпіл приймаючи $a_1 = a$, $b_1 = x_1$ або $a_1 = x_1$, $b_1 = b$, і тоді $x_2 = \frac{a_1 + b_1}{2}$.

Необмежене продовження процесу ділення дозволяє отримати ітераційну послідовність вкладених один в одного відрізків, причому $a_n \leq a_{n+1} < b_{n+1} \leq b_n$. Ліві кінці відрізків утворюють монотонну послідовність, яка в границі представлятиме деяку величину z_1 :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = z_1,$$

а праві кінці відрізків утворюють монотонну послідовність, яка в границі представлятиме деяку величину z_2 :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = z_2.$$

Очевидно, що

$$\begin{aligned} a_n &\leq z_1 \leq z_2 \leq b_n, \\ z_2 - z_1 &\leq b_n - a_n = \frac{b-a}{2^n}. \end{aligned} \tag{2.4}$$

З останнього рівняння системи (2.4) отримуємо $z_2 - z_1 = 0$, тобто дана різниця менше будь-якого наперед заданого додатного числа. Звідки матимемо $z_2 = z_1 = x$. Отже

$$f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(a_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(b_n).$$

З урахуванням (2.4):

$$a_n \leq x \leq b_n.$$

Аналіз останньої нерівності показує, що величина a_n визначає шуканий корінь з недостатчею, а величина b_n - з надлишком. Помилка при цьому не перевищує довжину відрізка $b_n - a_n$ і прямує до нуля при збільшенні n за законом геометричної прогресії із знаменником $1/2$.

Приклад. Методом половинного ділення уточнити корінь рівняння

$$f(x) = -x^2 + \cos(x) + 1 = 0,$$

що знаходиться на відрізку $[1; 1.5]$ з точністю $\epsilon = 0.0001$.

Розв'язання

$$f(1) = -1^2 + \cos(1) + 1 = 0.54030;$$

$$f(1.5) = -(1.5)^2 + \cos(1.5) + 1 = -1.17926.$$

На кінцях відрізка $[1; 1.5]$ функція $f(x)$ має різні знаки, отже можемо застосовувати алгоритм методу половинного поділу.

Перевірка моменту зупинки: $|1.5 - 1| = 0.5 > 0.0001 = \epsilon$.

Послідовно маємо:

$$c = \frac{1 + 1.5}{2} = 1.25;$$

$$f(1.25) = -(1.25)^2 + \cos(1.25) + 1 = -0.24717.$$

Для подальшого пошуку обираємо ту частину відрізка $[1; 1.25]$ або $[1.25; 1.5]$, на кінцях якої функція $f(x)$ має різні знаки. Це буде відрізок $[1; 1.25]$.

Перевірка моменту зупинки: $|1.25 - 1| = 0.25 > 0.0001 = \epsilon$.

$$c = \frac{1 + 1.25}{2} = 1.125;$$

$$f(1.125) = -(1.125)^2 + \cos(1.125) + 1 = 0.16555.$$

Очевидно, що наступний для пошуку відрізок – це $[1.125; 1.25]$.

Перевірка моменту зупинки: $|1.25 - 1.125| = 0.125 > 0.0001 = \epsilon$, і т.д..

Продовжуючи відповідним чином, на певному кроці отримаємо відрізок $[1.17645; 1.17651]$, для якого $|1.17651 - 1.17645| = 0.00006 < 0.0001 = \epsilon$, тобто виконується умова зупинки алгоритму. Таким чином, можна прийняти

$$x = \frac{1}{2}(1.17645 + 1.17651) = 1.17648.$$

Допоміжні процедури, необхідні для реалізації методів уточнення коренів трансцендентних рівнянь, наведено у додатку 6. Процедуру, що реалізує уточнення кореня за методом половинного поділу мовою Object Pascal

наведено у додатку 7. Програму з використанням наведеної процедури розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 2.3.

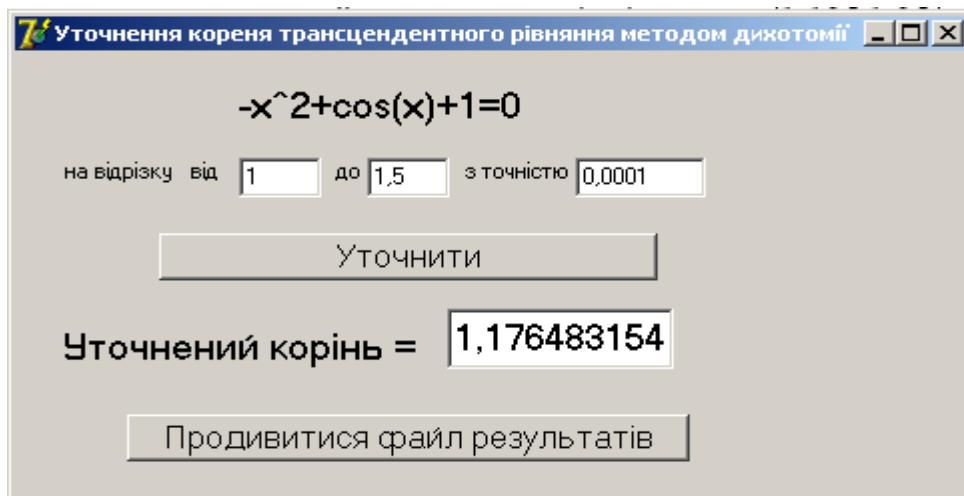


Рис.2.3. Інтерфейс програми для уточнення коренів трансцендентного рівняння методом половинного поділу

Результати роботи програми виводяться в файл, який наведено на рис. 2.4.

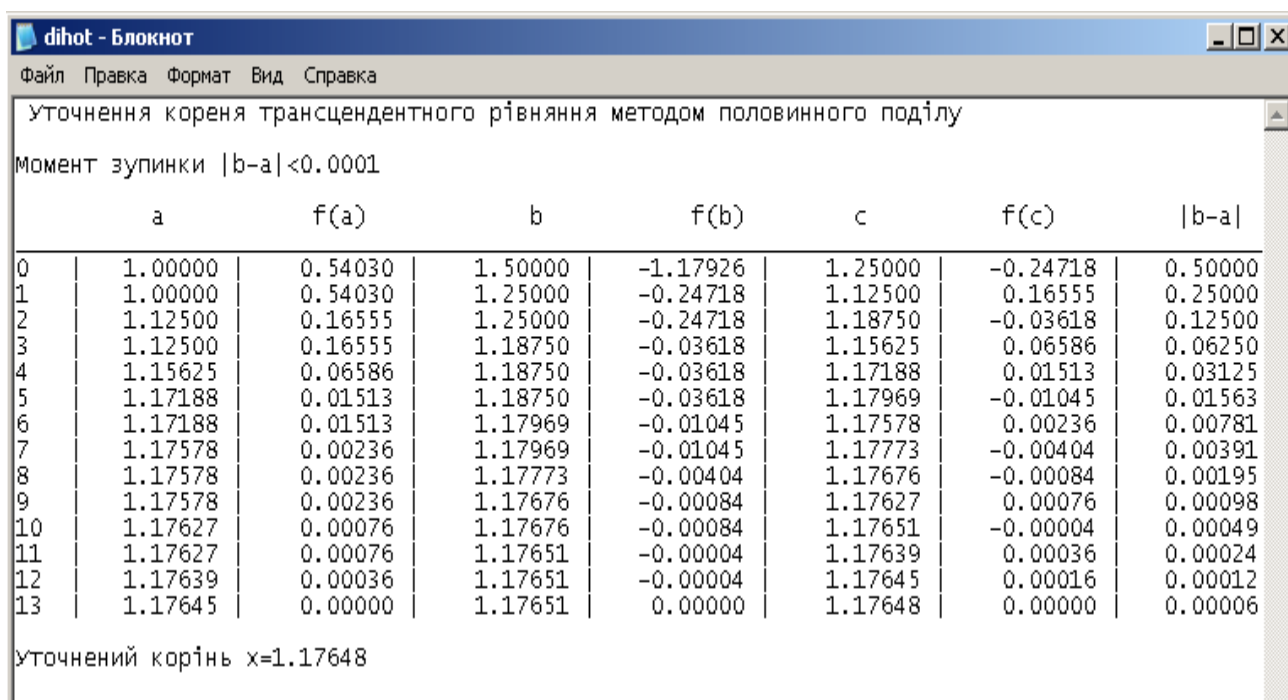


Рис. 2.4. Файл результатів роботи програми – уточнення коренів трансцендентного рівняння методом половинного поділу.

2.2.2.2 Метод Ньютона (метод дотичних)

Визначимо корені трансцендентного рівняння (2.1) з використанням методу Ньютона (або метод дотичних). На рис.2.5 показана графічна схема, що реалізує метод Ньютона.

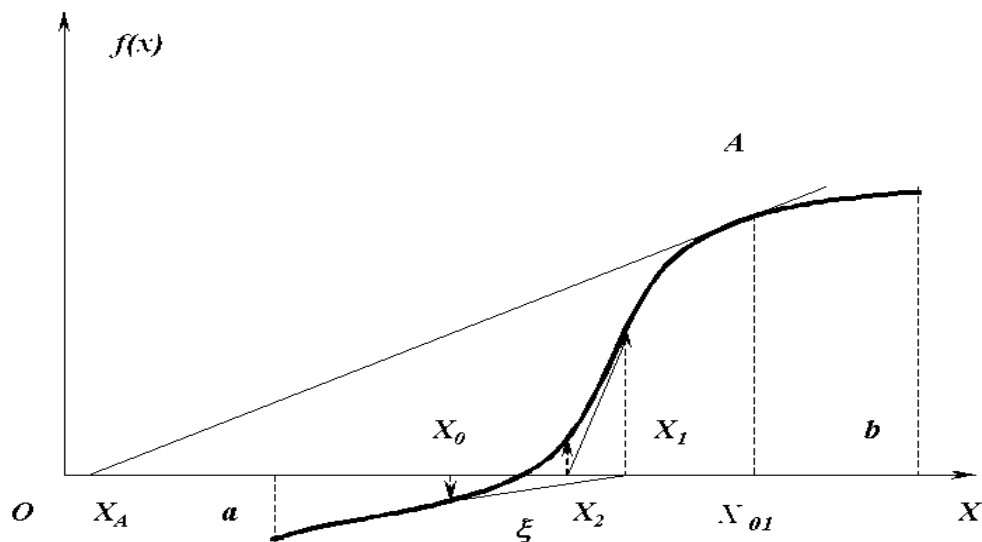


Рис. 2.5. Геометрична інтерпретація методом Ньютона розв'язання трансцендентного рівняння

За допомогою графічного методу визначаємо початкове наближення кореня трансцендентного рівняння $f(x) = 0$. Рівняння дотичної до графіка функції $f(x)$ в точці x_0 має вигляд

$$f_k = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0), \quad (2.5)$$

де $f'(x_0)$ - значення похідної функції $f(x)$ в точці x_0 .

При $x = x_1$, $f_k = 0$. Тоді з (2.5) отримаємо

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Продовжуючи процес побудови ітераційної послідовності $\{x_n\}$, отримаємо наступну рекурентну формулу для здійснення ітераційного процесу наближення до кореня трансцендентного рівняння

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.6)$$

Метод Ньютона, що реалізується за допомогою (2.6), відрізняється високою швидкістю збіжності, проте він дуже чутливий до вибору початкового наближення x_0 . На рис. 2.5 показано, що вибір в якості початкового наближення x_{01} (точка А на $f(x)$), яка розташовується далі від шуканого кореня x , чим x_0) призводить вже на першому кроці до «випадання» точки x_A з меж відрізка $[a, b]$. Це обриває процес побудови ітераційної послідовності $\{x_n\}$. Даний метод забезпечує швидку (квадратичну) збіжність якщо

$$f(x_0)f''(x_0) > 0, \quad (2.7)$$

тобто в якості x_0 вибирають те значення з $[a, b]$, де знаки $f(x_0)$ і $f''(x_0)$ співпадають.

Якщо $|f'(x)| \geq m > 0$, $|f''(x)| \leq M$, $x \in [a, b]$ (m - найменше значення похідної $f'(x)$ в $[a, b]$; M - найбільше значення похідної в $[a, b]$), то знайдеться таке d : $0 < d \leq \min(x - a, b - x)$, що при будь-якому виборі початкового наближення на відріжку $[x - d, x + d] \in [a, b]$ існує нескінченна ітераційна послідовність (2.6) і ця послідовність збігається до кореня трансцендентного рівняння $f(x) = 0$.

Для оцінки погрішності n -го наближення x_n можна використовувати формулу

$$|x - x_n| \leq \frac{|f(x_n)|}{m_1} \quad (2.8)$$

де m_1 - найменше значення модуля першої похідної $|f'(x)|$ на відріжку $[a, b]$.

Приклад. Методом дотичних уточнити корінь рівняння

$$f(x) = -x^2 + \cos(x) + 1 = 0,$$

що знаходиться на відріжку $[1; 1.5]$ з точністю $\epsilon = 0.0001$.

Розв'язання

$$f(1) = -1^2 + \cos(1) + 1 = 0.54030;$$

$$f(1.5) = -(1.5)^2 + \cos(1.5) + 1 = -1.17926.$$

На кінцях відрізка $[1;1.5]$ функція $f(x)$ має різні знаки.

Знайдемо першу та другу похідні функції $f(x)$:

$$f'(x) = -2x - \sin(x).$$

$$f''(x) = -2 - \cos(x).$$

$$f''(1) = -2 - \cos(1) = -2.54;$$

$$f''(1.5) = -2 - \cos(1.5) = -2.07.$$

Максимальне за абсолютною величиною значення другої похідної знайдемо за допомогою програмної процедури `max_f__`, наведеної у додатку 6. Отримаємо, що $M_2 = 2.54030$. Зупинка ітераційного процесу буде визначатися виконанням

умови: $\frac{M_2}{2m_1}(x_{n+1} - x_n)^2 < e = 0.0001$, або $|x_{n+1} - x_n| < d = \sqrt{\frac{2e \cdot m_1}{M_2}} = 0.01496$.

Друга похідна від'ємна на відрізку, і тому умова співпадання знаку функції $f(x)$ зі знаком її другої похідної $f''(x)$ виконується для точки $x = 1.5$. Ця точка буде початковим наближенням кореня. Використовуючи формулу (2.6), послідовно будемо мати:

$$x_0 = 1.5;$$

$$x_1 = 1.5 - \frac{f(1.5)}{f'(1.5)} = 1.5 - \frac{-1.17926}{-3.99749} = 1.20500;$$

$|x_1 - x_0| = |1.20500 - 1.5| = 0.29500 > d = 0.01496$, умова зупинки не виконана, тому продовжуємо процес.

$$x_2 = 1.20500 - \frac{f(1.20500)}{f'(1.20500)} = 1.20500 - \frac{-0.09433}{-3.34383} = 1.17679;$$

$|x_2 - x_1| = |1.17679 - 1.20500| = 0.02821 > d = 0.01496$, умова зупинки не виконана, тому продовжуємо процес.

$$x_3 = 1.17679 - \frac{f(1.17679)}{f'(1.17679)} = 1.17679 - \frac{-0.00094}{-3.27696} = 1.17650;$$

$|x_3 - x_2| = |1.17650 - 1.17679| = 0.00029 < d = 0.01496$, умова зупинки виконана, а отже $x_3 = 1.17650$ є уточненим коренем рівняння.

Процедуру, що реалізує уточнення кореня за методом дотичних мовою Object Pascal, наведено у додатку 7. Програму з використанням наведеної процедури розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 2.6.

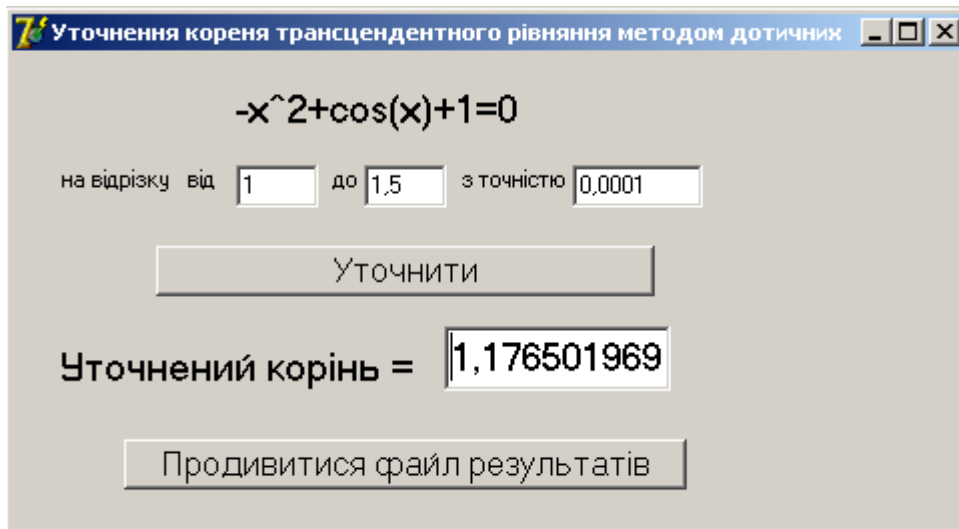


Рис.2.6. Інтерфейс програми для уточнення кореня за методом дотичних

Результати роботи програми виводяться в файл, який наведено на рис. 2.7.

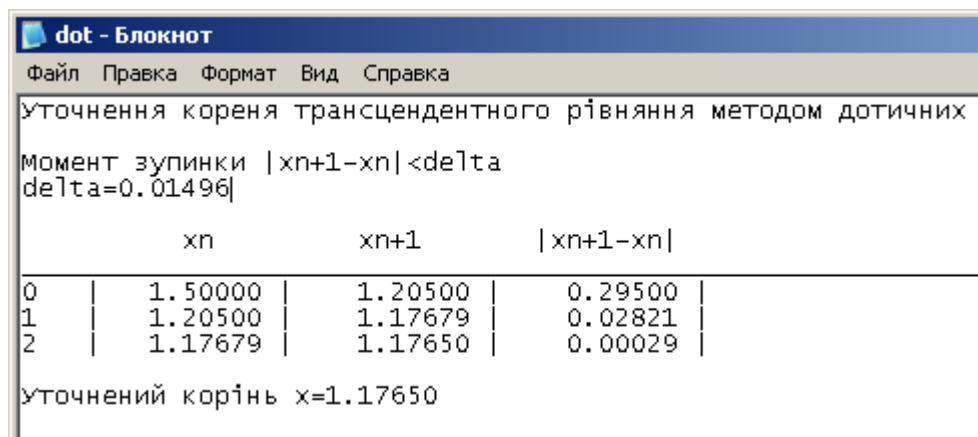


Рис. 2.7. Файл результатів роботи програми – уточнення кореня за методом дотичних

2.2.2.3 Метод ітерацій

Одним з найбільш важливих способів чисельного розв'язання трансцендентних рівнянь є метод ітерацій (інакше - метод послідовних наближень або метод простих ітерацій)

Трансцендентне рівняння (2.1)

$$f(x) = 0$$

представимо до вигляду

$$x = f_1(x) \tag{2.9}$$

де $f_1(x) = f(x) + x$.

Скориставшись графічним способом, визначимо наближене значення кореня x_0 з області визначення функції $f_1(x)$ і підставимо його в праву частину рівняння (2.9). Будемо будувати послідовність $\{x_n\}$ чисел, визначених за допомогою ітераційної формули

$$x_{n+1} = f_1(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Послідовність чисел $\{x_n\}$ носить назву ітераційної послідовності. Якщо існує $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$, то переходячи в рівності (2.9) до границі і вважаючи функцію $f_1(x)$ неперервною, матимемо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_{n+1} = f_1\left(\lim_{n \rightarrow \infty} x_n\right) \text{ або } x = f_1(x).$$

З останньої рівності виходить, що x буде коренем трансцендентного рівняння (2.9), а отже, і (2.1). Ітераційний процес продовжується до тих пір, поки виконується умова

$$|x_{n+1} - x_n| \geq \epsilon, \tag{2.10}$$

де ϵ - задана похибка обчислення кореня x .

Перед доведенням теореми про збіжність ітераційної послідовності зупинимося на умові Ліпшиця, яка полягає в наступному. Функція $f(x)$ задовольняє умові Ліпшиця, якщо існує така постійна $q < 1$, що для будь-яких x_1, x_2 , що належать відрізка $[a, b]$, виконується нерівність

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq q|x_1 - x_2|.$$

Якщо функція з (2.1) задовольняє умові (2.10), то вона є неперервною на відрізка $[a, b]$. Надамо аргументу x приріст Δx . Для початкового наближення визначимо приріст функції

$$\Delta f = f(x_o + \Delta x) - f(x_o),$$

звідки, з використанням умови Ліпшиця, отримаємо підтвердження безперервності функції $f(x)$ на відрізку $[a, b]$.

$$|\Delta f| \leq a |\Delta x|,$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \Delta f = 0.$$

Теорема про збіжність ітераційної послідовності може бути сформульована таким чином. Допустимо, що функція $f_1(x)$ визначена і диференційована на відрізку $[a, b]$, причому всі її значення $f_1(x)$ належать $[a, b]$. Тоді з використанням умови Ліпшиця $\left| \frac{df_1(x)}{dx} \right| \leq q < 1$ (при $a < x < b$) отримаємо, що процес ітерації $x_{n+1} = f_1(x_n)$ збігається незалежно від початкового значення $x_o \in [a, b]$ і граничне значення $x = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n$ є єдиним коренем рівняння $x = f_1(x)$ на відрізку $[a, b]$.

Доведемо це твердження. Візьмемо початкове наближення розв'язку трансцендентного рівняння (2.1) x_o на відрізку $[x - d, x + d]$, яке віддалене від точки x на відстань не більше ніж d ($|x - x_o| \leq d$). Виконаємо ітераційний процес з використанням умови Ліпшиця і з урахуванням (2.9)

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= f_1(x_o), \quad x_1 - x = f_1(x_o) - f_1(x), \\ |x_1 - x| &= |f_1(x_o) - f_1(x)| \leq q|x_o - x| \leq qd, \\ |x_2 - x| &= |f_1(x_2) - f_1(x)| \leq q|x_1 - x| \leq q^2|x_o - x| \leq q^2d, \\ &\dots\dots\dots \\ |x_n - x| &\leq q^n|x_o - x| \leq q^n d. \end{aligned} \right\} \quad (2.11)$$

З (2.11) випливає, що

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (x_n - x) = 0 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x.$$

Теорема залишається правильною, якщо функція $f_1(x)$ визначена і диференційована на інтервалі $]-\infty, +\infty[$. Для оцінки наближення скористаємося нерівністю

$$|x - x_{n+1}| \leq \frac{q}{1-q} |x_{n+1} - x_n|.$$

Якщо $q < \frac{1}{2}$ то приходимо до (2.10). Остаточно

$$x = x_{n+1} \pm e.$$

Процедуру, що реалізує уточнення кореня за методом ітерацій мовою Object Pascal, наведено у додатку 8. Програму з використанням наведеної процедури розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 2.8.

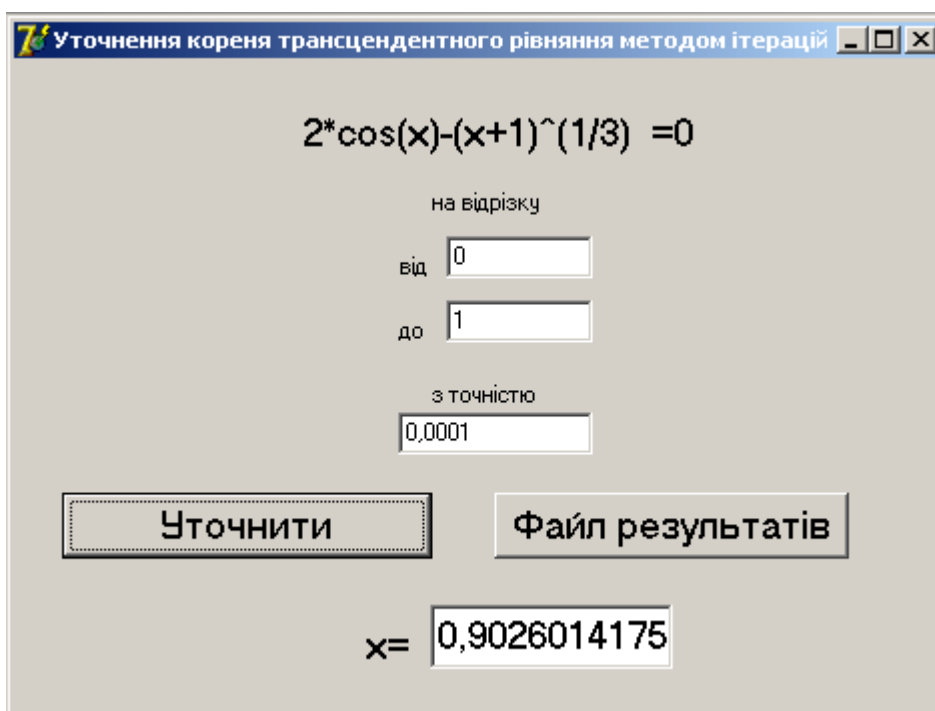


Рис.2.8. Інтерфейс програми для уточнення кореня трансцендентного рівняння за методом ітерацій

Результати роботи програми виводяться в файл, який наведено на рис. 2.9.


```

Iter - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
Уточнення кореня трансцендентного рівняння методом ітерацій
коефіцієнт стиску q= 0.19245
Зупинка обчислень за abs(xn1-xn)<delta= 0.00042
№   |   xn   |   xn1   | abs(xn1-xn)
----|-----|-----|-----
0   | 0.00000 | 1.04720 | 1.04720
1   | 1.04720 | 0.88295 | 0.16425
2   | 0.88295 | 0.90533 | 0.02239
3   | 0.90533 | 0.90223 | 0.00310
4   | 0.90223 | 0.90266 | 0.00043
5   | 0.90266 | 0.90260 | 0.00006
Розв'язок рівняння x= 0.90260
  
```

Рис. 2.9. Файл результатів роботи програми – уточнення кореня трансцендентного рівняння за методом ітерацій

2.3 Розв’язання систем трансцендентних рівнянь

2.3.1 Метод Ньютона

Розглянемо нелінійну систему рівнянь

$$\left. \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{array} \right\} \quad (2.12)$$

з дійсними лівими частинами.

Запишемо коротше систему (2.12). Сукупність аргументів x_1, x_2, \dots, x_n

можна розглядати як n -вимірний вектор-стовпчик x . Аналогічно сукупність функцій f_1, f_2, \dots, f_n являє собою також n -вимірний вектор-стовпчик (вектор-функцію) f .

Тому система (2.12) коротко записується так:

$$f(x) = 0 \quad (2.12')$$

Для розв’язання системи (2.12') будемо користуватися наступним методом послідовних наближень.

Припустимо, що знайдено k -те наближення

$$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$$

одного з ізольованих коренів $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ векторного рівняння (2.12'). Тоді точний корінь рівняння (2.12') можна представити у вигляді

$$x = x^{(k)} + e^{(k)} \quad (2.13)$$

де $e^{(k)} = (e_1^{(k)}, e_2^{(k)}, \dots, e_n^{(k)})$ - поправка (похибка) кореня.

Підставляючи вираз (2.13) в рівняння (2.12'), будемо мати:

$$f(x^{(k)} + e^{(k)}) = 0.$$

Припускаючи, що функція $f(x)$ неперервно диференційована в деякій області, що містить x та $x^{(k)}$, розкладемо ліву частину останнього рівняння за ступенями малого вектора $e^{(k)}$, обмежуючись лінійними членами:

$$f(x^{(k)} + e^{(k)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})e^{(k)} = 0 \quad (2.14)$$

або в розгорнутому вигляді:

$$\left. \begin{aligned} & f_1(x_1^{(k)} + e_1^{(k)}, x_2^{(k)} + e_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)} + e_n^{(k)}) = \\ & = f_1(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)}) + f'_{1x_1}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_1^{(k)} + \\ & \quad + f'_{1x_2}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_2^{(k)} + \dots + \\ & \quad + f'_{1x_n}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_n^{(k)} = 0 \\ & f_2(x_1^{(k)} + e_1^{(k)}, x_2^{(k)} + e_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)} + e_n^{(k)}) = \\ & = f_2(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)}) + f'_{2x_1}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_1^{(k)} + \\ & \quad + f'_{2x_2}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_2^{(k)} + \dots + \\ & \quad + f'_{2x_n}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_n^{(k)} = 0 \\ & \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \\ & f_n(x_1^{(k)} + e_1^{(k)}, x_2^{(k)} + e_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)} + e_n^{(k)}) = \\ & = f_n(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)}) + f'_{nx_1}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_1^{(k)} + \\ & \quad + f'_{nx_2}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_2^{(k)} + \dots + \\ & \quad + f'_{nxi}(x_1^{(k)}, x_1^{(k)}, \dots, x_1^{(k)})e_n^{(k)} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.14')$$

З рівностей (2.14) та (2.14') випливає, що коли позначити $W(x)$ матрицю Якобі похідних системи функцій f_1, f_2, \dots, f_n відносно змінних x_1, x_2, \dots, x_n , тобто

$$f'(x) = W(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix},$$

або коротко:

$$f'(x) = W(x) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right], \quad i, j = 1, 2, \dots, n,$$

то система (2.14') являтиме собою лінійну систему відносно поправок $e_i^{(k)}$ $i=1, 2, \dots, n$ з матрицею $W(x)$, і тому формула (2.14) може бути записана у вигляді:

$$f(x^{(k)}) + W(x^{(k)})e^{(k)} = 0.$$

Звідси, припускаючи, що матриця $W(x^{(k)})$ - неособлива, отримаємо:

$$e^{(k)} = -W^{-1}(x^{(k)})f(x^{(k)}).$$

Отже,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - W^{-1}(x^{(k)})f(x^{(k)}) \quad p = 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

(2.15) – метод Ньютона.

За нульове наближення $x^{(0)}$ можна взяти грубе значення шуканого кореня.

2.3.2 Метод Ньютона для системи двох рівнянь

Нехай x_n, y_n - наближені корені системи рівнянь

$$\left. \begin{aligned} F(x, y) &= 0 \\ G(x, y) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

де F і G - неперервно диференційовані функції. Покладаючи

$$x = x_n + h_n; \quad y = y_n + k_n,$$

отримаємо:

$$\left. \begin{aligned} F(x_n + h_n, y_n + k_n) &= 0 \\ G(x_n + h_n, y_n + k_n) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

Звідси, застосовуючи формулу Тейлора і обмежуючись лінійними членами відносно h_n та k_n , будемо мати:

$$\begin{cases} F(x_n, y_n) + h_n F'_x(x_n, y_n) + k_n F'_y(x_n, y_n) = 0 \\ G(x_n, y_n) + h_n G'_x(x_n, y_n) + k_n G'_y(x_n, y_n) = 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

Якщо якобіан

$$J(x_n, y_n) = \begin{vmatrix} F'_x(x_n, y_n) & F'_y(x_n, y_n) \\ G'_x(x_n, y_n) & G'_y(x_n, y_n) \end{vmatrix} \neq 0,$$

то з системи (2.18) знаходимо:

$$h_n = -\frac{1}{J(x_n, y_n)} \begin{vmatrix} F(x_n, y_n) & F'_y(x_n, y_n) \\ G(x_n, y_n) & G'_y(x_n, y_n) \end{vmatrix}, \quad (2.19)$$

$$k_n = -\frac{1}{J(x_n, y_n)} \begin{vmatrix} F'_x(x_n, y_n) & F(x_n, y_n) \\ G'_x(x_n, y_n) & G(x_n, y_n) \end{vmatrix}. \quad (2.20)$$

Отже, можна покласти:

$$x = x_n - \frac{1}{J(x_n, y_n)} \begin{vmatrix} F(x_n, y_n) & F'_y(x_n, y_n) \\ G(x_n, y_n) & G'_y(x_n, y_n) \end{vmatrix} \quad (2.21)$$

$$y = y_n - \frac{1}{J(x_n, y_n)} \begin{vmatrix} F'_x(x_n, y_n) & F(x_n, y_n) \\ G'_x(x_n, y_n) & G(x_n, y_n) \end{vmatrix} \quad (2.21')$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots).$$

Умовою зупинки ітераційного процесу буде наступна:

$$d = \max(|h_n|, |k_n|) < \epsilon,$$

де ϵ - задана точність розв'язання задачі.

Вихідні значення коренів визначаються грубо наближено.

Приклад. Методом Ньютона уточнити розв'язок системи рівнянь

$$\begin{cases} y \cos(x) - x = 0 \\ y^4 - x^2 - 3 = 0 \end{cases}$$

з точністю $\epsilon = 0.0001$, взявши у якості початкового наближення значення $(1; 1)$.

Розв'язання

Підставимо задані наближення $x_0 = 1$ та $y_0 = 1$ в систему:

$$\begin{cases} F(1;1) = 1 \cdot \cos(1) - 1 = -0.45970 \\ G(1;1) = 1^4 - 1^2 - 3 = -3 \end{cases}.$$

Обчислюємо якобіан

$$J(x, y) = \begin{vmatrix} -y \sin(x) - 1 & \cos(x) \\ -2x & 4y^3 \end{vmatrix};$$

звідси

$$J(1,1) = \begin{vmatrix} -1.84147 & 0.54030 \\ -2 & 4 \end{vmatrix} = -6.28528.$$

За формулами (2.19) та (2.20) знаходимо h_0 та k_0 :

$$h_0 = -\frac{1}{-6.28528} \begin{vmatrix} -0.45970 & 0.54030 \\ -3 & 4 \end{vmatrix} = -0.03467;$$

$$k_0 = -\frac{1}{-6.28528} \begin{vmatrix} -1.84147 & -0.45970 \\ -2 & -3 \end{vmatrix} = 0.73267.$$

Далі за (2.21) та (2.21') знаходимо x_1 та y_1 :

$$x_1 = x_0 + h_0 = 1 - 0.03467 = 0.96533;$$

$$y_1 = x_0 + k_0 = 1 + 0.73267 = 1.73267.$$

Умову зупинки алгоритму не виконано, так як

$$d = \max(|-0.03467|, |0.73267|) = 0.73267 > e = 0.0001, \quad \text{тому продовжуємо}$$

розрахунки далі. Послідовно отримаємо:

$$x_2 = 0.91551; \quad y_2 = 1.48385; \quad d = 0.24882 > e;$$

$$x_3 = 0.88760; \quad y_3 = 1.40267; \quad d = 0.08118 > e;$$

$$x_4 = 0.88413; \quad y_4 = 1.39458; \quad d = 0.00809 > e;$$

$$x_5 = 0.88410; \quad y_5 = 1.39450; \quad d = 0.00008 < e. \quad \text{Умову зупинки виконано, тому}$$

$x = 0.88410, \quad y = 1.39450$ є уточнені із заданою точністю корені системи.

Процедуру, що реалізує уточнення коренів системи двох нелінійних рівнянь за методом Ньютона мовою Object Pascal, наведено у додатку 9. Програму з використанням наведеної процедури розроблено в середовищі DELPHI. Інтерфейс програми наведено на рис. 2.10.

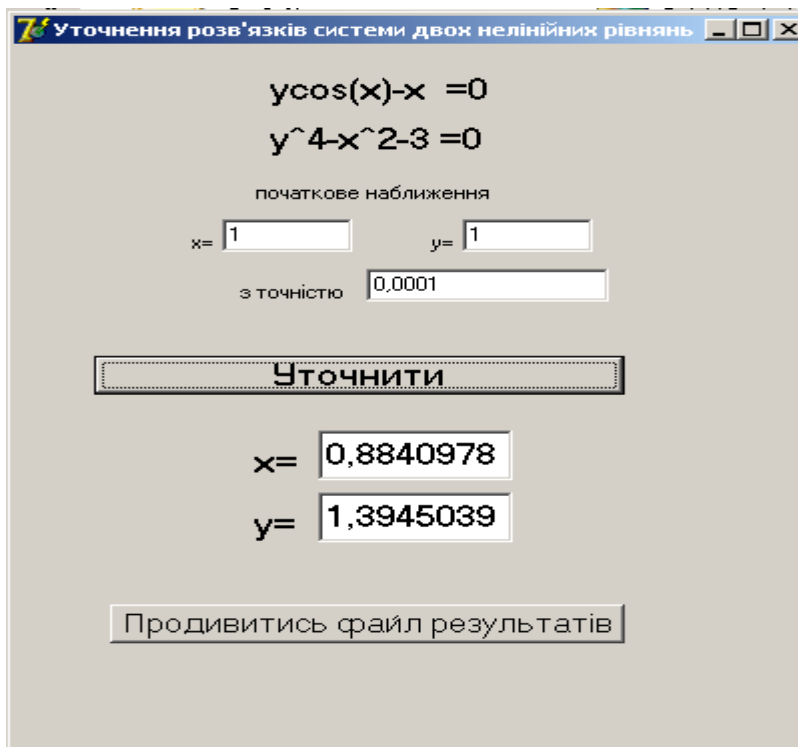


Рис. 2.10. Інтерфейс програми для уточнення коренів системи двох нелінійних рівнянь за методом Ньютона

Результати роботи програми виводяться в файл, який наведено на рис. 2.11.

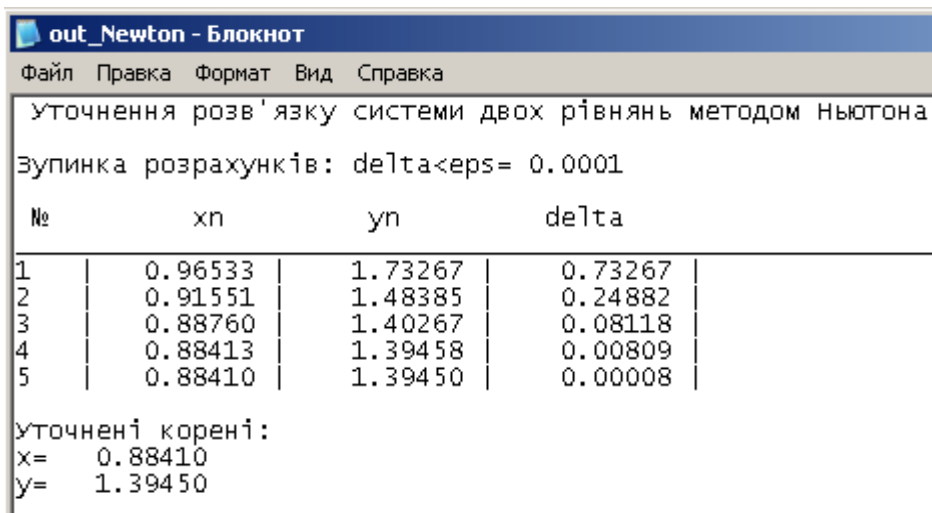


Рис. 2.11. Файл результатів роботи програми – уточнення коренів системи двох нелінійних рівнянь за методом Ньютона

2.4 Деякі математичні моделі технічної механіки, що реалізуються з використанням чисельних методів

Приклад 1. Визначення кута атаки роликового рівняльника. У дослідженні доц. Князева В.І., проф. Піськорського Г.А. [7] за визначенням роботи і зусилля зрушення, що розвивається роликовим рівняльником (рис. 2.12), отримано рівняння для визначення кута атаки полотна роликами

$$\operatorname{tg}^3 a_1 + 2\operatorname{tg} a_1 - \frac{f}{m} = 0, \quad (2.22)$$

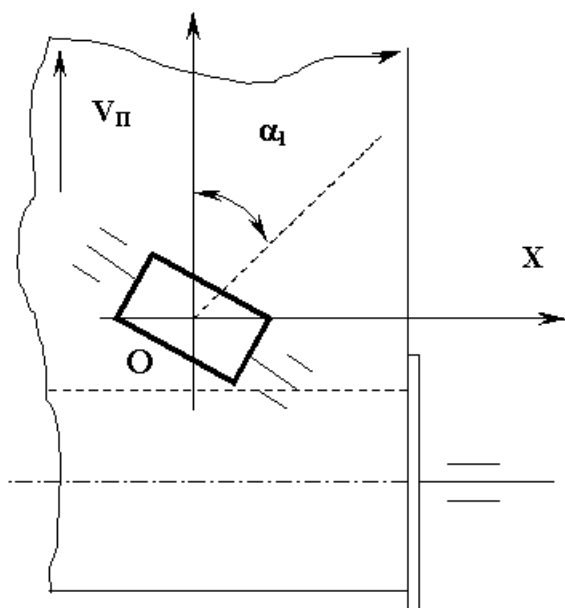


Рис.2.12. Розрахункова схема роликового рівняльника

де a_1 - кут атаки (кут між напрямом окружній швидкості обертання роликів і напрямом подачі полотна); f - середній коефіцієнт тертя ковзання обода роликів по обличчю і вивороту полотна; m - середній приведений коефіцієнт тертя кочення обода роликів по лицевому боку і вивороту полотна.

Використовуючи програму для розв'язання трансцендентних рівнянь, були знайдені значення кута a_1 при

$$f = 0,6; \quad m = 0,1; \quad a_{11} = -0,728 + 1,89j; \quad a_{12} = -0,728 - 1,89j; \quad a_{13} = 1,4562 \quad \text{рад.}$$

Виходячи з фізичної моделі процесу нас влаштує третій корінь $a_1 = 55^\circ 52'$ (у роботі [7] $a_1 = 55^\circ 31'$).

Приклад 2. За даними проф. Ефремова Р.Д. [8] для тарілчастих нитконатягувачів (рис. 2.13) натягнення ведучої гілки нитки (після нитконатягувача) змінюється за складним законом.

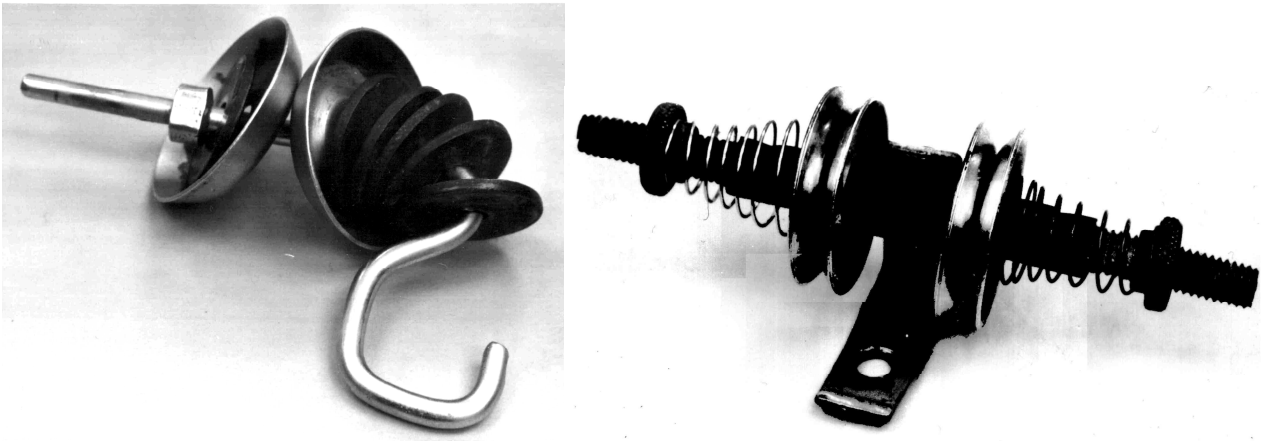


Рис.2.13. Тарілчасті нитконатягувачі

На рис. 2.14 представлена графічна залежність натягу P від кута обхвату ниткою стрижня тарілчастого нитконатягувача [9].

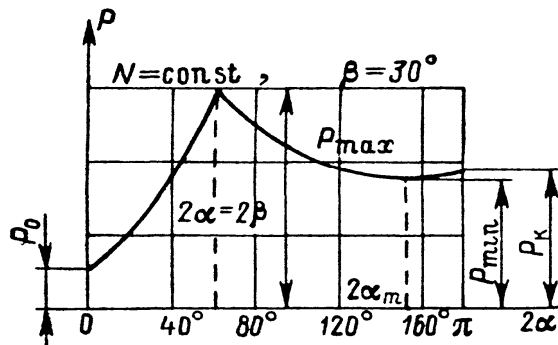


Рис. 2.14. Графік зміни натягу ведучої гілки нитки

Аналіз цієї залежності показує, що при збільшенні кута обхвату a натяг P досягає другого мінімуму. Для визначення цього значення скористаємося наступною системою рівнянь [9]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dP}{da} &= 0, \\ \frac{0,5 \cos(a - b)(1 + e^{-2m_2 a})}{[1 + \sin(a - b)]^2} - \frac{m^2}{1 + \sin(a - b)} &= \frac{m_2 P_1}{m_1 N}, \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

де P_1 – натягнення нитки до натягувача; N – тиск пружини або вантажів на рухому верхню тарілку; $\sin b = \frac{r}{R}$, R – радіус кола, на якому розташовані точки контакту рухомої тарілки з ниткою; r – радіус стрижня тарілчастого

нитконатягувача; m_1 – коефіцієнт тертя між ниткою і тарілками (виготовлені із сталі); m_2 – коефіцієнт тертя нитки об стрижень.

Другим рівнянням системи (2.23) є трансцендентне рівняння. Для розрахунків приймемо $P_1 = 0,02H$; $m_2 = 0,2$; $m_1 = 0,25$; $b = 30^\circ$; $N = 0,6H$. Використання програми для визначення кореня трансцендентного рівняння дозволило визначити величину кута $2a = 148^\circ 65'$.

Приклад 3. До системи двох трансцендентних рівнянь зводиться задача визначення переміщення опушки тканини при зівоутворенні [1]. Розрахункову схему наведена на рис. 2.15.

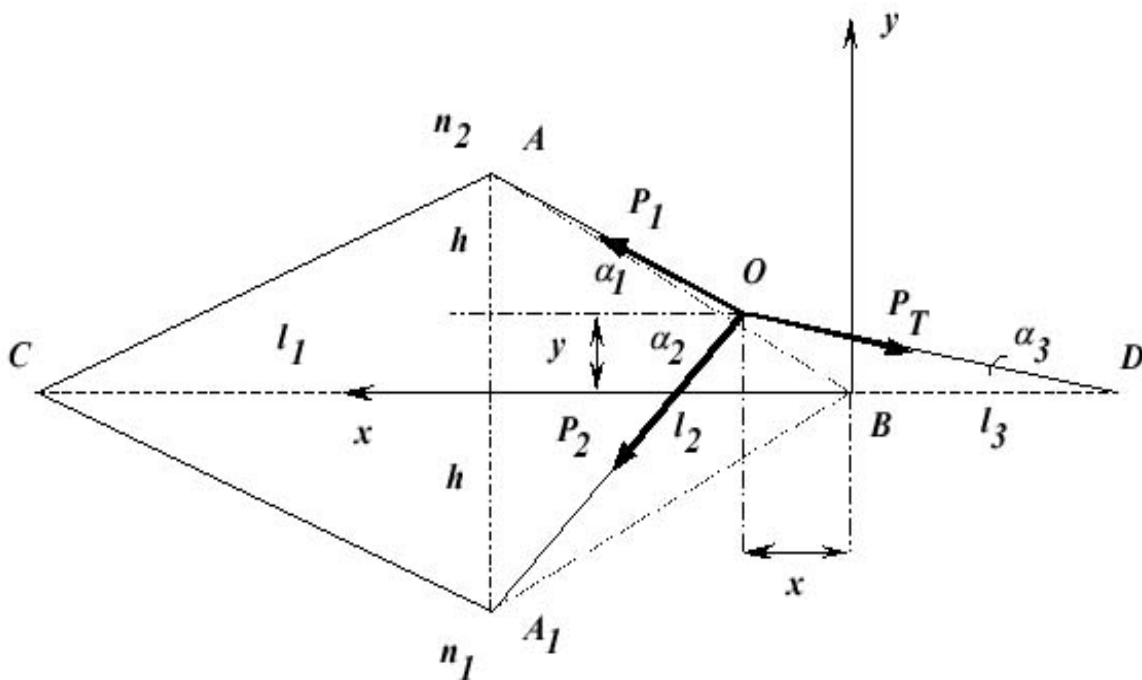


Рис.2.15. Розрахункова схема для визначення переміщення опушки тканини

Початкова система рівнянь рівноваги опушки тканини має вигляд

$$\begin{aligned}
 l_{CA} &= l_{CA_1} = \sqrt{l_1^2 + h^2}, \quad l_{AO} = \sqrt{(l_2 - x)^2 + (h - y)^2}, \\
 l_{A_1O} &= \sqrt{(l_2 - x)^2 + (h + y)^2}, \quad l_{OD} = \sqrt{(l_3 + x)^2 + y^2}, \\
 \Delta l_{CAO} &= \sqrt{l_1^2 + h^2} + \sqrt{(l_2 - x)^2 + (h - y)^2} - (l_1 + l_2), \\
 \Delta l_{CA_1O} &= \sqrt{l_1^2 + h^2} + \sqrt{(l_2 - x)^2 + (h + y)^2} - (l_1 + l_2), \\
 \Delta l_{OD} &= \sqrt{(l_3 + x)^2 + y^2} - l_3, \\
 P_1 &= n_2 C_o \Delta l_{CAO}, \quad P_2 = n_1 C_o \Delta l_{CA_1O}, \quad P_T = C_T \Delta l_{OD}, \\
 \sin a_1 &= \frac{h - y}{\sqrt{(l_2 - x)^2 + (h - y)^2}}, \quad \cos a_1 = \frac{l_2 - x}{\sqrt{(l_2 - x)^2 + (h - y)^2}}, \\
 \sin a_2 &= \frac{h + y}{\sqrt{(l_2 - x)^2 + (h + y)^2}}, \quad \cos a_2 = \frac{l_2 - x}{\sqrt{(l_2 - x)^2 + (h + y)^2}}, \\
 \sin a_3 &= \frac{y}{\sqrt{(l_3 + x)^2 + y^2}}, \quad \cos a_3 = \frac{l_3 + x}{\sqrt{(l_3 + x)^2 + y^2}}, \\
 -P_1 \cos a_1 - P_2 \cos a_2 + P_T \cos a_3 &= 0, \\
 P_1 \sin a_1 - P_2 \sin a_2 - P_T \sin a_3 &= 0,
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

де l_1, l_2, l_3, h – винесення, глибина зіву, довжина тканини, висота зіву; x, y – координати переміщення опушки при зівоутворенні; P_1, P_2, P_T – натяг верхньої, нижньої гілок зіву, натяг тканини; C_o, C_T – коефіцієнти жорсткості основи, забраної в одну ремізну рамку і тканини; n_2, n_1 – число ремізних рамок у верхньому і нижньому положенні.

Останні два рівняння системи (2.24) є трансцендентними. Для їх розв'язання необхідно використовувати чисельні методи. При розрахунках приймали $l_1 = 300 \text{ мм}$; $l_2 = 400 \text{ мм}$; $l_3 = 400 \text{ мм}$; $h = 100 \text{ мм}$; $n_1 + n_2 = 8$; $C_o = 4H / \text{мм}$; $C_T = 4H / \text{мм}$. Число ниток основи в заправці дорівнювало 1600. Число основних ниток, забраних в одну ремізну рамку, дорівнювало 200. Розрахунки проводилися для наступних співвідношень n_2/n_1 : 7/1, 6/2, 5/3, 4/4. Використання програми для розв'язання системи трансцендентних рівнянь

методом Ньютона дозволило визначити дискретні значення координат, які потім апроксимувалися. Отримані рівняння мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} x &= -0,41 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^4 + 4,16 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^3 - 15,12 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^2 + 24 \left(\frac{n_2}{n_1} \right) + 1,3 \cdot 10^{-16}, \\ y &= -1,85 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^4 + 18,15 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^3 - 60,75 \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^2 + 71,29 \left(\frac{n_2}{n_1} \right) - 1,5 \cdot 10^{-16}. \end{aligned} \right\} (2.25)$$

На рис. 2.16а представлені графічні залежності переміщення опушки тканини по двом взаємно перпендикулярним напрямкам, а також графік 3 - деформації тканини при зівоутворенні.

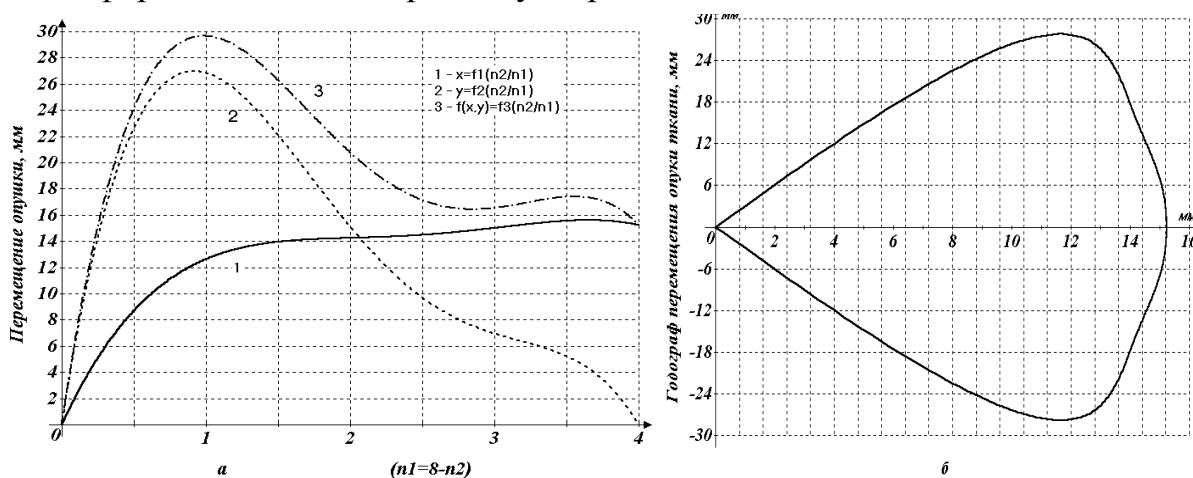


Рис. 2.16. Переміщення опушки тканини при зівоутворенні

Результати, отримані з використанням залежностей (2.25), були використані при побудові годографа переміщення опушки тканини (див. рис.2.16б).

Приклад 4. Взаємодія нитки з направляючою поверхнею великої кривизни.

Нормальний перебіг багатьох технологічних процесів забезпечується створенням мінімально можливого натягу нитки в зоні взаємодії з робочими органами трикотажних і швейних машин [10].

Розв’язання даної задачі повинне базуватися на комплексному теоретико-експериментальному дослідженні процесу взаємодії нитки з направляючою поверхнею великої кривизни. Це можуть бути поверхні голок, платин, різноманітних нитконаправлювачів та нитконатягувачів (на рис. 2.19 показаний стоєчний нитконатягувач типу «змійка» і розрахункова схема для визначення натягу ведучої гілки нитки).

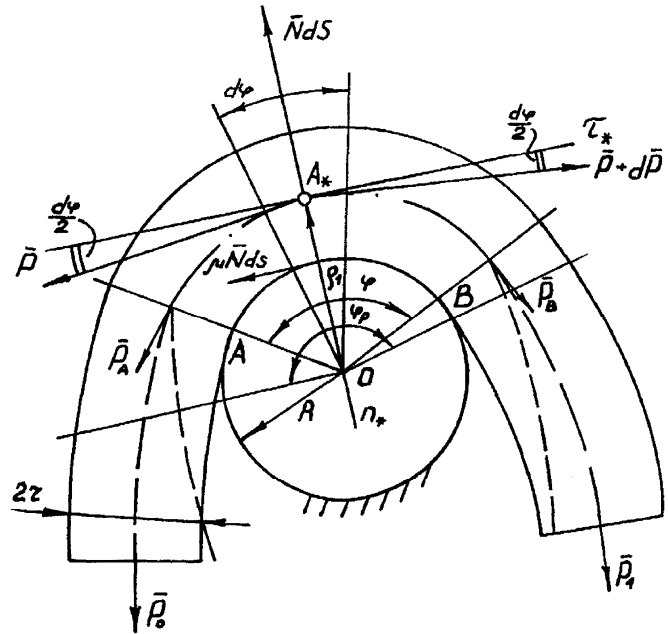


Рис. 2.19. Стоєчний нитконатягувач типу «змійка» та розрахункова схема для визначення натягу ведучої гілки нитки з урахуванням м'якості та жорсткості на вигин.

Визначення натягу ведучої гілки нитки (див. рис. 2.19) після обводу нею однієї направляючої дозволить шляхом послідовного переходу визначити величину натягу в робочій зоні.

При розв'язанні даної задачі враховуватимемо не тільки м'якість нитки в зоні контакту, але також і її жорсткість на вигин. Отримані рівняння залежності натягу ведучої гілки нитки є трансцендентними. Для їх розв'язання використовуватимемо спеціально створену програму.

На рис. 2.19 наведено розрахункову схему. Нитка набігає на направляючу поверхню в точці А і збігає в точці В. Для визначення залежності між натягом ведучої гілки P_1 і натягом нитки в точці В, а також натягом веденої гілки нитки P_0 і натягом в точці А, з урахуванням м'якості в зоні контакту, скористаємося наступною системою рівнянь [10]:

$$\left. \begin{aligned} P_A &= P_0 \left\{ 1 - \frac{B_0}{2P_0 [R + r(1 - d_0)]^2} \right\}; \\ P_B &= P_1 \left\{ 1 - \frac{B_0}{2P_1 [R + r(1 - d)]^2} \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (2.26)$$

де R - радіус кривизни направляючої (в умові нашої задачі це циліндрична поверхня); r - розрахунковий радіус поперечного перетину нитки; B_0 - коефіцієнт жорсткості нитки при вигині; d_0 , d - відносна деформація поперечного перетину в точках входу і сходу нитки з направляючою до початку попереднього зсуву.

Для визначення взаємозв'язку між натягом в точці сходу нитки P_B і натягом в точці входу на направляючу P_A , необхідно розглянути рівновагу елемента AB на циліндричній направляючій з урахуванням м'якості в зоні контакту.

Система початкових диференціальних рівнянь матиме вигляд

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial S} &= mN; \\ \left[\frac{1}{R+r} - \frac{dl}{(R+r)^2} + r \frac{\partial^2 d}{\partial S^2} \right] P &= N; \\ N &= bE_1 d (1 - b_3 d^{b_4}) + h d_0^2; \\ d &= \frac{r - r_x}{r}, \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

де m - коефіцієнт тертя (сила тертя підпорядковується закону Амонтона); N - нормальний тиск; b - ширина сліду контакту нитки на направляючій; E_1 - модуль пружності нитки при стисканні (див. таблицю 2.1); b_3 , b_4 - коефіцієнти, що характеризують нелінійну залежність між навантаженням і деформацією перетину; h - коефіцієнт, що враховує в'язкі властивості матеріалу; d_0 - швидкість відносної деформації поперечного перетину; r_x - відстань від осі деформованої нитки до направляючої.

Розв'язуючи спільно систему рівнянь (2.27), при $b_3 = b_4 = 0$, нехтуючи добутками і квадратами малих величин, отримаємо наступне рівняння

$$P_B = P_A \left[1 + \left(1 + \frac{hd_0}{bE_1d_0} \right) \frac{(R+r)}{R+r(1-d_0)} (e^{mj} - 1) - \frac{hd_0}{P_A} \right].$$

Якщо знехтувати величиною hd_0 , отримаємо систему трьох рівнянь, які пов'язують натяг нитки в точках А та В:

$$\left. \begin{aligned} d &= d_0 e^{mj_p}; \\ P_B &= P_A \left[1 + \frac{(R+r)}{R+r(1-d_0)} (e^{mj} - 1) \right]; \\ d_0 &= \frac{P_0(R+r)}{rP_0 + E_1b(R+r)^2}, \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

де j_p - значення кута обхвату перед попереднім зсувом.

З урахуванням системи рівнянь (2.26), з системи (2.28) отримаємо остаточний вираз для визначення натягу ведучої гілки нитки, що рухається по циліндричній направляючій поверхні:

$$\begin{aligned} P_1 &= P_0 \left[1 + \frac{(R+r)}{R+r(1-d_0)} (e^{mj} - 1) \right] + \frac{B_0}{2[R+r(1-d_0)]^2} - \\ &- \frac{B_0}{2[R+r(1-d_0)]^2} \left[1 + \frac{(R+r)}{R+r(1-d_0)} (e^{mj} - 1) \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Величину початкової деформації поперечного перетину d_0 для віскозної нитки (XV), капронової комплексної нитки (XV), бавовняної пряжі (XI), шерстяної пряжі (XII) і віскозної штапельної пряжі (XIII) визначали розрахунковим шляхом за третьою формулою системи рівнянь (2.28). Результати розрахунків наведено в таблиці 2.1.

Розрахунок проводили для різних радіусів кривизни направляючої зі зміною величини початкового натягу. Аналіз даних таблиці дозволив встановити, що із збільшенням радіусу кривизни направляючої поверхні величина відносної деформації зменшується, що пояснюється зменшенням нормального тиску.

Таблиця 2.1.

Результати визначення початкової деформації поперечного перетину нитки

Нитка	b , мм	$2r$, мм	E_1 , сН/м ²	P_0 , сН	Початкова деформація поперечного перетину δ_0								
					Радіус циліндричної направляючої R , мм								
					0,2	0,5	0,8	1,1	1,4	1,7	2,0	2,3	2,6
Віскозна	0,014	0,17	474,9	10	1	1	1	1	0,96	0,81	0,70	0,62	0,55
				20	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				30	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				40	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Капронова	0,012	0,20	584,4	10	1	1	1	1	0,89	0,76	0,66	0,58	0,52
				20	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				30	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				40	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Бавовняна	0,012	0,21	712,2	10	1	1	1	0,89	0,74	0,63	0,54	0,48	0,43
				20	1	1	1	1	1	1	1	0,93	0,84
				30	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				40	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Вовняна	0,015	0,23	599,0	10	1	1	1	0,84	0,69	0,59	0,51	0,45	0,40
				20	1	1	1	1	1	1	0,99	0,88	0,79
				30	1	1	1	1	1	1	1	1	1
				40	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Віскозна	0,014	0,22	1254,8	10	1	0,80	0,58	0,45	0,37	0,31	0,27	0,23	0,21
				20	1	1	1	0,87	0,72	0,61	0,53	0,46	0,41
				30	1	1	1	1	1	0,89	0,78	0,69	0,61
				40	1	1	1	1	1	1	0,95	0,90	0,79

Особливе місце в даній роботі займали дослідження з визначення дійсного кута обхвату j ниткою направляючої. Як відомо, з одного боку кут обхвату

зменшується за рахунок жорсткості нитки на вигин . Величина, на яку зменшується кут обхвату j , визначається за формулою:

$$j_{*\Sigma} = j_{*1} + j_{*2} = \arccos\left[1 - \frac{B_0}{2P_0(R+r)^2}\right] + \arccos\left[1 - \frac{B_0}{2P_1(R+r)^2}\right]. \quad (2.30)$$

Але в той же час відбувається збільшення кута обхвату ниткою направляючої за рахунок м'якості в зоні контакту, що відбувається на фазі попереднього зсуву. Величина, на яку збільшується кут обхвату j , визначається за формулою [10]:

$$j_{\dot{\Sigma}} = j_{\dot{\Sigma}1} + j_{\dot{\Sigma}2} = \arccos\left[1 - d_0\left(\frac{2r}{R}\right)^2\right] + \arccos\left[1 - d\left(\frac{2r}{R}\right)^2\right]. \quad (2.31)$$

Результати, отримані за формулою (2.31), порівнювали з експериментальними даними . Помилка при цьому не перевищувала 3-8%.

На рис. 2.20 наведено графічні залежності $j_{\dot{\Sigma}}$ від величини радіусу кривизни направляючої (1 - віскозна нитка; 2 - капронова нитка; 3 - бавовняна пряжа; 4 - вовняна пряжа; 5 - віскозна штапельна пряжа). Розрахунок проводили для натягу веденої гілки нитки $P_0 = 10cH$. Аналіз даних залежностей показує, що із збільшенням R відбувається зменшення $j_{\dot{\Sigma}}$, який прямує до нуля.

Остаточна формула для визначення кута обхвату j :

$$j = j_p + \arccos\left[1 - d_0\left(\frac{2r}{Rr}\right)^2\right] + \arccos\left[1 - d\left(\frac{2r}{R}\right)^2\right] - \arccos\left[1 - \frac{B_0}{2P_0(R+r)^2}\right] - \arccos\left[1 - \frac{B_0}{2P_1(R+r)^2}\right]. \quad (2.32)$$

На рис. 2.21 наведені графічні залежності сумарного кута обхвату j від величини радіусу кривизни направляючої поверхні. Криві відповідали: 1 - для віскозної комплексної нитки; 2 - для капронової комплексної нитки; 3 - для бавовняної пряжі; 4 - для вовняної пряжі; 5 - для віскозної пряжі. Натяг веденої гілки $P_0 = 10cH$, а кут $j_p = 3,14$ рад. Аналіз показує, що зі

збільшенням R величина сумарного кута j прямує до j_p .

Для визначення натягу ведучої гілки нитки, необхідно розв'язати рівняння (2.29) сумісно з рівняннями (2.30)...(2.32), тоді

$$\begin{aligned}
 P_1 + \left\{ \frac{B_0}{2[R + r(1 - d_0)]^2} - P_0 \right\} & \left\langle 1 + \frac{(R + r)}{R + r(1 - d_0)} \left\{ \exp \times [m j_p + \right. \right. \\
 & + \arccos \left[1 - d_0 \left(\frac{2r}{R} \right)^2 \right] + \arccos \left[1 - d \left(\frac{2r}{R} \right)^2 \right] - \\
 - \arccos \left[1 - \frac{B_0}{2P_0(R + r)^2} \right] - \arccos \left[1 - \frac{B_0}{2P_1(R + r)^2} \right] \right\rangle & - 1 \left. \right\rangle - \\
 - \frac{B_0}{2[R + r(1 - d)]^2} = 0. &
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

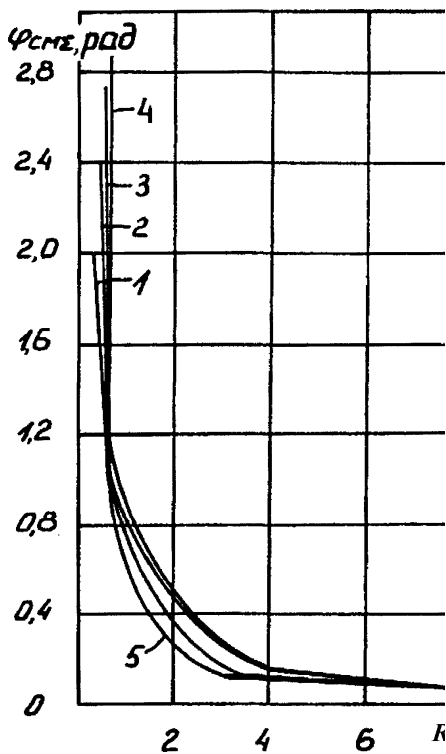


Рис. 2.18. Зміна кута j_{ni} в залежності від радіуса кривизни направляючої

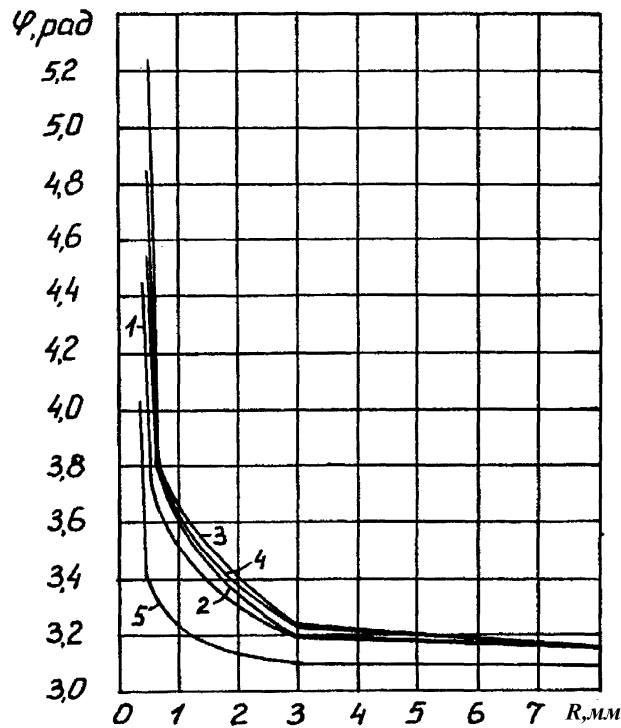


Рис. 2.19. Зміна реального кута обхвата ниткою направляючої в залежності від радіуса кривизни направляючої

Отримана залежність є трансцендентним рівнянням $f(P_1) = 0$ відносно P_1 . Розв'язання його здійснювалося за допомогою спеціальної програми. Отримані

розрахунковим шляхом результати порівнювалися з експериментальними даними. Помилка знаходилася в межах 0,1-4%.

Аналіз залежностей натягу ниток від радіусу кривизни показує, що на інтервалі 0,5-3 мм натяг знижується, а при подальшому збільшенні R його величина монотонно зростає, що пояснюється зменшенням питомого тиску і зміною величини коефіцієнта тертя. Отримані результати по зміні натягу ведучої гілки нитки свідчать, що залежності мають явно виражені екстремальні точки, що дозволяє ставити питання про оптимізацію розмірів направляючих і робочих органів трикотажних і швейних машин.

Вибір оптимальних розмірів дозволить зменшити величину натягу ведучої гілки нитки, що зменшить обривність і забезпечить нормальний перебіг технологічних процесів.

РОЗДІЛ 3. ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ ТА СИСТЕМИ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

3.1 Вступні положення

У застосуваннях математики до технічних наук диференціальні рівняння займають особливо важливе місце [11, 12, 13]. Багато прикладних процесів з їх допомогою описуються простіше і повніше, ніж при використанні інших підходів. Такі рівняння дають можливість вирішувати багато питань загальнотехнічних і спеціальних прикладних дисциплін: фізики, теоретичної механіки, опору матеріалів, гідравліки, теорії механізмів і машин, хімії, технології виробництв, біології, фінансово-економічних дисциплін і ін.

Відомо, що далеко не завжди вдається в замкнутому вигляді знайти розв'язок диференціального рівняння. Тому розроблені методи для їх наближеного розв'язання. Методи дослідження і чисельного розв'язання диференціальних рівнянь як звичайних, так і в частинних похідних, вже багато років привертають увагу учених, проте багато важливих задач в даному напрямку ще й досі чекають свого розв'язання.

3.2 Диференціальні рівняння

3.2.1 Основні поняття

Диференціальними називаються рівняння, що містять похідні від невідомої функції однієї або декількох незалежних змінних.

Рівняння, що містять похідні по кільком незалежним змінним, називаються рівняннями з *частинними похідними*.

Рівняння, що містять похідні лише по одній з незалежних змінних, називаються *звичайними* диференціальними рівняннями.

Далі будемо розглядати тільки звичайні диференціальні рівняння, або системи звичайних диференціальних рівнянь.

Надалі незалежна змінна, похідна по якій входить в диференційне рівняння, позначатиметься x або t (останнє — тому, що роль незалежної змінної

часто відіграє час). Невідома функція, як правило позначатиметься y , $y(x)$ або $y(t)$.

Порядком диференціального рівняння називається найвищий порядок похідної, що входить у рівняння.

Загальний вигляд диференціального рівняння першого порядку є наступним:

$$F(x, y, y') = 0, \quad (3.1)$$

де F — функція, що визначена у деякій області V тривимірного простору R^3 . (Зазвичай функція F вважається неперервною.) Рівняння (3.1) зветься рівнянням у неявній формі або рівнянням, не розв'язаним відносно похідної.

Рівняння, яке розв'язано відносно похідної:

$$y' = f(x, y), \quad (3.2)$$

називають рівнянням першого порядку у явній формі.

Загальний вид диференціального рівняння n -го порядку є наступним:

$$F(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0. \quad (3.3)$$

Це — неявна форма диференціального рівняння. Явною формою рівняння n -го порядку буде рівняння, яке розв'язане відносно старшої похідної:

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}). \quad (3.4)$$

Нехай змінна x приймає значення в інтервалі $I \subset R = (-\infty, \infty)$. *Розв'язком диференціального рівняння на інтервалі I* називається така диференційована в I функція $y = j(x)$, після підстановки якої у рівняння воно обертається у рівність для всіх $x \in I$ (тотожність на множині I). Графік розв'язку диференціального рівняння називається *інтегральною кривою*.

Загальний розв'язок рівняння (3.1) ((3.2)) звичайно містить один вільний числовий параметр і має вигляд

$$y = j(x, C) \quad (3.5)$$

де C — згаданий параметр, φ — деяка функція. Рівністю (3.5) визначається сім'я функцій, що залежать від параметру C . Виділення єдиного розв'язку з

сім'ї розв'язків (3.5) може бути виконаним, якщо відоме *початкове значення* $y(x_0) = y_0$ для деякого $x_0 \in I$.

Загальним розв'язком рівняння (3.3) або (3.4) є сім'я функцій вигляду

$$y = j(x, C_1, \dots, C_n), \quad (3.6)$$

де C_1, \dots, C_n — числові параметри, які ще називаються довільними сталими, причому кожна функція цієї сім'ї є розв'язком даного рівняння (на тому чи іншому числовому інтервалі).

Параметри C_1, \dots, C_n можуть бути визначеними за допомогою початкових умов вигляду $y(x_0) = y_{10}, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n0}$.

Трапляються ситуації, коли розв'язки диференціальних рівнянь у явному вигляді (3.5), (3.6) одержати неможливо, але вдається знайти так звані загальні інтеграли, інакше загальні розв'язки цих рівнянь. При цьому *загальним інтегралом* диференціального рівняння (3.3) ((3.4)), зокрема, (3.1)((3.2)) називається таке відмінне від тотожності рівняння

$$U(x, y, C_1, C_2, \dots, C_n) = 0, \quad (3.5a)$$

що розв'язками (3.3)((3.4)) є диференційовані функції $y = \varphi(x)$, котрі одержують як розв'язки відносно y рівняння (3.5a) при значеннях сталих C_1, \dots, C_n з деяких певних областей. Функція U також зветься загальним інтегралом рівняння (3.1) ((3.2)).

3.2.2 Теореми про існування та єдиність розв'язку диференціальних рівнянь першого та n-го порядку

Будемо далі розглядати рівняння, які розв'язані відносно старшої похідної.

Розглянемо рівняння першого порядку

$$y' = f(x, y).$$

Нехай функція $f(x, y)$ визначена в деякій відкритій області D площини XOY (рис. 3.1), інтервал I є підмножиною проєкції області D на множину R . Нехай в D дана точка M з координатами (x_0, y_0) ($x_0 \in I$).

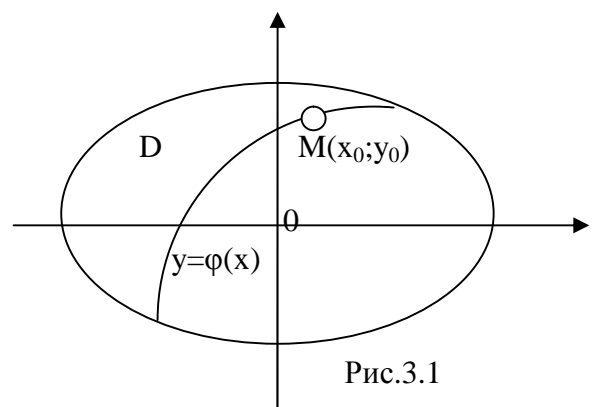


Рис.3.1

Ставиться задача: на інтервалі I знайти розв'язок рівняння (3.2), інтегральна крива якого проходить через точку M , тобто знайти функцію $y = \varphi(x)$, $x \in I$, що задовольняє початковій умові

$$y|_{x=x_0} = j(x_0) = y_0. \quad (3.7)$$

Така задача називається *задачею Коші*. У наступній теоремі формулюються умови існування і єдиності «локального» розв'язку цієї задачі.

Теорема 1 існування та єдиності. Якщо функція $f(x, y)$ визначена та неперервна в області D разом зі своєю частинною похідною $\frac{\partial f}{\partial y}$, то для будь-якої точки $M(x_0, y_0)$, що належить області D , існує інтервал I , що містить точку x_0 і на якому є визначеним та єдиним розв'язок $y = j(x)$ рівняння (3.2), котрий задовольняє початковій умові (3.7).

Під єдиністю розв'язку тут розуміють наступне: якщо існує два розв'язки рівняння, співпадаючі в точці x_0 , то ці розв'язки співпадають на спільній частині їх інтервалів визначення.

Геометрично у теоремі стверджується, що при виконанні умов теореми через кожен внутрішню точку області D проходить єдина інтегральна крива.

Сформулюємо тепер аналог попередньої теореми для рівняння n -го порядку, розв'язаного відносно старшої похідної (виду (3.4)) з початковими умовами

$$y|_{x=x_0} = y_0; y'|_{x=x_0} = y'_0, \dots, y^{(n-1)}|_{x=x_0} = y_0^{(n-1)}. \quad (3.8)$$

Теорема 2 існування та єдиності. Якщо функція $f(x, y, z_1, z_2, \dots, z_{n-1})$, залежна від $n+1$ змінних $x, y, z_1, \dots, z_{n-1}$, визначена та неперервна у деякій $(n+1)$ -вимірній області D разом зі своїми похідними $\frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z_1}, \frac{\partial f}{\partial z_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial z_{n-1}}$, то для будь-якої точки $M(x_0, y_0, y_0', y_0'', \dots, y_0^{(n-1)})$, яка належить області D , існує інтервал I , що містить точку x_0 і на якому є визначеним та єдиним розв'язок $y = j(x)$ рівняння (3.4), котрий задовольняє початковій умові (3.8).

Поняття єдиності розв'язку у даній теоремі таке ж саме, як і в попередній.

З теорем 1, 2 випливає, що при виконанні їх умов за наявності загального розв'язку рівняння (3.4) у формі (3.6):

$$y = j(x, C_1, \dots, C_n)$$

сталі C_1, C_2, \dots, C_n визначаються єдиним чином початковими умовами (3.8) при довільному векторі $(x_0, y_0, y_0', \dots, y_0^{(n-1)}) \in D$, тобто система рівнянь

$$\begin{aligned} j(x_0, C_1, C_2, \dots, C_n) &= y_0; \\ j'(x_0, C_1, C_2, \dots, C_n) &= y_0'; \\ &\dots\dots\dots \\ j^{(n-1)}(x_0, C_1, C_2, \dots, C_n) &= y_0^{(n-1)} \end{aligned} \tag{3.9}$$

має єдиний розв'язок. Навпаки, якщо при довільному $(x_0, y_0, y_0', \dots, y_0^{(n-1)})$ система (3.9) має єдиний розв'язок, то і задача Коші (3.4), (3.8) має єдиний розв'язок для довільної точки $M \in D$.

Умови, які накладаються у теоремах 1,2 на праві частини рівнянь (3.2) та (3.4), достатні як для існування, так і для єдиності розв'язків рівняння. Для існування локальних розв'язків (таких, про які йде мова у теоремі 2) достатньо вимагати неперервності функції f в області D .

3.2.3 Методи розв'язання диференціальних рівнянь

Задача розв'язання звичайного диференційного рівняння у загальному випадку значно складніша, ніж задача обчислення однократних інтегралів, і тому доля випадків інтегрування у явному вигляді тут є значно меншою.

Чисельні методи розв'язання диференціальних рівнянь (3.2) можна розділити на два класи [11]. В один з них входять методи, що використовують одне стартове значення розв'язку на кожному кроці, а другий утворюють методи, що використовують кілька значень на кожному кроці (багатокрокові методи). Останні характеризуються тим, що на основі раніше отриманих декількох значень функції будуються нові, які потім уточнюються за допомогою самих диференціальних рівнянь.

До першого класу можна віднести методи Рунге — Кутти, зокрема, методи Ейлера — Коші та трапецій. До другого відносяться, наприклад, метод Адамса, метод Крилова-Адамса.

Розглянемо спочатку метод Ейлера-Коші.

Нехай задано диференціальне рівняння

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad (3.10)$$

де (x, y) належить області G з початковою умовою

$$x = x_0, y_0 = y(x_0) \quad (3.10')$$

Метод побудови наближеного розв'язку задачі Коші (3.10), (3.10') заснований на понятті так званої *ламаної Ейлера*. Ламана Ейлера являє собою графік кусково-лінійної функції, що будується за наступним правилом. Нехай h — мале додатне число (крок методу). Розглянемо в декартовій площині точку з координатами (x_1, y_1) , де

$$x_1 = x_0 + h, y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0).$$

Зауважимо, що, згідно з формулою Тейлора, завдяки рівностям (3.10), (3.10') величину y_1 можна розглядати як наближення до значення розв'язку $y(x_1)$ розглядуваної задачі Коші. Якщо точка (x_1, y_1) належить множині G , то продовжуємо побудову за індуктивним правилом $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots$. Кожне значення y_i розглядається як наближення до значення шуканого розв'язку y в точці x_i . Таким чином одержуємо послідовність точок (x_i, y_i) , $i = 0, 1, 2, \dots$, де всі x_i розташовані вправо від точки x_0 . Аналогічну побудову, якщо потрібно, виконуємо і зліва від точки x_0 . За одержаною послідовністю будуємо кусково-лінійну функцію

$$y(x) = y_i + f(x_i, y_i)(x - x_i), x \in [x_i, x_{i+1}], i = 0, 1, 2, \dots,$$

яка (або графік якої) і має назву *ламаної Ейлера*. Існує декілька теорем, які гарантують, що при виконанні певних умов ламана Ейлера прямує до розв'язку задачі Коші (3.10), (3.10'), коли крок методу h прямує до 0 (див., наприклад [11, 12]).

Графічне представлення розрахункової схеми методу Ейлера — Коші подано на рис. 3.2.

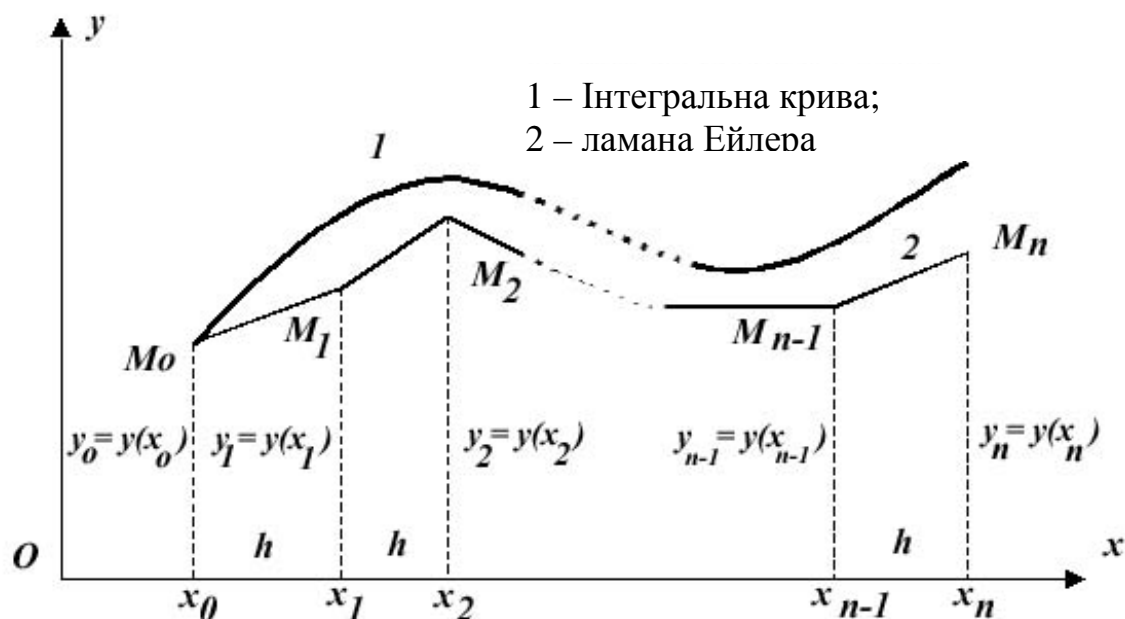


Рис. 3.2. Розрахункова схема методу Ейлера-Коші

Нехай задано диференціальне рівняння

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (3.10)$$

Необхідно знайти наближений розв'язок (3.10) в точках з координатами $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h, \dots, x_n = x_0 + nh$, де h - постійний крок; x_0 - координата початку відрізка.

Початкова умова $x = x_0$, $y_0 = y(x_0)$. Наближене значення першої похідної має вигляд

$$\frac{dy_k}{dx_k} \cong \frac{\Delta y_k}{\Delta x_k} = \frac{y_{k+1} - y_k}{h}, \quad (3.11)$$

де $k = 0, 1, \dots, n-1$.

Прирівнюючи (3.10) та (3.11), отримаємо:

$$\frac{y_{k+1} - y_k}{h} = f(x_k, y_k),$$

звідки:

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k). \quad (3.12)$$

Використовуючи рекурентну формулу (3.12) для точок $k = 0, 1, \dots, n-1$ будемо ламану Ейлера 2, яка приблизно замінює інтегральну криву 1 (див. рис.3.2). Суть методу Ейлера-Коши полягає в тому, що через початок кожного відрізка $[x_k, x_{k+1}]$ проводиться дотична до інтегральної кривої 1.

Точність методу Ейлера-Коши невелика. Погрішність методу пропорційна h^2 .

Різновидом методу Ейлера-Коши є метод трапецій. Він реалізується застосуванням на кожному кроці рекурентної формули

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} \left\{ f(x_k, y_k) + f\left[x_k + h, y_k + hf(x_k, y_k)\right] \right\}. \quad (3.13)$$

Погрішність методу трапецій пропорційна h^3 і його також відносять до загальних методів Рунге-Кутта.

Перейдемо до розгляду методу Рунге-Кутта. Рекурентна формула для його реалізації має вигляд:

$$y_{k+1} = y_k + hf\left[x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)\right]. \quad (3.14)$$

Графічна інтерпретація даного методу показана на рис. 3.3. Його суть полягає в тому, що на початковому етапі через точку M_k проводять лінію поля $f(x_k, y_k)$. Далі обчислюють координати точки M_{kc} , яка ділить відрізок $[x_k, x_{k+1}]$ навпіл. Її координати будуть рівні $x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)$. Лінія поля $f\left[x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)\right]$ матиме орієнтацію, відмінну від попередньої за рахунок повороту поля на інтервалі $]x_k, x_{k+1}[$. Потім через точку M_k проводимо пряму, паралельну лінії нового напрямку поля в точці M_{kc} . Ордината точки M_{k+1} і буде шуканою ординатою y_{k+1} .

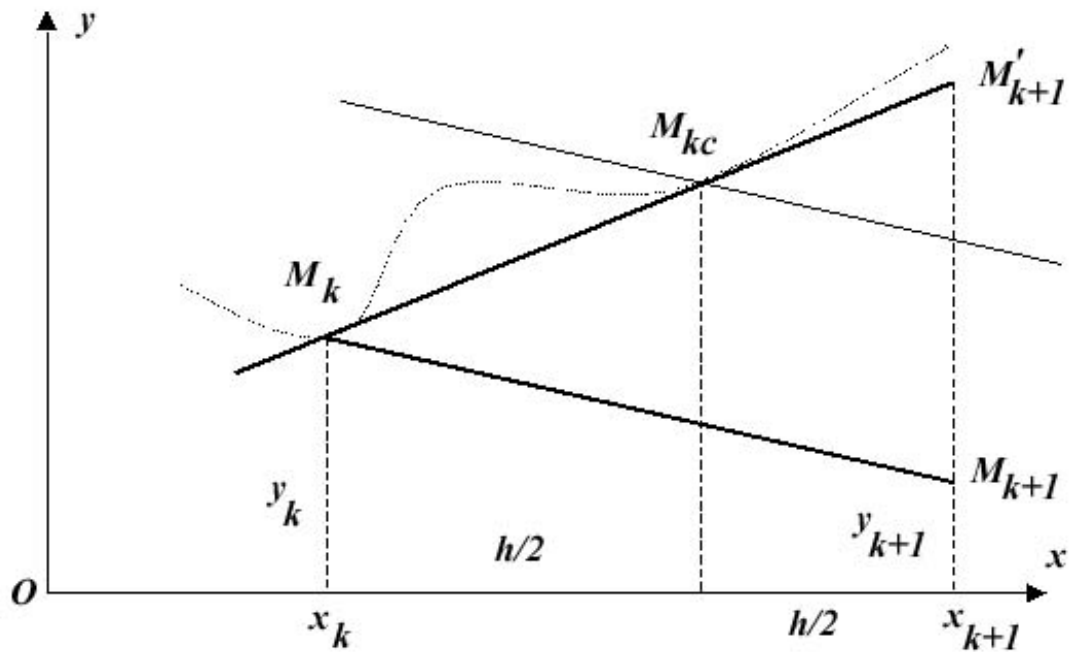


Рис. 3.3. Графічна інтерпретація методу Рунге-Кутта

Різновидом даного методу є метод Рунге-Кутта четвертого порядку, рекурентна формула якого має вигляд:

$$\begin{aligned}
 a_k &= f\left[x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)\right], \\
 b_k &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}a_k\right), \\
 c_k &= f(x_k + h, y_k + b_k h), \\
 y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}[f(x_k, y_k) + 2a_k + 2b_k + c_k].
 \end{aligned}
 \tag{3.15}$$

Погрішність даного методу пропорційна h^5 . Він має більшу стійкість до виникнення нестійкості розв'язку.

Можливість забезпечувати наближену оцінку погрішності на кожному кроці інтегрування дає метод Рунге-Кутта-Мерсона з автоматичною зміною кроку. Рекурентні формули для даного методу мають вигляд:

$$\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6} [f(x_k, y_k) + 4V_{3k} + V_{4k}], \\
V_{1k} &= hf \left[x_k + \frac{1}{3}h, y_k + \frac{1}{3}hf(x_k, y_k) \right], \\
V_{2k} &= hf \left[x_k + \frac{1}{3}h, y_k + \frac{h}{6}f(x_k, y_k) + \frac{1}{6}V_{1k} \right], \\
V_{3k} &= hf \left[x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{h}{8}f(x_k, y_k) + \frac{3}{8}V_{2k} \right], \\
V_{4k} &= hf \left[x_k + h, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k) - \frac{3}{2}V_{2k} + 2V_{3k} \right].
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Похибка обчислення y_{k+1} з урахуванням (3.16), визначається за формулою:

$$R_{k+1} = \frac{-2hf(x_k, y_k) + 9V_{2k} - 8V_{3k} + V_{4k}}{30}. \tag{3.17}$$

Порівнюємо отриману погрішність R_{k+1} із заданою похибкою ϵ .

$$|R_{k+1}| \leq \epsilon, \quad |R_{k+1}| \geq \frac{\epsilon}{30}. \tag{3.18}$$

Якщо перша умова (3.15) не виконується, то крок зменшується удвічі. Якщо друга умова не виконується, то крок збільшується удвічі. Значення y_{k+1} виводиться на друк, лише при виконанні одночасно двох умов (3.18). Похибка чисельного інтегрування за допомогою даного методу має порядок h^5 .

Багатокрокові розв'язання диференціальних рівнянь (скінченно-різницеві методи) базуються на використанні даних розв'язання на попередніх кроках. Це дозволяє підвищити швидкість обчислень. Для реалізації скінченно-різницевих методів при чисельному інтегруванні диференціальних рівнянь потрібно знати значення функції і її похідної в декількох точках, близьких до початкової. Тут можна відмітити метод Пікара і метод розкладання. Перший метод заснований на апріорному виборі першого наближення поблизу граничної точки (x_0, y_0)

$$y = d_1(x). \tag{3.19}$$

Для (3.10), з урахуванням (3.19), отримаємо:

$$\begin{aligned}
y &= y_0 + \int_{x_0}^x f[x, d_1(x)] dx = d_2(x), \\
y &= y_0 + \int_{x_0}^x f[x, d_2(x)] dx = d_3(x), \\
&\dots\dots\dots \\
y &= y_0 + \int_{x_0}^x f[x, d_{n-1}(x)] dx = d_n(x).
\end{aligned}
\tag{3.20}$$

Метод Пікара поблизу граничної точки при збіжності дає необхідну точність розв'язання, проте сфера його застосування обмежена. Це пояснюється необхідністю інтегрування (3.10) у скінченному вигляді.

Другий метод відшукування наближеного розв'язку поблизу граничної точки (x_0, y_0) пов'язаний з розкладанням в ряд Тейлора

$$\begin{aligned}
y &= y_0 + \frac{(x-x_0)}{1!} d'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!} d''(x_0) + \dots + \frac{(x-x_0)^n}{n!} d^n(x_0) + \dots, \\
y &= d(x).
\end{aligned}
\tag{3.21}$$

Вважаючи, що

$$d'(x) = f(x, y) = \frac{dy}{dx},
\tag{3.22}$$

продиференціюємо останню рівність з врахуванням значень в граничній крапці

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \frac{dy}{dx},$$

або, з урахуванням (3.22), отримаємо

$$d''(x_0) = \left[\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right]_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} + \left[\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right]_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} \cdot f(x_0, y_0).$$

Метод Адамса з третіми і вищими різницями реалізується за допомогою наступної рекурентної залежності:

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + q_i + \frac{1}{2} \Delta q_{i-1} + \frac{5}{12} \Delta^2 q_{i-2} + \frac{3}{8} \Delta^3 q_{i-3}, \quad i = 3, 4, \dots, \\
q_k &= hf(x_k, y_k), \quad \Delta^m q_k = h \Delta^m y'_k, \\
k &= 0, 1, 2, \dots
\end{aligned}
\tag{3.23}$$

Для реалізації (3.23) при розв'язанні задачі Коші необхідно визначати на початковому етапі (з використанням методу Пікара або методу розкладання) y_i , де $i = 1 \dots 3$. Дана процедура повторюється при зміні кроку інтегрування. Враховуючи чисельну нестійкість розв'язку та складність програмної реалізації, багатокрокові методи чисельного інтегрування диференціальних рівнянь рідко використовуються.

3.3 Системи диференціальних рівнянь

Сукупність співвідношень

$$\begin{cases} F_1(x, y_1, \dots, y_1, y_1', \dots, y_n') = 0 \\ F_2(x, y_1, \dots, y_1, y_1', \dots, y_n') = 0 \\ \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \\ F_n(x, y_1, \dots, y_1, y_1', \dots, y_n') = 0 \end{cases} \quad (3.24)$$

де x - незалежна змінна, y_1, y_2, \dots, y_n - невідомі функції від x , а F_1, F_2, \dots, F_n - відомі функції, називається системою диференціальних рівнянь першого порядку.

Розв'язком цієї системи являються функції $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$, які при підстановці в (3.24) перетворюють систему на тотожність.

Якщо система диференціальних рівнянь (3.24) допускає можливість розв'язання відносно похідних, то отримуємо систему

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \dots\dots\dots \dots\dots\dots \dots\dots\dots \\ \frac{dy_n}{dx} = f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{cases} \quad (3.25)$$

яка називається нормальною.

Прикладом одного нормального рівняння першого порядку є

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

Це рівняння дає поле напрямків в площині x, y . Розв'язком рівняння є однопараметричне сімейство кривих, розташованих в одній площині. Якщо в цій площині задана точка (x_0, y_0) та $f(x, y)$, $\frac{\partial f}{\partial y}$ – неперервні, то рівняння має єдиний розв'язок, що задовольняє початковим умовам $y(x_0) = y_0$.

Візьмемо тепер два рівняння

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, y_2) \\ \frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, y_2) \end{cases} \quad \text{або} \quad \begin{cases} \frac{dy}{dx} = f_1(x, y, z) \\ \frac{dz}{dx} = f_2(x, y, z) \end{cases}.$$

За певних умов отримаємо розв'язок

$$y_1 = y = j_1(x); \quad y_2 = z = j_2(x).$$

Ці розв'язки можна розглядати як параметричні рівняння просторової кривої в системі координат x, y, z .

Таким чином, розв'язок одного рівняння можна зобразити кривою двовимірного простору. Розв'язок двох рівнянь першого порядку можна зобразити кривою в тривимірному просторі. Розв'язок n рівнянь першого порядку утворює криву в $(n+1)$ -вимірному просторі. Ці криві називаються інтегральними.

Чисельне розв'язання систем диференціальних рівнянь здійснюється аналогічно розв'язанню одного диференціального рівняння. Процедуру, що реалізує чисельне інтегрування системи двох диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта, наведено у додатку 10.

3.4 Деякі математичні моделі з фізичної хімії, що реалізуються з використанням чисельних методів

3.4.1 Вступні положення

Одним із основних критеріїв оцінки рівня науково-технічного прогресу в країні, є ступінь використання полімерних матеріалів. На сьогоднішній день в Україні має місце катастрофічний стан з сировинною

базою текстильної промисловості: із хімічних волокон випускаються тільки віскозні волокна і незначна кількість поліамідних волокон. В результаті виконаних фундаментальних досліджень в галузі фізико-хімії розплавів сумішей полімерів було знайдено новий спосіб одержання ультратонких синтетичних волокон (мікрволокон) шляхом переробки розплавів сумішей полімерів (явище специфічного волокноутворення) [14]. Цей спосіб дає можливість отримати мікрволокна розміром від декількох до десятих долей мікрометра, які мають вовно- та бавовноподібні властивості за рахунок унікальної структури поверхні: кожне волокно мікронних розмірів покрите по всій поверхні мікрофібрилами, що відходять від основного волокна.

Дослідження процесів формування структури в сумішах полімерів становить великий науковий і практичний інтерес, але на сьогоднішній день при вивченні цих систем переважає емпіричний підхід. Одним із шляхів, що дозволяє вести наукові дослідження прискореними темпами і знаходити оптимальні рішення з мінімальними затратами, є використання математичних методів моделювання та аналізу.

3.4.2 Механізм явища специфічного волокноутворення

Використання сумішей полімерів є провідною світовою тенденцією в галузі хімії і технології полімерів, що дає можливість не тільки поєднувати властивості двох полімерів в одному виробі, але й забезпечує отримання унікальних ефектів. Специфічне волокноутворення відкриває новий шлях виробництва ультратонких синтетичних волокон з унікальними властивостями. Сутність даного явища полягає в тому, що при течії розплаву суміші полімерів один компонент (волокноутворюючий) утворює в масі іншого безліч мікрволокон, орієнтованих у напрямку течії.

Розплав суміші двох полімерів – це краплі одного компоненту – дисперсна фаза в масі іншого – дисперсійного середовища. Під дією розтягуючих напруг краплі полімеру дисперсної фази перетворюється у рідинні струмені, які поєднуються в повздовжньому напрямку з формуванням

безперервних струменів. Деформування та потоншення утворених струменів (майбутніх мікрОВОЛОКОН) триває, доки напруга розтягу не досягне максимального значення. З наближенням до входу в канал формуючого отвору (філь'єри) розтягуючі напруги релаксують, що супроводжується збільшенням діаметра утворених струменів та порушенням їх паралельності. З розвитком та становленням зсувної течії в каналі струмені знову витягуються та паралелізуються. В каналі філь'єри розплав суміші має вигляд рідинних струменів волокнуутворюючого полімеру в масі матричного полімеру.

Коли з формуючого отвору виходить ультратонке волокно відбуваються процеси затвердіння, кристалізації та утворення композиційного екструдату, в якому полімер-матриця налічує десятки або сотні тисяч ультратонких волокон діаметром від кількох мікрОМЕТРІВ до десятих часток мікрОМЕТРА. Ультратонкі волокна можна виділити з композиційного екструдату шляхом екстракції (розчинення) полімеру-матриці розчинником, інертним до волокнуутворюючого полімеру. Специфічність цього типу волокнуутворення полягає в тому, що волокнуутворення відбуваються не після виходу розплаву полімеру із формуючого отвору, як в традиційних технологіях, а ще у вхідній зоні філь'єри. Крім того, волокнуутворення відбувається у в'язкій полімерній матриці, а не у низькомолекулярних рідинних чи газових середовищах. Особливість полягає в тому, що комплексна нитка з десятків і сотень тисяч мікрОВОЛОКОН може бути одержана при формуванні через один отвір. Тому, немає необхідності у виготовленні філь'єр з великою кількістю отворів, які забиваються різними домішками, призводячи до нестабільності процесу формування.

Ультратонкі синтетичні волокна, що формуються при переробці розплавів сумішей полімерів, виділяються виключною м'якістю, приємним грифом, вовно- та бавовноподібністю без спеціальних прийомів текстурування та надання звитості. З особливостей структури волокна завжди впливають особливості властивостей. За допомогою електронної мікроскопії підтверджена

унікальна структура ультратонкого волокна: поверхня кожного по всій поверхні вкрита дуже тонкими фібрилами, що відходять від основного волокна. Таким чином, утворюється досить розвинена поверхня. Волокна не гладенькі, як звичайні синтетичні волокна, а об'ємні, мають добре зчеплення між собою, високі сорбційні, тепло- та звукоізолюючі властивості. Ця структура поверхні зумовлена явищами на межі поділу фаз, а саме формуванням міжфазового перехідного шару (знаходженням у ньому певної частки полімеру дисперсної фази, який кристалізується у вигляді фібрил на основному волокні в процесі охолодження струменя розплаву суміші). Даних волокон немає в природі, і вони не можуть бути одержані за традиційними технологіями.

Найефективнішим методом, що регулює процеси структуроутворення в сумішах полімерів, є компатибілізація. Це означає покращення спорідненості компонентів суміші на межі поділу фаз. Досягнути такого ефекту можна, наприклад, за рахунок введення у бінарну полімерну суміш третьої речовини (компатибілізатора). Ці речовини вводяться у незначних кількостях, проте дають можливість досягати значного результату: діаметр отриманих мікрОВОлокон зменшується, значно збільшується кількість безперервних волокон та зростає однорідність волокноутворення. Особливо слід відмітити позитивний вплив компатибілізації на структуроутворення в сумішах зі збільшеним вмістом волокноутворюючого компонента (до 50 мас. %). В звичайних умовах для таких сумішей волокноутворення взагалі не реалізується.

3.4.3 Математичні методи моделювання реологічної поведінки дисперсних систем

Дослідженню особливостей течії дисперсних систем приділяється велика увага, оскільки це сприяє кращому розумінню технологічних процесів, що мають місце при їх переробці. На сьогодні накопичена велика кількість експериментальних даних, на основі яких сформульовано ряд емпіричних залежностей. Останні дозволяють з достатньою точністю характеризувати

деякі важливі особливості реологічної поведінки дисперсних систем. Запропоновані також і теоретичні моделі. Проте, в цілому в механіці дисперсних систем спостерігається помітне відставання теоретичних досліджень від експериментальних.

Будь-яке теоретичне дослідження по створенню математичних моделей поведінки дисперсних систем починається з встановлення реологічних рівнянь стану, які зв'язують тензор напруг в суспензії з кінематичними характеристиками течії та дозволяють замкнути систему рівнянь руху, отриманих на підставі загальних законів механіки. Для побудови реологічних рівнянь стану дисперсних систем використовуються два підходи: феноменологічний (макроскопічний), структурний (мікроскопічний), а в останні роки їх об'єднання – структурно-феноменологічний. Феноменологічний підхід базується на припущенні того, що середовище безперервне і однорідне. Рівняння стану при такому підході створюються на основі загальних законів класичної механіки і феноменологічної термодинаміки при деяких припущеннях відносно властивостей середовища (нестабільність, ізотропність, пружність та ін.). Використання сучасних методів математики - тензорного аналізу, функціонального аналізу, - дозволяє отримати залежність тензора напружень від кінематичних параметрів та інших характеристик, які визначають характер течії, в досить загальному вигляді, що безперечно є сильною стороною феноменологічного підходу [15]. Структурний підхід описує реологічні властивості систем на основі дослідження поведінки під час течії їх складових елементів. При цьому макроскопічні характеристики дисперсних систем виражаються через осереднення параметрів мікроструктури і дисперсійного середовища. Недоліком цього методу є те, що, визначаючи скалярну функцію - в'язкість в тій чи іншій течії, неможливо відповісти на основне питання – який вигляд має реологічне рівняння стану суспензії. Сильною стороною структурного підходу є те, що при вибраній моделі частинок всі величини, які входять в реологічні рівняння стану, визначаються теоретично як функції параметрів,

що характеризують мікроструктуру і дисперсійне середовище. Але у структурного підходу є й слабкі сторони: він є малоефективним при побудові рівнянь стану систем, які мають складну мікроструктуру.

Сильні сторони розглянутих методів взаємно доповнюють один одного, що свідчить про доцільність їх об'єднання при створенні реологічних рівнянь стану складних середовищ [15-17]. Структурно-континуальний підхід базується на використанні феноменологічних моделей структурного континуума, які містять необхідне число внутрішніх параметрів для опису поведінки мікроструктури дисперсної системи. Структурний континуум є моделлю суцільного середовища, в якому при основних припущеннях континуальної механіки (суцільність, нерозривність функцій, що характеризують рух і стан середовища) враховуються особливості зміни мікроструктури дисперсної фази та їх вплив на реологічні властивості дисперсії. Якщо в класичній механіці кожна точка континуума характеризується густиною, швидкістю і тиском, то в структурному континуумі, поряд з перерахованими показниками - ще так званими внутрішніми параметрами. Таким чином, на відміну від континуума класичної механіки, структурний континуум має додаткові ступені вільності, які використовуються для врахування особливостей поведінки мікроструктури дисперсії. Внутрішні параметри можуть бути: скалярами, векторами, тензорами; їх число і вид визначаються природою мікроструктури дисперсної фази. Так, при побудові феноменологічних моделей структурного континуума для суспензій жорстких і деформівних частинок вибір внутрішніх параметрів визначається необхідністю введення в реологічні рівняння впливу на поведінку суспензії орієнтації зважених частинок, їх гідродинамічної взаємодії і деформації. У випадку розбавлених суспензій орієнтація і деформація частинок, які мають симетрію відносно осі і перпендикулярної до неї площини, моделюються тільки одним внутрішнім параметром – вектором. Положення вектора в просторі буде характеризувати залежність реологічних властивостей середовища від напрямку (анізотропію), а модуль вектора –

деформацію частинок в течії. В роботі [18] як модель зваженої частинки було розглянуто деформівний еліпсоїд обертання, який має внутрішню в'язкість і пружність. При цьому припускалося, що в процесі взаємодії з дисперсійним середовищем частинка змінює свої розміри, але за формою залишається еліпсоїдом обертання, який зберігає свій об'єм. Виконані дослідження поведінки деформівної еліпсоїдальної частинки в неоднорідній течії ньютонівської рідини показали, що деформівність зваженої частинки ускладнює реологічні рівняння стану розбавлених суспензій. Хоча за формою рівняння близькі до реологічних рівнянь стану жорстких частинок, вони суттєво відрізняються за змістом. Замість реологічних сталих ці рівняння містять реологічні функції, які входять в величини, що підлягають осередненню.

Таким чином, структурно-феноменологічний підхід дає можливість описати реологічні властивості полімерних дисперсій в досить загальному вигляді з урахуванням їх мікрореологічних характеристик.

3.4.4 Дослідження закономірностей деформування полімеру дисперсної фази при течії розплавів сумішей шляхом математичного моделювання

В даному розділі представлені результати розробки математичних моделей деформації крапель компоненту дисперсної фази при течії розплаву суміші полімерів у вхідній зоні формуючого отвору.

Теоретичні дослідження реологічної поведінки полімерних дисперсних систем пов'язані зі значними труднощами. Для розуміння процесів, що мають місце при течії дисперсії, необхідно знати її чисельні характеристики: в'язко-пружні властивості компонентів, об'ємну концентрацію дисперсної фази, форму, розміри частинок, їх взаємодію тощо. Детальне урахування цих показників можливе в рамках структурного (мікроскопічного) підходу. Останній знайшов особливо успішний розвиток при дослідженні порівняно простих середовищ, таких як розбавлені суспензії з частинками нескладної форми. Можливість використання структурного методу в реології дисперсій

обмежена їх різноманіттям та складністю морфології. Запропонований авторами [15, 16, 18] структурно-континуальний підхід поєднує феноменологічний та структурний методи і дає можливість враховувати всі основні положення континуальної механіки (суцільність середовища, нерозривність функцій, що характеризують його рух і стан) та особливості поведінки дисперсної фази. Таким чином, в моделі структурного континуума кожна точка дисперсії характеризується густиною, швидкістю і тиском (як в класичній механіці) і, крім того, так званими внутрішніми параметрами. У випадку розбавлених суспензій деформівних частинок (макромолекул) в реологічне рівняння стану вводять один внутрішній параметр – вектор, який враховує вплив орієнтації, гідродинамічної взаємодії та деформації зважених частинок на поведінку середовища. При цьому координати частинки в просторі, які описуються вектором, визначають залежність реологічних властивостей суспензії від орієнтації частинок (анізотропію), а модуль вектора – величину деформації при течії [16].

Для створення моделі деформації крапель полімеру дисперсної фази в іншому полімері форму краплі приймали за еліпсоїд, який змінює в процесі взаємодії з дисперсійним середовищем свої розміри, але при цьому зберігає об'єм. Дисперсійне середовище моделювали ньютонівською рідиною з метою спрощення математичних викладок та можливості вирішення одержаних рівнянь.

Система рівнянь, що описує ізотермічний рух суцільного середовища, складається із рівнянь течії одноосного розтягнення, нерозривності потоку та реологічного рівняння стану рідини. Для аналізу поля швидкостей у вхідній зоні використовували сферичну систему координат, оскільки лінії току на вході в канал мають радіальну складову швидкості (рис. 3.4). Таке поле течії виникає в результаті накладення поздовжнього деформування на зсувову течію. Вектори локальних швидкостей направлені вздовж твірних конуса і мають три складові: швидкість в напрямку течії V_z і в перпендикулярних

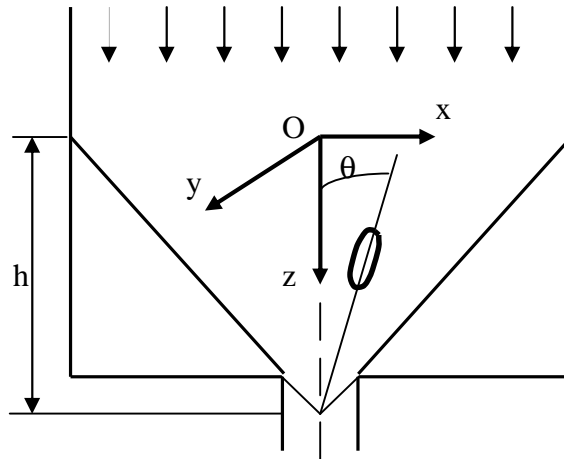


Рис. 3.4. Схематичне зображення зони входу в формуючий

напрямок V_x, V_y . Перша з них дає деформацію розтягу, а дві інші – зсуву.

Поле швидкостей в цьому випадку може бути описане таким чином:

$$V_x = -u/2x; \quad V_y = -u/2y; \quad V_z = uz;$$

де $u = V/h$; u – інтенсивність течії одноосного розтягнення;

V – швидкість опускання верхнього шару розплаву суміші;

h – висота шару розплаву суміші

Тензор швидкості деформації (d_{ij}) одноосного розтягу визначається:

$$d_{ij} = \begin{pmatrix} -u/2 & 0 & 0 \\ 0 & -u/2 & 0 \\ 0 & 0 & u \end{pmatrix}$$

При цьому допускається, що циркуляційна течія відсутня. Рівняння нерозривності потоку у випадку постійної густини має вигляд: $u_{,i} = 0$.

Реологічний стан досліджуваної дисперсії описували рівнянням, одержаним з позицій структурно-континуального підходу для розбавлених суспензій з еліпсоїдальними деформівними частинками [18]. В цьому рівнянні є один внутрішній параметр – вектор \mathbf{n}_i , який пов'язаний з елементом мікроструктури – зваженою деформівною частинкою. Вектор \mathbf{n}_i залежить від характеру течії середовища і може змінюватися в просторі і в часі. Напрямок

вектора співпадає з вектором осі симетрії еліпсоїда, а його модуль – з довжиною напівосі обертання (a), тобто $|\dot{\mathbf{n}}_i| = a$. Реологічне рівняння, що описує анізотропну рідину, має вигляд:

$$\dot{\mathbf{n}}_i = I_1 n_i + I_2 d_{km} n_k n_m n_i + I_3 d_{ij} n_j \quad (3.26)$$

де $\dot{\mathbf{n}}_i$ - похідна від вектора орієнтації (\mathbf{n}_i) по часу, взята у відповідній точці і в відповідний момент;

d_{km} - елементи тензора швидкості деформації одноосного розтягу;

n_k, n_m, n_i, n_j - координати вектора

Величини I_1, I_2, I_3 - характеризують реологічні властивості системи. Вирази для їх визначення одержані в роботі [19].

$$I_1 = \frac{-2ab^2 b_0'' G \frac{a}{a_0} (1 - \frac{q}{q_0})}{m(2 + 3ab^2 b_0'' \frac{h}{m})} (1 - M\Phi) \quad (3.27)$$

$$I_2 = \frac{2 + (N - 2M)\Phi}{a^2(2 + 3ab^2 b_0'' \frac{h}{m})} - \frac{a^2 - b^2 + \frac{15(a^2 - b^2)(a_0 + b_0) + 4(a^2 + b^2)(b_0 - a_0)}{6ab^2 b_0' B} \Phi}{a^2 + b^2 + \frac{15(a^2 - b^2) + 4(a^2 + b^2)^2}{6ab^2 B} \Phi}$$

$$I_3 = \frac{a^2 - b^2 + \frac{15(a^2 - b^2)(a_0 + b_0) + 4(a^2 + b^2)(b_0 - a_0)}{6ab^2 b_0' B} \Phi}{a^2 + b^2 + \frac{15(a^2 - b^2)^2 + 4(a^2 + b^2)^2}{6a^2 b B} \Phi}$$

$$\text{де } M = \frac{4}{ab^2(2 + 3ab^2 \frac{h}{m} b_0'')} * \left\{ \frac{5}{6(a_0 + 2b_0 - 2b_0'(a^2 + b^2))} - \frac{100b_0'a^2(2b_0'a^2 - a_0 - 2b_0)}{(a_0 + 2b_0)(a_0 + 2b_0 - 2b_0'(a^2 + b^2))} * \left[\frac{1}{24ab_0} - \frac{1}{2b_0'a^2 - (a_0 + 2b_0)} \right] \right\}$$

$$N = \frac{4}{ab^2} \left[\frac{10}{18b_0''} + \frac{5b_0''}{8b^4 a_0'^2} - \frac{10(b_0'' - a_0'')(2b^2 a_0' + 3b_0'')}{72b^4 a_0'^2} \right]$$

$$B = a^2 a_0 + b^2 b_0$$

де a, b, a_0, b_0 – піввісі еліпсоїда в деформованому та недеформованому стані;

G, Φ – модуль пружності і об'ємна концентрація дисперсної фази;

μ, η – в'язкість дисперсійного середовища і дисперсної фази;

$q = \frac{a}{b}; q_0 = \frac{a_0}{b_0}$ – величина деформації;

Величини $\alpha_0, \beta_0, \alpha_0', \beta_0', \alpha_0'', \beta_0''$ – визначені в роботі [20]. У використаних рівняннях крапка означає повну похідну по часу; індекси, що повторюються, означають сумування від 1 до 3 по даному індексу.

Для розв'язання рівняння (3.26) відносно величини деформації та орієнтації еліпсоїду (полімерної краплі) в потоці розкладемо його по осях координат x, y, z :

$$\begin{cases} \dot{n}_x = I_1 n_x + I_2 \frac{u}{2} (-n_x^2 - n_y^2 + 2n_z^2) n_x + I_3 \left(-\frac{u}{2}\right) n_x \\ \dot{n}_y = I_1 n_y + I_2 \frac{u}{2} (-n_x^2 - n_y^2 + 2n_z^2) n_y + I_3 \left(-\frac{u}{2}\right) n_y \\ \dot{n}_z = I_1 n_z + I_2 \frac{u}{2} (-n_x^2 - n_y^2 + 2n_z^2) n_z + I_3 u n_z \end{cases} \quad (3.28)$$

В сферичній системі координат координати вектора \mathbf{n}_i можна визначити так:

$$\begin{cases} n_x = a \cos j \sin q \\ n_y = a \sin j \sin q \\ n_z = a \cos j \end{cases} \quad (3.29)$$

де φ – кут між віссю Ox та проекцією осі обертання еліпсоїдної частинки на площину Oxy ;

θ – кут між напрямком течії та віссю обертання еліпсоїда

Взявши похідні від лівої і правої частин (3.29) і прирівнявши праві частини відповідних рівнянь (3.28) і (3.29) та зробивши необхідні перетворення, одержали систему диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \dot{q} = 0 \\ \dot{q} = -\frac{3}{4} u I_3 \sin(2q) \\ \frac{\dot{a}}{a} = I_1 + \frac{u}{2} (I_2 a^2 + I_3) (2 - 3 \sin^2 q) \end{cases} \quad (3.30)$$

де $\frac{\dot{a}}{a}$ - швидкість деформації еліпсоїда

Представлена система диференціальних рівнянь (3.30) являє собою математичну модель деформації крапель компоненту дисперсної фази при течії розплаву суміші полімерів у вхідній зоні формуючого отвору [21]. Модель дозволяє визначати величину деформації і орієнтацію крапель в потоці в залежності від реологічних властивостей компонентів суміші та об'ємної концентрації дисперсної фази.

Для зручності розв'язання системи рівнянь (3.30) зробили перехід до безрозмірних змінних у рівнянні для визначення швидкості деформації. В нових змінних систему рівнянь (3.30) можна записати:

$$\begin{cases} \dot{q} = 0 \\ \dot{q} = -\frac{3}{4} u I_3 \sin(2q) \\ \frac{\dot{q}}{q} = \frac{3}{2} (I_1 + \frac{u}{2} (I_2 r_0^2 q^{4/3} + I_3) (2 - 3 \sin^2 q)) \end{cases} \quad (3.31)$$

Останню систему диференціальних рівнянь розв'язували чисельно методом Рунге-Кутта [22] за допомогою спеціально написаної програми в середовищі Delphi мовою Object Pascal. Процедуру, що реалізує вказаний метод, наведено у додатку 10. Додаткові процедури для розрахунку реологічних функцій наведено в додатку 11. Програмним чином реалізовано не лише розв'язання отриманої системи диференціальних рівнянь (3.31), а й побудова графіків залежності деформації краплі від різних вхідних параметрів.

Інтерфейс програми для дослідження впливу орієнтації краплі в потоці на деформацію, наведено на рис. 3.5.

Адекватність створеної моделі перевіряли шляхом порівняння розрахованих за допомогою одержаних рівнянь величини деформації краплі з експериментальними результатами. Для цього використовували дані із роботи [23], в якій на прикладі сумішей ПОМ/СЕВА складу 20/80 мас. % досліджено вплив співвідношення в'язкостей компонентів суміші на реалізацію явища специфічного волокноутворення. За допомогою моделі розраховували деформацію та орієнтацію краплі ПОМ в потоці по мірі пересування її до входу в формуючий отвір. Глибину опускання краплі по висоті вхідної зони визначали з рівняння: $h(t) = h_0(e^{-\mu t} - 1)$, де h_0 – початкова висота розплаву суміші; t – час.

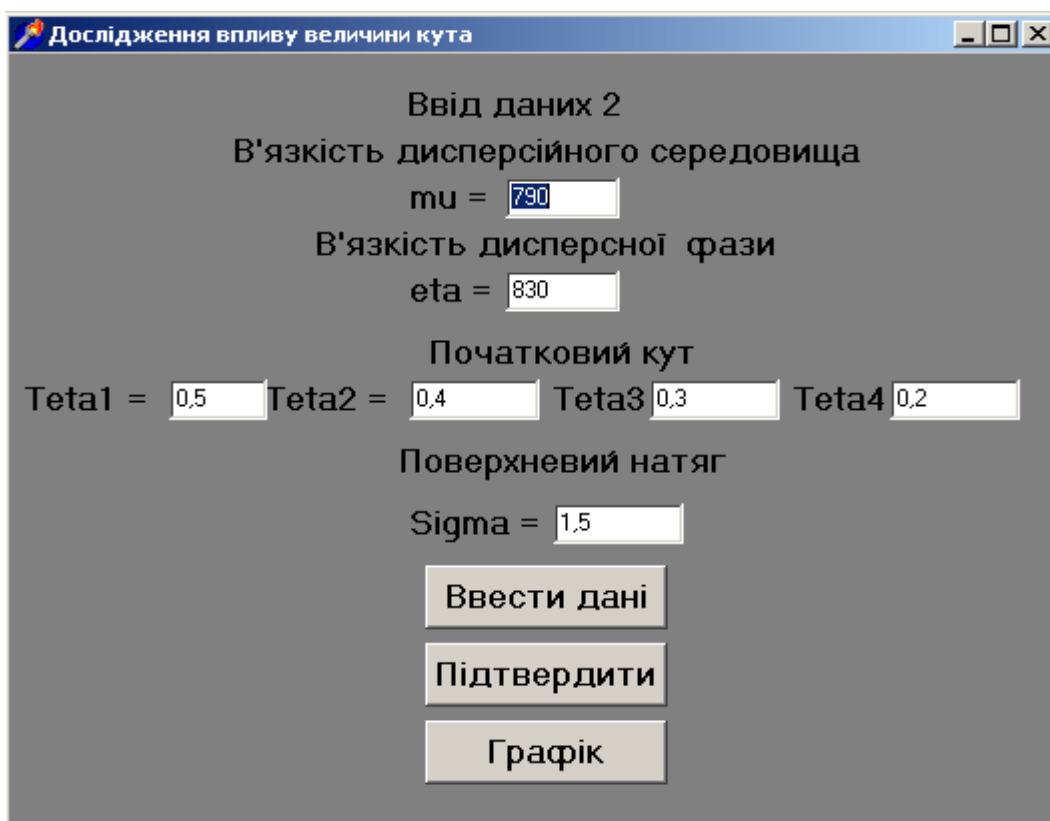


Рис. 3.5. Інтерфейс програми для дослідження впливу орієнтації краплі в потоці (початкового кута) на деформацію компонента дисперсної фази.

Одержані результати показують, що величини деформації (q) суттєво залежать від орієнтації краплі в потоці. На рис. 3.6 наведено результати роботи описаної вище програми, що демонструють сказане.

Видно, що краплі полімеру деформуються в напрямку течії, коли починають зароджуватися в резервуарі розтягуючі напруги. Величина q зростає з наближенням краплі до входу в формуючий отвір. Вона максимальна на осі потоку ($q = 0$) і зменшується по мірі зростання величини кута q - між напрямком течії та віссю обертання еліпсоїда (рис.3.6).

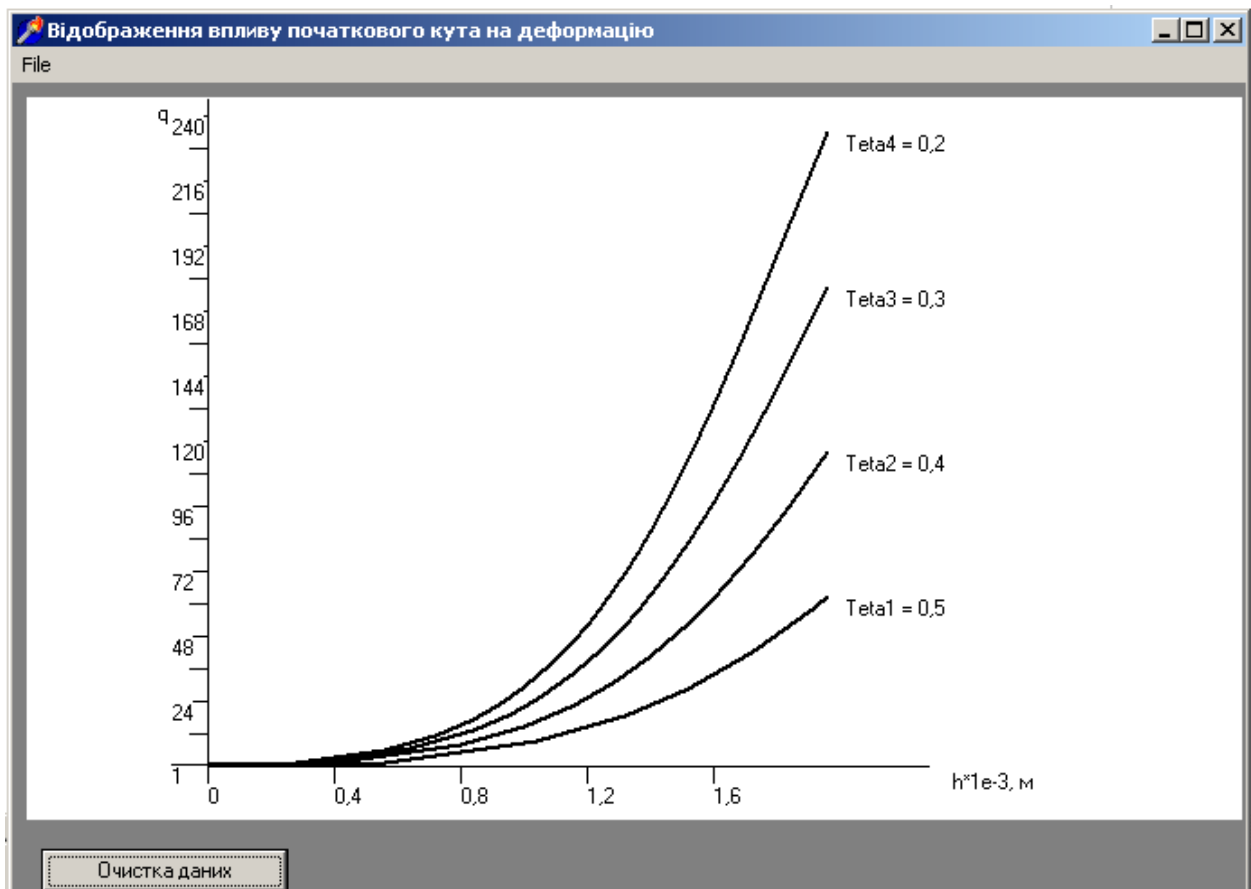


Рис. 3.6. Залежність величини деформації краплі дисперсної фази від глибини опускання та кута орієнтації q (радіан), за умови $h/m=1.0$.

Розраховані за допомогою моделі величини q добре узгоджуються з висновками, згідно з якими при переході із широкого резервуару в вузький розплав рухається прискорено: при наближенні до входу швидкість зростає і має максимальне значення на осьовій лінії. Різний ступінь деформування

крапель POM в потоці при течії є однією із причин, поряд із агрегацією, значної розбіжності діаметрів поліоксиметиленових мікрОВОЛОКОН. Останнє встановлено експериментально [23]. Відомо, що мікроструктура екструдатів сумішей полімерів формується при течії і визначається такими мікрореологічними процесами як деформація, розпад, коалесценція і міграція крапель полімеру дисперсної фази. Ступінь прояву того чи іншого із перерахованих процесів залежить значною мірою від співвідношення в'язкостей полімеру дисперсної фази і матриці (η/μ) [23]. Виконані за допомогою моделі розрахунки величини деформації краплі POM в залежності від співвідношення в'язкостей POM і CEBA свідчать, що при $h_{POM} / m_{CEBA} < 1$ величина q зростає порівняно з величиною деформації за умови $h_{POM} / m_{CEBA} \geq 1$. Останнє є цілком закономірним і підтверджено експериментально. Показано, що коли в'язкість розплавів дисперсної фази і середовища однакові, то компонент, що деформується, зазнає таку ж деформацію, якій піддається і безперервна фаза, а якщо η дисперсної фази менша в'язкості середовища, то вона деформується краще. Зростання h/m супроводжується погіршенням деформації компоненту дисперсної фази. Розраховані за допомогою моделі дані по величинах деформації узгоджуються з цими висновками.

В табл. 3.1 зроблено співставлення експериментальних результатів, які відображають характер процесів структуроутворення в екструдатах сумішей POM/CEBA при зміні співвідношень в'язкостей [23], і розрахованих величин q краплі POM.

Таблиця 3.1

Величини деформації крапель компоненту дисперсної фази

$\eta_{POM}/$ μ_{CEBA}	Експериментальні діаметри волокон*, мкм			Величини q , розраховані:					
				із експериментальних $\bar{d}_{cp}, d_{min}, d_{max}$ волокон			на моделі при різних кутах θ , рад.		
	\bar{d}_{cp}	d_{min}	d_{max}	q_{cp}	q_{min}	q_{max}	0	0,4	0,7
0,65	6,9	2,6	31,2	22,5	2,3	97,3	249,1	76,9	11,2

0,85	4,9	1,7	20,8	37,6	4,3	184,0	207,8	64,9	10,1
1,05	5,5	2,1	26,0	31,6	3,1	134,0	138,7	48,1	7,0
4,14	7,3	2,6	100	20,7	0,4	97,3	112,5	19,7	3,8
8,64	8,5	5,2	31,2	16,5	2,3	97,3	103,4	14,3	2,0
10,77	10,2	5,2	31,2	12,5	2,3	34,4	57,9	9,5	1,3

$\bar{d}_{cp}; d_{min} d_{max}$ – середній, мінімальний і максимальний діаметри

Аналіз результатів свідчить, що розроблена математична модель описує реальний процес деформації краплі полімеру дисперсної фази у вхідній зоні. Так, розраховані величини q є функцією співвідношення в'язкостей змішуваних полімерів. При значеннях $\eta_{ПOM}/\mu_{СЕВА} > 1$ деформація погіршується, а при $h_{ПOM}/m_{СЕВА} < 1$ q спочатку зростає, а потім зменшується. Експериментально встановлене збільшення середнього діаметра ПОМ мікроволокон та падіння q при $h_{ПOM}/m_{СЕВА} = 0,65$ суперечить теоретичним висновкам. Можливою причиною цього є міграція крапель низьков'язкої дисперсної фази до стінок капіляру. Внаслідок цього центр потоку збіднюється, а більша доля дисперсної фази деформується на периферії, де величини q значно менші, ніж на осі потоку. На відміну від зазначеного, величини q розраховані на моделі (рис.3.3, табл.3.1) показують, що має місце закономірна залежність величин деформації від співвідношення в'язкостей: при $h_{ПOM}/m_{СЕВА} < 1$ q зростає, а при $h_{ПOM}/m_{СЕВА} > 1$ деформація зменшується.

Еластичність розплаву краплі полімеру дисперсної фази в розробленій моделі враховували через модуль пружності G . Визначення величини q свідчить, що запропонована теорія вірно описує вплив еластичності на ступінь деформації дисперсної фази: краплі з більшою еластичністю деформуються в меншій мірі, тобто вони більш стійкі до розтягу та зсуву.

Відомо, що крім співвідношення в'язкостей компонентів суміші, абсолютні величини в'язкостей також вносять визначальний вклад в мікрореологічні процеси при течії розплавів сумішей полімерів. Останнє

підтверджується результатами розрахунків за допомогою моделі величин деформації крапель дисперсної фази для випадків, коли $h/m = 1$ (табл.3.2).

Розроблена теорія свідчить, що чим менші значення абсолютних величин в'язкостей компонентів, тим більша їх деформація. Так, наприклад, при $0,5h/0,5m$ і $h = 8$ величина деформації складає 102,9, при $2h/2m$ всього 9,4. Як і слід було чекати, зменшення абсолютних величин η і μ призводить до росту деформації. Проте мінімальні величини в'язкостей обмежені здатністю полімерів до волокноутворення, а також посиленням процесів коалесценції.

Таблиця 3.2

Вплив абсолютних величин в'язкостей вихідних компонентів на величину деформації*

$h \cdot 10^{-3}, \text{м}$	q за умови:				
	$2\eta / 2\mu$	$1,5\eta / 1,5\mu$	η / μ	$0,75\eta / 0,75\mu$	$0,5\eta / 0,5\mu$
2	1,2	1,5	1,8	4,9	13,2
4	3,1	4,4	7,1	31,2	61,1
8	9,4	24,5	48,1	79,2	102,9

* за умови $\theta = 0,4$ радіан; $\eta / \mu = 1$

Очевидно, існують оптимальні значення в'язкостей вихідних полімерів, для яких при $h/m = 1$ q стає максимальним. Таким чином, вибір абсолютних величин в'язкостей полімерів суміші може бути одним із методів регулювання структуроутворення з метою одержання мікрволокон з діаметрами, меншими десятих долей мікрометра.

Відомо, що існує конкуруючий вплив реологічних властивостей змішуваних полімерів та складу суміші на мікроструктуру екструдатів. Розрахунки величини деформації за допомогою моделі при збільшенні концентрації полімеру дисперсної фази від 4 до 16 об'ємних % показали зростання величини q . Це узгоджується з класичною теорією, згідно з якою ступінь деформування зростає зі збільшенням об'ємної концентрації дисперсної

фази. Проте цей висновок на практиці не завжди підтверджується для сумішей полімерів, особливо у випадку специфічного волокноутворення, коли необхідно деформувати краплю в струмінь [23]. Крім того, теорія Старіти не враховує процесів коалесценції, які посилюються при збільшенні концентрації.

В класичній роботі Тейлора [24] на прикладі низькомолекулярних емульсій було встановлено, що деформація сферичних крапель однієї рідини в потоці іншої визначається співвідношенням їх в'язкостей та величиною поверхневого натягу ($\gamma_{\alpha\beta}$). Як уже відзначалось, першою теорією щодо високомолекулярних речовин була теорія, яка пов'язала міжфазний натяг, поряд з реологічними властивостями полімерів, з процесами структуроутворення в їх бінарних сумішах. Останнім часом теоретично і експериментально показано, що, змінюючи величину міжфазного поверхневого натягу, можна регулювати тип фазових структур в багатокомпонентних сумішах полімерів.

Термодинамічно поверхневий натяг визначається як робота утворення одиниці площі нової поверхні шляхом розтягнення старої. Знижуючи $\gamma_{\alpha\beta}$, можна зменшити роботу утворення нових поверхонь, тобто полегшити диспергування і деформацію компоненту дисперсної фази. Здатність краплі до деформації значною мірою визначається також її еластичністю. За умови рівноваги сил внутрішньої пружності та поверхневого натягу реологічна стала I_1 з (3.27) буде мати вигляд:

$$I_1 = \frac{-2ab^2 b_0 \frac{g_{ab}}{R_0} \frac{a}{a_0} q^{2/3}}{m(2 + 3ab^2 b_0 \frac{h}{m})} (1 - M\Phi)$$

де R_0 – початковий радіус краплі

Результати роботи описаної вище програми, що демонструють вплив величини поверхневого натягу на здатність краплі дисперсної фази до деформації наведені на рис. 3.7.

Як видно з рис. 3.7, створена модель реально описує процес деформації краплі полімеру дисперсної фази: зменшення $\gamma_{\alpha\beta}$ супроводжується ростом величини деформації. Розраховані результати добре узгоджуються з експериментальними даними по дослідженню структуроутворення в компатибілізованих сумішах полімерів. Зменшення міжфазного натягу в сумішах ПП/СПА за рахунок введення компатибілізаторів сприяє утворенню мікрОВОЛОКОН ПП в матриці СПА.

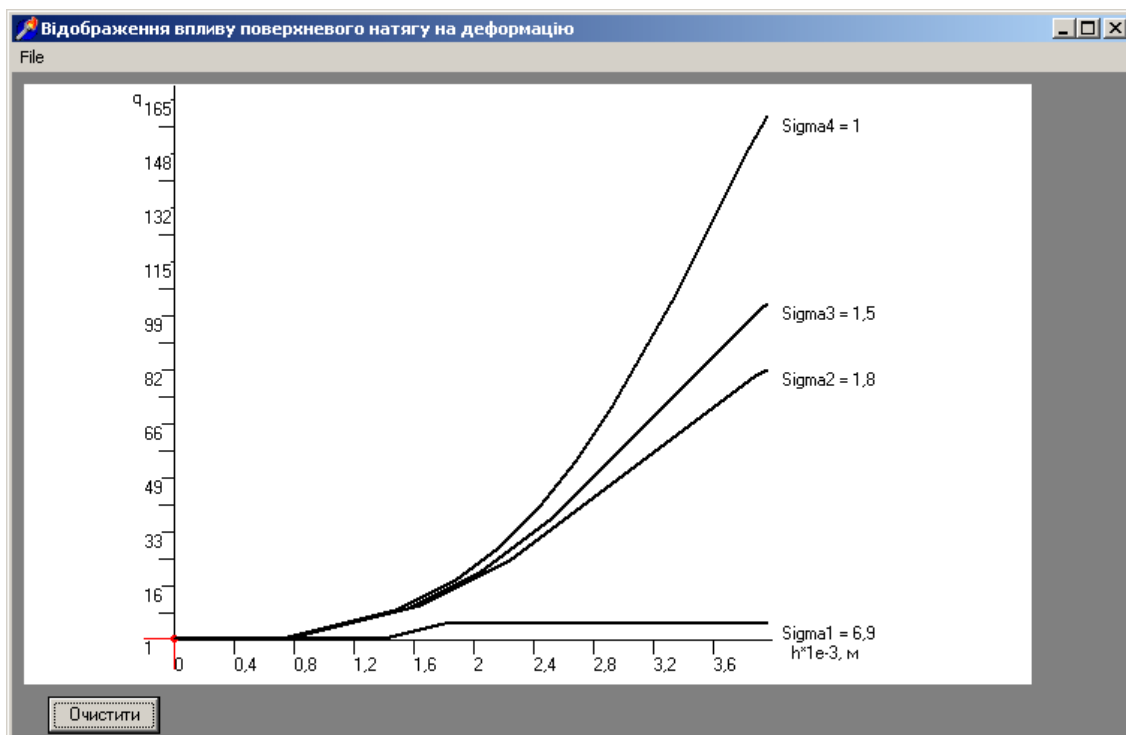


Рис. 3.7. Залежність величини деформації краплі дисперсної фази від глибини опускання та величини міжфазного натягу, за умови $\eta/\mu=1.0$.

Таким чином, з використанням структурно-континуального методу створена математична модель деформації краплі полімеру дисперсної фази при течії розплаву суміші полімерів із широкого резервуару у вузький. Модель дозволяє розраховувати величини деформації краплі в потоці, враховує вплив пружності, міжфазного натягу, в'язкості полімеру дисперсної фази на її здатність до деформації. Одержана система диференціальних рівнянь добре описує реальні процеси деформації крапель дисперсної фази при течії

розплавів сумішей полімерів у вхідній зоні формуючого отвору: величини q краплі є функцією співвідношення в'язкостей вихідних компонентів, їх абсолютних значень та об'ємної концентрації дисперсної фази; зі збільшенням пружності краплі зменшується її здатність до деформації; зниження величини міжфазного натягу підвищує ступінь деформації, що дає можливість отримувати більш тонкі волокна.

РОЗДІЛ 4. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ

4.1. Вступні положення

Даний розділ містить відомості з важливої теми „апроксимація функцій”. Задачі, пов’язані з цим, виникають, зокрема, при обробці експериментальних даних, а також в САПР при наближенні довільного контуру швейних лекал, деталей взуття, деталей машин та ін.

Апроксимація — синонім слова *наближення*. Походить від латинського *approximo* — наближаюсь. Означає заміну одних математичних об’єктів іншими, в тому чи іншому сенсі близькими до перших. Апроксимація функцій (а. ф.) — знаходження для даної функції f функції g з деякого певного класу (наприклад, з класу алгебраїчних або тригонометричних поліномів), в тому чи іншому аспекті близької до f . Існує багато різних варіантів задачі про а.ф., що залежать від того, які функції наближають, які функції використовують для наближення, як розуміють близькість g та f . Важливим методом побудови апроксимуючої функції є *інтерполяція*. Під інтерполяцією розуміють знаходження для даної функції f апроксимуючої, інакше, *інтерполяційної* функції, значення якої в заданих точках $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ співпадає із значеннями функції f . У більш загальному варіанті вимагається ще й співпадіння значень деяких похідних. У вузькому розумінні під інтерполяцією мають на увазі обчислення значень функції f за допомогою інтерполяційної функції g у точках x , що знаходяться в проміжку $[x_1, x_2]$ (таке розуміння відповідає латинським словам *inter* – між, *pole* – полюс, точка). Якщо таке обчислення виконується в точці x , що знаходиться зовні цього проміжку, то поруч із терміном інтерполяція використовується термін *екстраполяція* (від латинського *extra* — зовні). Найбільш широко в даний час використовуються такі інтерполяційні функції як алгебраїчні та тригонометричні поліноми та поліноміальні сплайни [2, 3, 4].

Поруч з інтерполяційними методами апроксимації широко використовуються і такі методи, що не вимагають співпадіння значень функцій f і g в окремих точках. Зокрема, до таких методів відноситься і так званий *метод найменших квадратів*, який відіграє виключну роль при обробці емпіричних даних.

4.2. Деякі методи апроксимації функцій

4.2.1 Постановка задачі інтерполяції

У найбільш загальному випадку задача інтерполювання полягає у побудові такої функції $F(x)$, яка у заданих точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ набуває значень $f(x_0), f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)$ заданої функції $f(x)$, а в інших точках заданого відрізка $[a, b]$ наближує її. Функція $F(x)$ називається *інтерполюючою* по відношенню до $f(x)$.

Нехай на відрізку $[a, b]$ задано $n + 1$ точку x_0, x_1, \dots, x_n , які називаються *вузлами інтерполяції*, і значення деякої функції $f(x)$ в цих точках

$$f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, \dots, f(x_n) = y_n. \quad (4.1)$$

Потрібно побудувати функцію $F(x)$, яка належить відомому класу і приймає у вузлах інтерполяції ті ж значення, що і $f(x)$, тобто таку, що

$$F(x_0) = y_0, F(x_1) = y_1, \dots, F(x_n) = y_n. \quad (4.2)$$

Геометрично це означає, що потрібно знайти криву $y = F(x)$ деякого визначеного типу, що проходить через задану систему точок $M_i(x_i, y_i)$ ($i = 0, 1, 2, \dots$) (рис. 4.1).

В такій загальній постановці задача може мати безліч розв'язків, або не мати жодного.

Однак ця задача стає однозначною, якщо замість довільної функції $F(x)$ шукати поліном $P_n(x)$ степені не більше n , що задовольняє умову (4.2), тобто таку, що $P_n(x_0) = y_0, P_n(x_1) = y_1, \dots, P_n(x_n) = y_n$.

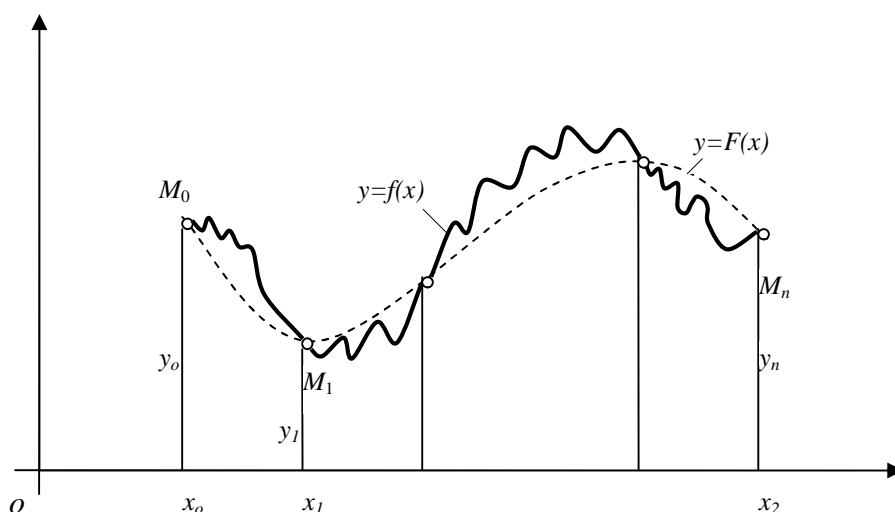


Рис. 4.1. Постановка задачі інтерполяції. $f(x)$ - задана; $F(x)$ - відповідна інтерполююча функція.

Отриману інтерполяційну формулу $y = F(x)$ зазвичай використовують для наближеного обчислення значень даної функції $f(x)$ для значень аргументу x , що відрізняється від вузлів інтерполяції. Така операція називається *інтерполюванням функції* $f(x)$. При цьому розрізняють інтерполювання у вузькому розумінні, коли $x \in [x_0, x_n]$, тобто значення x є проміжним між x_0 і x_n , та *екстраполювання*, коли $x \in \overline{[x_0, x_n]}$. В подальшому під терміном інтерполяція ми будемо розуміти як першу так і другу операцію.

4.2.2. Стандартна інтерполяція за Лагранжем

Для довільно заданих вузлів інтерполяції часто користуються так званою *інтерполяційною формулою Лагранжа*.

Нехай на відрізку $[a, b]$ дані $n+1$ різних значень аргумента: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ і відомі для функції $y = f(x)$ відповідні значення:

$$f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, \dots, f(x_n) = y_n.$$

Потрібно побудувати поліном $L_n(x)$ степені не вищій n , що має в заданих вузлах x_0, x_1, \dots, x_n ті самі значення, що і функція $f(x)$, тобто такий, що

$$L_n(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n) \quad (\text{рис. 4.2})$$

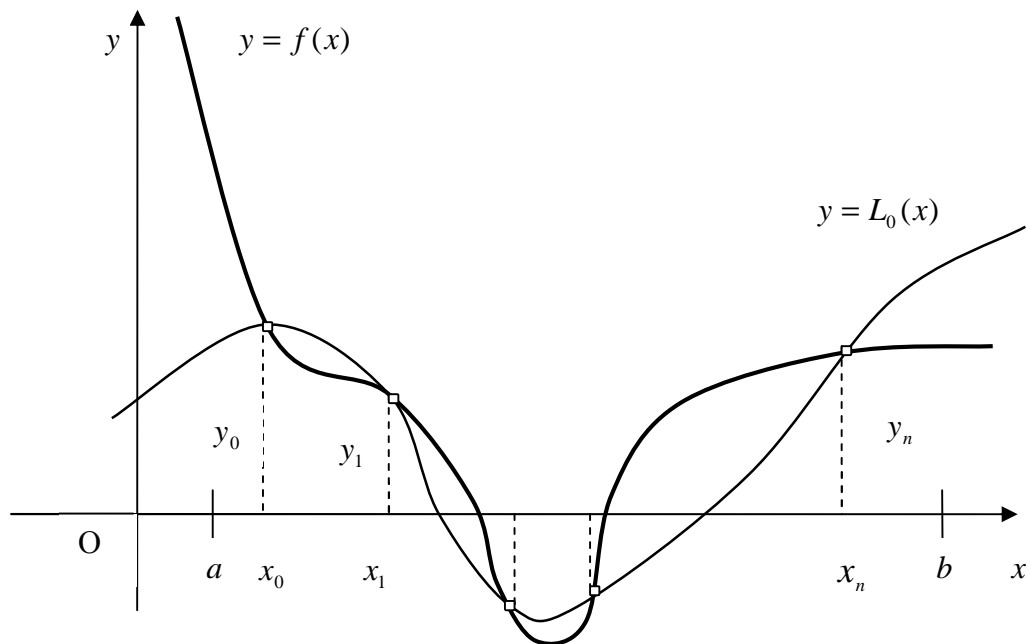


Рис. 4.2. Інтерполяційний поліном Лагранжа

Розв'яжемо спочатку часткову задачу: побудуємо поліном $p_i(x)$ такий

що

$$p_i(x_j) = 0 \quad \text{при} \quad j \neq i \quad \text{і} \quad p_i(x_i) = 1 \quad (\text{рис. 4.3})$$

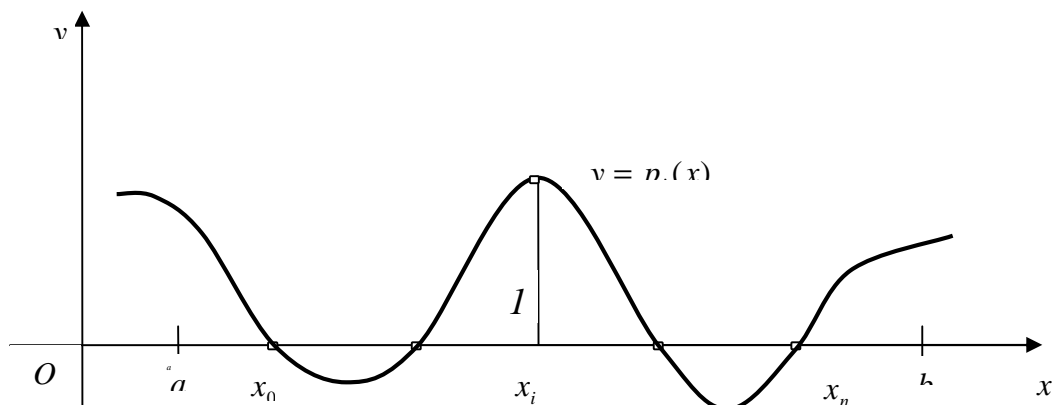


Рис. 4.3. Елементарний поліном Лагранжа.

Коротше ці умови можна записати наступним чином:

$$p_i(x_j) = d_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } j = i; \\ 0, & \text{якщо } j \neq i, \end{cases} \quad (4.3)$$

де d_{ij} - символ Кронекера.

Так як шуканий поліном перетворюється в нуль в n точках $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$, то він має вигляд

$$p_i(x) = C_i(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n), \quad (4.4)$$

де C_i - постійний коефіцієнт. Вважаючи $x = x_i$ в формулі (4.4) і враховуючи, що $p_i(x_i) = 1$, отримаємо:

$$C_i(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n) = 1.$$

Звідси:

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}.$$

Підставивши це значення у формулу (4.4), будемо мати:

$$p_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}. \quad (4.5)$$

Тепер перейдемо до розв'язання загальної задачі: до відшукування полінома $L_n(x)$, що задовольняє вказаним вище умовам $L_n(x_i) = y_i$.

Цей поліном має наступний вигляд:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n p_i(x) y_i. \quad (4.6)$$

Насправді, по-перше, очевидно, ступінь побудованого полінома $L_n(x)$ не вище n і, по-друге, за умови (4.3) маємо:

$$L_n(x_j) = \sum_{i=0}^n p_i(x_j) y_i = p_j(x_j) y_j = y_j \quad (j = 0, 1, \dots, n).$$

Підставивши в формулу (4.6) значення $p_i(x)$ із (4.5), отримаємо:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}. \quad (4.7)$$

Це і є *інтерполяційна формула Лагранжа*.

Часто при інтерполяції використовують інтерполяційні поліноми Лагранжа і Ньютона. Для періодичних функцій $f(x)$ з періодом $b - a$ ($x_1 = a, x_n = b$) наближуюча функція $g(x)$ може бути представлена тригонометричним поліномом [25]

$$LT_n(x) = A + \sum_{k=1}^n (a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad (4.8)$$

де A, a_k, b_k - коефіцієнти тригонометричного полінома (4.8). Завжди можна підібрати $2n+1$ коефіцієнтів A, a_k, b_k полінома n -го порядку так, щоб значення функції, що наближає, дорівнювали значенням $f(x_k)$ в $2n+1$ наперед заданих точках x_k проміжку $[a=0, b=2p]$ $2p$ - періодичної функції.

Використовуючи наведений вище вираз для інтерполяційного полінома Лагранжа, представимо тригонометричні поліноми на відрізку $[-p, p]$ для парної функції $f(x)$

$$LT_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{\cos x - \cos x_j}{\cos x_i - \cos x_j},$$

для непарної функції $f(x)$

$$LT_n(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \frac{\sin x}{\sin x_i} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\cos x - \cos x_j}{\cos x_i - \cos x_j}.$$

Враховуючи складність побудови інтерполяційних тригонометричних многочленів, відрізок $[a=0, b=2p]$ розбивається на вузли, віддалені один від одного на рівні відстані $h = 2p / (2n+1)$.

4.2.3 Векторна інтерполяція за Лагранжем

Нехай на відрізку $[a, b]$ задані точки t_k (інтерполяційні вузли) і вектори $v_k = \{x_k, y_k\}$ як значення деякої векторної функції $f(t)$ в цих точках, тобто

$$f(t_k) = v_k = \{x_k, y_k\}, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (4.9)$$

Треба знайти вектор-функцію $r(t) = \{x(t), y(t)\}$, $t \in [a, b]$, графік якої містить точки $M(t_j) = v_j = \{x_j, y_j\}$.

За умови неспівпадіння вузлів ($t_j \neq t_k$ при $j \neq k$, $j, k \in 0, n$) інтерполяційна задача (4.9) завжди має єдиний розв'язок

$$r(t) = P_n(t) = \sum_{s=0}^n p_s t^s \quad (4.10)$$

у класі P_n поліномів степені n від однієї змінної t з векторними коефіцієнтами p_s .

Знаходження полінома $P_n(x) = \sum_{s=0}^n p_s t^s$ зводиться до розв'язання завжди сумісної системи лінійних рівнянь

$$P_n(t_k) = \sum_{s=0}^n p_s t_k^s = v_k = \{x_k, y_k\}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n \quad (4.11)$$

відносно векторних коефіцієнтів $\{p_0, p_1, \dots, p_n\}$.

Але є інший шлях розв'язання цієї задачі - потрібно скористатись формулою Лагранжа для векторної інтерполяційної задачі:

$$P_n(t) = L(t) = \sum_{s=0}^n v_s L_s(t) = \sum_{s=0}^n \{x_s, y_s\}_s L_s(t), \quad (4.12)$$

де $L_s(t)$ – елементарні поліноми Лагранжа, що визначаються за формулами:

$$L_s(t_k) = \frac{(t - t_0) \dots (t - t_{s-1})(t - t_{s+1}) \dots (t - t_n)}{(t_s - t_0) \dots (t_s - t_{s-1})(t_s - t_{s+1}) \dots (t_s - t_n)}, \quad s = 0, n. \quad (4.13)$$

Процедури, необхідні для знаходження полінома Лагранжа для розв'язання векторної інтерполяційної задачі на площині, створені мовою Object Pascal, наведено у додатку 12. В середовищі DELPHI розроблено програму, яка з використанням наведених процедур здійснює побудову інтерполяційної кривої за заданими користувачем (з файлу) вузлами. Вигляд відповідного файлу наведено на рис. 4.4.

Структура файлу наступна: перший рядок – кількість вузлів; другий рядок – значення параметру t , третій та четвертий рядки – відповідні значення x та y .

```
inp - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
4
-3 -2 -1 1
-1 1 -6 -1
4 -1 3 1
```

Рис. 4.4. Вхідні дані для задачі інтерполяції

Результати роботи програми для введених даних наведено на рис. 4.5.

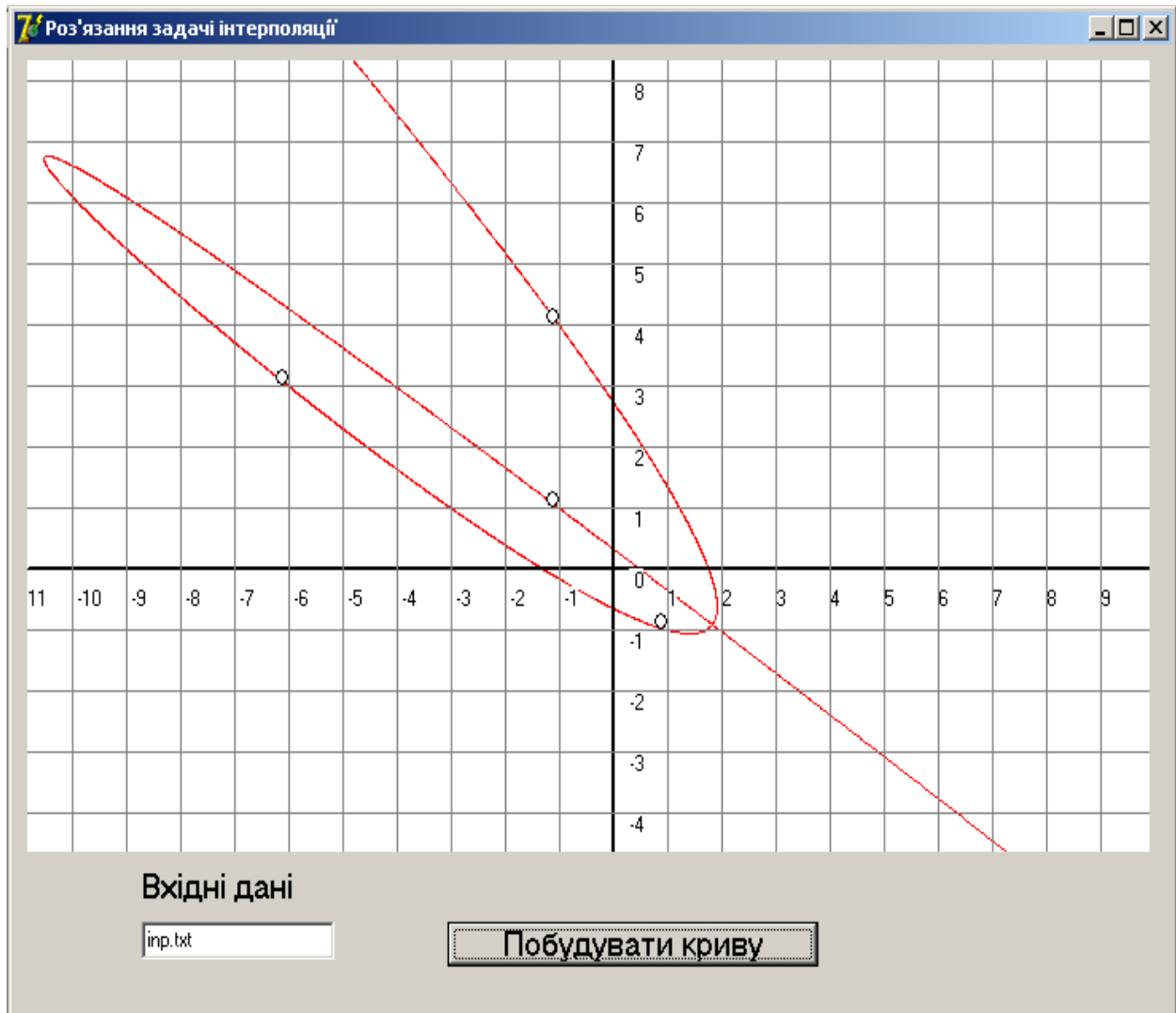


Рис. 4.5. Результати роботи програми - побудова інтерполяційної кривої.

Крім того, для зручності користувача передбачено виведення розрахованих елементарних поліномів Лагранжа у вихідний файл. Вигляд відповідного файлу наведено на рис. 4.6.

```

out - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
l [0] = 1/-8*(t-(-2))(t-(-1))(t-(1))
l [1] = 1/3*(t-(-3))(t-(-1))(t-(1))
l [2] = 1/-4*(t-(-3))(t-(-2))(t-(1))
l [3] = 1/24*(t-(-3))(t-(-2))(t-(-1))

```

Рис. 4.6. Елементарні поліноми Лагранжа

4.2.4 Сплайн-інтерполяція

В звичайній поліноміальній інтерполяції зміна $f(x)$ поблизу якого-небудь вузла впливає на зміну $f(x)$ по всій кривій, що якісно невірно описує фізичні явища, які лежать в основі нелінійності інтерпольованої функції. Нерідко із збільшенням числа вузлів похибка такої інтерполяції не лише не зменшується, але і починає зростати. Апаратом наближення функцій, позбавленим цих недоліків, є сплайни - функції, що складаються з різних многочленів, які наближають функцію на фіксованих ділянках відрізка $[a, b]$. Сплайн-інтерполяція відноситься до багатоінтервальної інтерполяції і забезпечує не лише рівність $f(x_i) = g(x_i)$ у вузлах інтерполяції, але і неперервність заданого числа похідних на границях конкретних інтервалів. Перевагою локально заданих сплайнів є опис властивостей функції $f(x)$ на кожному окремому інтервалі незалежно від її властивостей на інших інтервалах.

На практиці найширше використовуються сплайни невисокого степеня - параболічні і кубічні. Вони представляють інтерполюючу функцію у вигляді полінома другого або третього степеня.

Сплайн-функція $S_m(\Delta n; x)$ ($m = 2, 3$) визначена на відрізку $[a, b]$ і збігається на відрізках $[x_i, x_{i+1}]$ з деякими алгебраїчними многочленами степеня не вище m . Сплайн-функція має на відрізку $[a, b]$ неперервну $(m - 1)$ похідну. Сітка $\Delta n: a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ розбиває відрізок $[a, b]$ на часткові відрізки. Якщо сплайн-функція має на відрізку $[a, b]$ неперервну $(m - k)$ -у похідну

($k \geq 1$), а ($m - k + 1$)-а похідна у вузлах сплайна має розрив, то говорять, що сплайн має дефект порядку k .

Загальний вираз для сплайн-функції має вигляд [25]

$$S_m(\Delta_n; x) = P_{m-1}(x) + \sum_{k=0}^{n-1} c_k (x - x_k)_+^m, \quad (4.14)$$

де c_k - дійсні числа, $\langle \dots \rangle$ - алгебраїчний многочлен степеня не вище $m - 1$;
 $(x - x_k)_+^m = [\max(0, x - x_k)]^m$.

Для параболічного сплайна потрібні дві додаткові краєві умови

$$\begin{aligned} S_2'(a) &= a_n, S_2'(b) = b_n, \\ S_2''(a) &= A_n, S_2''(b) = B_n. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Якщо функція $f(x)$ має першу і другу похідні на відрізку $[a, b]$, то значення системи (4.15) можуть бути визначені з наступної системи рівнянь

$$\begin{aligned} a_n &= f'(a), b_n = f'(b), \\ A_n &= f''(a), B_n = f''(b). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Для параболічного сплайну отримаємо

$$\begin{aligned} S_2(x) &= f(x_i) + m_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2, \\ c_i &= \frac{m_{i+1} - m_i}{2h_i} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i(\bar{h}_i - h_i)} + \frac{m_{i+1} + m_i}{2(\bar{h}_i - h_i)}, \\ h_i &= x_{i+1} - x_i, \bar{h}_i = x_{i+1} - \bar{x}_{i+1}, m_i = S_2'(x_i), \\ & i = 0, \dots, n, \end{aligned} \quad (4.17)$$

де \bar{x}_i - координата вузла сплайна або точка можливого розриву другої похідної;
 x_i - координата інтерполяції.

На практиці частіше розглядаються випадки, коли координати вузлів сплайна розташовуються посередині, між вузлами інтерполяції

$$\bar{x}_i = x_i + \frac{x_{i+1} - x_i}{2}, \quad i = 0, \dots, n.$$

Для кубічного сплайна на часткових відрізках $[x_i, x_{i+1}]$ загальна формула, з урахуванням (4.14), має вигляд

$$S_3(x) = \frac{1}{6h_i} [m_i(x_{i+1} - x)^3 + m_{i+1}(x - x_i)^3] + \frac{1}{h_i} \left\{ \left[f(x_i) - \frac{m_i h_i^2}{6} \right] (x_{i+1} - x) + \left[f(x_{i+1}) - \frac{m_{i+1} h_i^2}{6} \right] (x - x_i) \right\}, \quad (4.18)$$

$$h_i = x_{i+1} - x_i, \quad m_i = f''(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

де n - число вузлів.

При інтерполяції $f(x_i) = S_3(x_i)$ отримаємо систему лінійних рівнянь для визначення m_i

$$h_i m_i + 2(h_i + h_{i+1}) m_{i+1} + h_{i+1} m_{i+2} = 6 \left[\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{h_{i+1}} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i} \right], \quad (4.19)$$

$$i = 1, 2, \dots, n.$$

Систему лінійних рівнянь (4.19) необхідно доповнити граничними умовами

$$\begin{aligned} S_3'(a) &= a_n, \quad S_3'(b) = b_n, \\ S_3''(a) &= A_n, \quad S_3''(b) = B_n. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Якщо функція $f(x)$ має відповідні похідні, то система (4.20) визначається з (4.16). Якщо значення другої похідної рівні $m_1 = 0$, $m_n = 0$, то отримуємо нормальні сплайн-функції. У разі, коли $m_1 = m_n$ маємо періодичні сплайн-функції.

Процедури, необхідні для знаходження сплайн-функції, створені мовою Object Pascal, наведено у додатку 11. В середовищі DELPHI розроблено програму, яка з використанням наведених процедур здійснює побудову сплайн-кривої за заданими користувачем (з файлу) вузлами. Вигляд відповідного файлу наведено на рис. 4.7.

Структура файлу наступна: перший рядок – кількість вузлів; далі у стовпчиках наведено відповідні значення x та y .

```
inp.txt - Блокнот
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
7
-10 -1
-5 4
-2 -10
2 2
4 8
8 3
15 7
```

Рис. 4.7. Вхідні дані для задачі знаходження кубічного сплайну

Результати роботи програми для введених даних наведено на рис. 4.8.

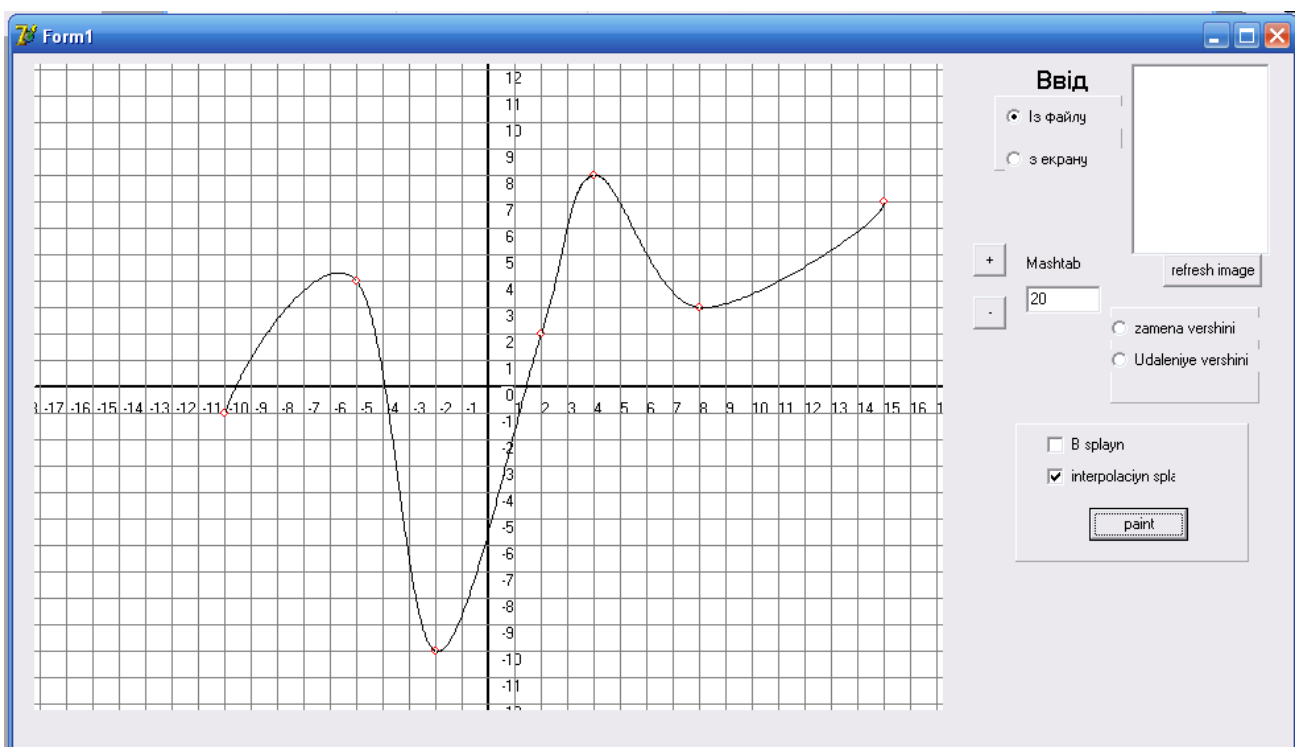


Рис. 4.8. Результати роботи програми - побудова сплайн-кривої.

4.2.5 Апроксимація за методом найменших квадратів

При проведенні теоретичних і експериментальних досліджень часто виникає необхідність знаходження якомога простішої емпіричної формули, яка добре відображає фізичні властивості досліджуваного процесу. Опис зв'язку між змінними x та y на базі деякої кількості N пар відомих значень x_i і y_i , виконується з використанням тих чи інших методів апроксимації залежностей (фізичних законів). Названі методи у даний час є виключно різноманітними [26-

28]. Наприклад, мова може йти про апроксимацію у сенсі деякої метрики за допомогою конкретних видів функцій. Інколи обрання конкретного методу диктується фізичним змістом задачі, в інших випадках на перше місце можуть вийти міркування простоти викладок.

У даній роботі ми зупинимося лише на апроксимації функцій з використанням чи не найпоширенішого у прикладних дослідженнях методу апроксимації — методу найменших квадратів. Аналіз методу почнемо з апроксимації за допомогою лінійної залежності. На рис. 4.9 показаний розподіл пар значень і графік лінійної апроксимуючої залежності.

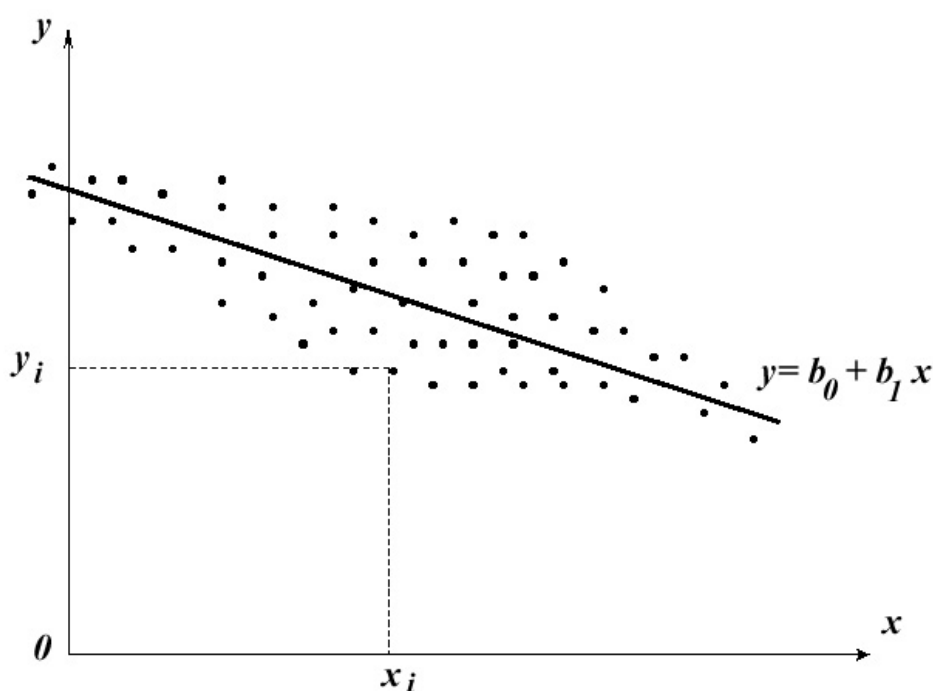


Рис. 4.9. Лінійна апроксимація

Тут відмічені точки декартової площини (X, Y) відповідають парам відомих значень (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, N$. Геометрична суть процесу лінійної апроксимації методом найменшим квадратів полягає в тому, щоб провести пряму $y(x) = b_0 + b_1 x$ так, щоб величини відхилень $y(x_i) - y_i$, $i = 1, \dots, N$ відповідали умові

$$U := \sum_{i=1}^N U_i = \min, \quad (4.21)$$

де $U_i = (y_i - b_1 x_i - b_0)^2$, $i = 1, \dots, N$.

Для виконання умови (4.21) знайдемо відповідні частинні похідні

$$\frac{\partial U}{\partial b_0}, \frac{\partial U}{\partial b_1}, i=1...N. \quad (4.22)$$

Визначимо значення даних частинних похідних

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_1}{\partial b_0} &= -2[y_1 - b_1 x_1 - b_0], \quad \frac{\partial U_1}{\partial b_1} = \\ &= -2[y_1 - b_1 x_1 - b_0]x_1 = -2[y_1 x_1 - b_1 x_1^2 - b_0 x_1], \\ \frac{\partial U_2}{\partial b_0} &= -2[y_2 - b_1 x_2 - b_0], \quad \frac{\partial U_2}{\partial b_1} = \\ &= -2[y_2 - b_1 x_2 - b_0]x_2 = -2[y_2 x_2 - b_1 x_2^2 - b_0 x_2], \end{aligned} \quad (4.23)$$

.....

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_N}{\partial b_0} &= -2[y_N - b_1 x_N - b_0], \quad \frac{\partial U_N}{\partial b_1} = \\ &= -2[y_N - b_1 x_N - b_0]x_N = -2[y_N x_N - b_1 x_N^2 - b_0 x_N] \end{aligned}$$

З урахуванням (4.21) маємо

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial U}{\partial b_0} = 0, \quad \sum_{i=1}^N \frac{\partial U}{\partial b_1} = 0. \quad (4.24)$$

Розв'язуючи спільно (4.23) і (4.24), отримаємо два рівняння для визначення постійних коефіцієнтів в апроксимаційному лінійному рівнянні

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^N y_i &= b_1 \sum_{i=1}^N x_i + N b_0, \\ \sum_{i=1}^N x_i y_i &= b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + b_0 \sum_{i=1}^N x_i. \end{aligned} \right\} \quad (4.25)$$

Розв'язуючи систему двох лінійних рівнянь (4.25) відносно постійних коефіцієнтів лінійного рівняння апроксимації, отримаємо

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N y_i - b_1 \sum_{i=1}^N x_i \right) \\ b_1 &= \frac{\sum_{i=1}^N y_i \sum_{i=1}^N x_i - N \sum_{i=1}^N x_i y_i}{\left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2 - N \sum_{i=1}^N x_i^2}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Обчислення середньоквадратичної похибки дозволяє якісно оцінювати міру наближення точок x_i, y_i до апроксимуючої прямої. Величина d^2 середньоквадратичної похибки визначається за формулою

$$d^2 = \left[\sum_{i=1}^N y_i^2 - b_0 \sum_{i=1}^N y_i - b_1 \sum_{i=1}^N x_i y_i \right]$$

(див., наприклад, [2])

Більш загальний випадок апроксимації пар значень x_i, y_i забезпечується за допомогою поліноміальної регресії вигляду

$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m. \quad (4.27)$$

При $m = N$ має місце звичайна інтерполяція (значення $y(x)$ при $x = x_i$ точно збігаються з певним y_i). При $m < N$ такого збігу в загальному випадку немає.

Суть поліноміальної апроксимації за методом найменших квадратів полягає, з урахуванням (4.27), у виконанні наступної умови

$$U := \sum_{i=1}^N U_i = \min, \quad (4.28)$$

де $U_i = (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m)^2, i = 1, \dots, N$.

Для мінімізації величини U визначимо значення частинних похідних по відповідних коефіцієнтах полінома (4.27)

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial U_1}{\partial a_0} &= -2[y_1 - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_1^2 - \dots - a_m x_1^m] \\ \frac{\partial U_1}{\partial a_1} &= -2[y_1 - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_1^2 - \dots - a_m x_1^m] x_1, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \frac{\partial U_1}{\partial a_m} &= -2[y_1 - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_1^2 - \dots - a_m x_1^m] x_1^m, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \frac{\partial U_N}{\partial a_0} &= -2[y_N - a_0 - a_1 x_N - a_2 x_N^2 - \dots - a_m x_N^m] \\ \frac{\partial U_N}{\partial a_1} &= -2[y_N - a_0 - a_1 x_N - a_2 x_N^2 - \dots - a_m x_N^m] x_N, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \frac{\partial U_N}{\partial a_m} &= -2[y_N - a_0 - a_1 x_N - a_2 x_N^2 - \dots - a_m x_N^m] x_N^m. \end{aligned} \right\} \quad (4.29)$$

З урахуванням (4.28), отримаємо

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial U_i}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial U_i}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial U_i}{\partial a_2} = \dots = \sum_{i=1}^N \frac{\partial U_i}{\partial a_m} = 0.$$

Використовуючи останню систему рівнянь можна знайти лінійну систему рівнянь для визначення постійних коефіцієнтів в поліноміальному апроксимуючому співвідношенні (4.27)

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^N y_i &= Na_0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^2 + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^m, \\ \sum_{i=1}^N x_i y_i &= a_0 \sum_{i=1}^N x_i + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^3 + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+1}, \\ \sum_{i=1}^N x_i^2 y_i &= a_0 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^4 + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+2}, \\ &\dots\dots\dots \\ \sum_{i=1}^N x_i^m y_i &= a_0 \sum_{i=1}^N x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{2m}. \end{aligned} \right\} \quad (4.30)$$

Систему лінійних рівнянь (4.30) можна розв'язати, наприклад, методом Гауса (див. розд. 1.2.2).

Сучасні комп'ютерні програми дозволяють обчислювати коефіцієнти апроксимуючих поліномів з достатніми для практичних застосувань значеннями степенів m ; існують також програми автоматичного вибору степеня апроксимуючого полінома.

4.3 Деякі математичні моделі прикладної механіки, що реалізуються за допомогою чисельних методів

Приклад 1. При теоретичному дослідженні процесу взаємодії нитки з направляючою поверхнею великої кривизни визначають залежність натягнення ведучої гілки від величини радіусу кривизни [1].

В результаті приходимо до трансцендентного рівняння [1], методи розв'язання якого описані вище. Як було встановлено, для кожного фіксованого значення радіусу кривизни циліндричної направляючої R , для конкретного матеріалу і структури нитки отримаємо певне значення натягу ведучої гілки P_1 .

Отримані пари значень R_i, P_{i1} апроксимувалися поліномом (4.27) з використанням методу найменших квадратів.

При розрахунках степінь полінома визначалася автоматично. Значення коефіцієнтів $a_0 \dots a_m$ полінома визначалися залежно від натягу веденої гілки нитки (від 5 до 40 сН), від кута обхвату ниткою циліндричної направляючої (змінювався в межах від 1,57 до 3,14 рад.). Результати розрахунку наведено в таблиці 4.1.

Таблица 4.1.

Коефіцієнти апроксимуючого полінома

Натяг веденої нитки, сН	Кут обхвату рад.	Значення коефіцієнтів апроксимуючого полінома $a(1, \dot{I})$ - капронова комплексна нитка; $a(2, \dot{I})$ – вискозная комплексная нить; $a(3, \dot{I})$ - х/б пряжа; $a(4, \dot{I})$ - шерстяная пряжа; $a(5, \dot{I})$ - вискозная штапельная пряжа
1	2	3
5	1,57	$a(1,0)=6,8; a(1,1)=-0,5; a(1,2)=0,2$ $a(2,0)=6,4; a(2,1)=-0,2; a(2,2)=0,1$ $a(3,0)=6,1; a(3,1)=0,1; a(3,2)=-0,01$ $a(4,0)=6,6; a(4,1)=-0,6; a(4,2)=0,2$ $a(5,0)=5,9; a(5,1)=0,1; a(5,2)=-0,1$
	3,14	$a(1,0)=8,9; a(1,1)=-1,1; a(1,2)=0,6$ $a(2,0)=7,9; a(2,1)=-0,3; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=7,7; a(3,1)=0,2; a(3,2)=-0,01$ $a(4,0)=8,2; a(4,1)=-1,0; a(4,2)=0,4;$ $a(5,0)=7,3; a(5,1)=0,2; a(5,2)=-0,01$
10	1,57	$a(1,0)=13,9; a(1,1)=-1,0; a(1,2)=0,3; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=13; a(2,1)=-0,5; a(2,2)=0,2; a(2,3)=-0,02$ $a(3,0)=13,7; a(3,1)=-0,9; a(3,2)=0,3;$ $a(4,0)=14,2; a(4,1)=-2,1; a(4,2)=0,6; a(4,3)=0,1$ $a(5,0)=13,4; a(5,1)=-1,6; a(5,2)=0,7; a(5,3)=-0,1$
	3,14	$a(1,0)=17,1; a(1,1)=-0,9; a(1,2)=0,3$ $a(2,0)=15,7; a(2,1)=-0,3; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=17,3; a(3,1)=-1,1; a(3,2)=0,2; a(3,3)=0,1$ $a(4,0)=17,1; a(4,1)=-2,6; a(4,2)=0,7; a(4,3)=0,2$ $a(5,0)=16,3; a(5,1)=-1,4; a(5,2)=0,5$
15	1,57	$a(1,0)=20,2; a(1,1)=-0,7; a(1,2)=0,1$ $a(2,0)=18,9; a(2,1)=-0,1; a(2,2)=0,01$ $a(3,0)=20,3; a(3,1)=-0,8; a(3,2)=0,2$ $a(4,0)=19,9; a(4,1)=-1,2; a(4,2)=0,2$ $a(5,0)=20,6; a(5,1)=-2,2; a(5,2)=0,8; a(5,3)=-0,1$
	3,14	$a(1,0)=24,7; a(1,1)=-0,5; a(1,2)=0,1; a(1,3)=-0,01$ $a(2,0)=22,6; a(2,1)=0,2$ $a(3,0)=25,7; a(3,1)=-0,9; a(3,2)=0,2$ $a(4,0)=23,8; a(4,1)=-1,3; a(4,2)=0,3$ $a(5,0)=26,0; a(5,1)=-3,7; a(5,2)=1,3; a(5,3)=-0,1$

20	1,57	$a(1,0)=27,2; a(1,1)=-1,6; a(1,2)=0,5; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=25,1; a(2,1)=-0,2; a(2,2)=0,02$ $a(3,0)=27,2; a(3,1)=-1,0; a(3,2)=0,2$ $a(4,0)=26,9; a(4,1)=-2,2; a(4,2)=0,7$ $a(5,0)=28,0; a(5,1)=-3,2; a(5,2)=1,1; a(5,3)=-0,2$
	3,14	$a(1,0)=33,4; a(1,1)=-1,9; a(1,2)=0,8; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=30,2; a(2,1)=-0,1; a(2,2)=0,1$ $a(3,0)=34,7; a(3,1)=-1,8; a(3,2)=0,6; a(3,3)=-0,1$ $a(4,0)=32,0; a(4,1)=-2,6; a(4,2)=0,8$ $a(5,0)=34,3; a(5,1)=-3,9; a(5,2)=1,4; a(5,3)=-0,2$
25	1,57	$a(1,0)=34,1; a(1,1)=-2,3; a(1,2)=0,8; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=32,2; a(2,1)=-1,4; a(2,2)=0,5; a(2,3)=-0,1$ $a(3,0)=34,8; a(3,1)=-2,4; a(3,2)=0,7; a(3,3)=-0,1$ $a(4,0)=33,9; a(4,1)=-3,4; a(4,2)=1,1; a(4,3)=-0,1$ $a(5,0)=34,9; a(5,1)=-3,6; a(5,2)=1,1; a(5,3)=-0,2$
	3,14	$a(1,0)=41,7; a(1,1)=-3,1; a(1,2)=1,3; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=38,2; a(2,1)=-1,2; a(2,2)=0,6; a(2,3)=-0,1$ $a(3,0)=45,3; a(3,1)=-5,7; a(3,2)=2,2; a(3,3)=-0,2$ $a(4,0)=41,1; a(4,1)=-5,6; a(4,2)=2,1; a(4,3)=-0,2$ $a(5,0)=42,7; a(5,1)=-4,4; a(5,2)=1,4; a(5,3)=-0,2$
30	1,57	$a(1,0)=40,9; a(1,1)=-2,9; a(1,2)=1,0; a(1,3)=-0,2$ $a(2,0)=37,9; a(2,1)=-0,8; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=42,2; a(3,1)=-3,3; a(3,2)=1,1; a(3,3)=-0,2$ $a(4,0)=40,4; a(4,1)=-3,5; a(4,2)=1,1; a(4,3)=-0,2$ $a(5,0)=40,6; a(5,1)=-2,3; a(5,2)=0,5$
	3,14	$a(1,0)=49,3; a(1,1)=-2,9; a(1,2)=1,2; a(1,3)=-0,1$ $a(2,0)=44,8; a(2,1)=-0,4; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=50,1; a(3,1)=-0,9; a(3,2)=0,2$ $a(4,0)=47,4; a(4,1)=-3,8; a(4,2)=1,3; a(4,3)=-0,2$ $a(5,0)=50,5; a(5,1)=-4,5; a(5,2)=1,4; a(5,3)=-0,2$
35	1,57	$a(1,0)=47,6; a(1,1)=-3,5; a(1,2)=1,2; a(1,3)=-0,2$ $a(2,0)=44,2; a(2,1)=-1,0; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=39,6; a(3,1)=-4,5; a(3,2)=1,5; a(3,3)=-0,2$ $a(4,0)=47,1; a(4,1)=-4,3; a(4,2)=1,4; a(4,3)=-0,2$ $a(5,0)=38,3; a(5,1)=-4,2; a(5,2)=1,3; a(5,3)=-0,2$
	3,14	$a(1,0)=57,1; a(1,1)=-3,5; a(1,2)=1,4; a(1,3)=-0,2$ $a(2,0)=52,2; a(2,1)=-0,6; a(2,2)=0,2$ $a(3,0)=57,1; a(3,1)=-0,2; a(3,2)=0,02$ $a(4,0)=55,2; a(4,1)=-4,8; a(4,2)=1,7; a(4,3)=-0,3$ $a(5,0)=58,4; a(5,1)=-4,7; a(5,2)=1,4; a(5,3)=-0,2$
40	1,57	$a(1,0)=54,2; a(1,1)=-3,8; a(1,2)=1,3; a(1,3)=-0,2$ $a(2,0)=50,5; a(2,1)=-1,2; a(2,2)=0,3$ $a(3,0)=56,7; a(3,1)=-5,1; a(3,2)=1,7; a(3,3)=-0,2$ $a(4,0)=53,9; a(4,1)=-5,2; a(4,2)=1,7; a(4,3)=-0,3$ $a(5,0)=54,9; a(5,1)=-4,6; a(5,2)=1,4; a(5,3)=-0,2$
	3,14	$a(1,0)=64,8; a(1,1)=-3,8; a(1,2)=1,5; a(1,3)=-0,2$ $a(2,0)=60,3; a(2,1)=-2,1; a(2,2)=0,9; a(2,3)=-0,1$ $a(3,0)=71,5; a(3,1)=-7,3; a(3,2)=2,4; a(3,3)=-0,2$ $a(4,0)=63,7; a(4,1)=-6,8; a(4,2)=2,3; a(4,3)=-0,2$ $a(5,0)=68,4; a(5,1)=-8,4; a(5,2)=2,8; a(5,3)=-0,1$

Приклад № 2. Апроксимація контуру швацьких лекал, деталей взуття.

Вдосконалення швацького і взуттєвого виробництв нерозривно пов'язане з впровадженням програми комплексної механізації і автоматизації підготовчо-розкрійного виробництва. Одними з основних завдань автоматизації підготовчо-розкрійного виробництва є задачі: отримання інформації про контури деталей, лекал; перетворення даної інформації в цифрову форму; вдосконалення форми представлення інформації; цифровий опис контуру лекал і деталей конкретних виробів. В рамках даної теми зупинимося на описі методів перетворення інформації про контури лекал швацьких виробів і деталей взуття. Після отримання вихідної інформації постає задача наближення контуру лекала з використанням методів інтерполяції, екстраполяції і апроксимації. Великий внесок у розв'язання даної задачі належить д.т.н., професорові Скатерному В.А., к.т.н. Бокию В.І. [29,30].

Специфіка даної проблеми полягає в розгляді контурної апроксимації і кодуванні фігур шляхом покриття їх площі системою простих геометричних фігур. Тут можна виділити наступні способи.

Радіусографічний спосіб полягає в апроксимації контура деталі або лекала на фіксованих інтервалах дугами кола або відрізками прямих ліній. Основною задачею при даному способі є оптимальний вибір кількості фіксованих ділянок. За даними професора Скатерного В.А. для устілок число таких фіксованих ділянок знаходиться в межах від 12 до 18, для союзок від 16 до 20.

Кусково-лінійна апроксимація дозволяє наближати форму лекала або деякої деталі відрізками прямих, довжина яких залежатиме від кривизни контуру на фіксованій ділянці і прийнятій погрішності апроксимації. Отриманий вписаний багатокутник матиме вершини, розташовані на контурі лекала. До недоліків даного способу слід віднести складнощі, що виникають при оптимізації розміщення лекал, коли потрібно дотримувати контурні умови неперетинання деталей між собою.

Даного недоліку удається уникнути, якщо контур деталі апроксимувати шляхом покриття її площі простими геометричними фігурами. До даних фігур

можна віднести трикутник, коло, трапецію. Лекала прямолінійного профілю доцільно покривати трикутниками або трапеціями, а деталі криволінійного профілю покривати системою кіл. Покриття здійснюється таким чином, що точки дотику розташовуються на контурі лекала, а відстань між точками дотику двох сусідніх фігур не перевищує заданої величини похибки. Кількість апроксимуючих геометричних фігур залежить від складності контуру деталі, необхідної точності.

Наступним способом апроксимації контуру лекала або деталі взуття є координатно-трапецеїдальний спосіб. Його суть полягає в тому, що фіксована відносно нерухомої координатної системи деталь покривається сімейством прямих паралельних ліній. Для спрощення викладень дані лінії мають бути паралельні одній з координатних осей. З'єднання точок перетину даних прямих ліній з контуром деталі або лекала дозволяє отримати сімейство трапецій. Основною вимогою при орієнтації (розміщення) лекала відносно нерухомих координатних осей є виключення перетину контуру більш ніж в двох точках. Похибка апроксимації при координатно-трапецеїдальному способі залежить від відстані між проведеними паралельними лініями. Очевидно, що при складному профілі лекала даний спосіб необхідно застосовувати на фіксованих інтервалах, де кривизна контуру різна. Для забезпечення необхідної точності при апроксимації на кожному конкретному фіксованому інтервалі відстань між паралельними прямими вибирається залежно від величини кривизни.

Апроксимація контурів лекал представляє собою найприйнятніший метод при наближенні дискретно заданого контуру. При цьому апроксимуюча крива складного контуру повинна складатися з мінімальної кількості відрізків. Найбільш універсальними методами апроксимації (мінімаксною, середньоквадратичною або наближення в середньому), придатними для обчислення відрізків будь-якого вигляду, є методи пошуку екстремуму.

Методами мінімаксної апроксимації є методи лінійного і опуклого програмування. Для побудови апроксимуючої функції можливо застосування методу ґраткової апроксимації мінімуму.

Апроксимація складних контурів швацьких лекал і деталей взуття відрізняється від класичної задачі апроксимації тим, що потрібно побудувати наближуючи криву, віддалену від контуру не більше ніж на задане відхилення. Наступною особливістю є те, що величина відхилення оцінюється не по координатних осях, а по нормалі до однієї з них. І головною відмінною рисою є вимога до безперервності апроксимуючої кривої.

Алгоритми для реалізації даної задачі характеризуються цілим рядом ознак: виглядом апроксимуючої функції, способами оцінки відхилень, початковими координатами апроксимуючого відрізка.

РОЗДІЛ 5. ОЦІНЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (МНК) І ЛІНІЙНИЙ РЕГРЕСІЙНИЙ АНАЛІЗ

5.1 Загальна лінійна модель та оцінювання її параметрів за МНК.

Досить часто задача математичного моделювання явища або процесу полягає у встановленні залежності між однією групою змінних (вони називаються *незалежними змінними* або *змінними-факторами*, інакше, *регресорами*) та іншою групою змінних (*залежних змінних*, їх ще називають *предикторами* або *функціями відгуку*). Інколи конкретно обраний тип зазначеної залежності є надійно обґрунтованим відповідними теоретичними міркуваннями, як це, наприклад має місце для математичних моделей теоретичної фізики. В інших випадках відповідні міркування відсутні або не є надійними. Але у будь-якому разі виникають задачі оцінки параметрів обраної моделі, перевірки її адекватності і, у випадку позитивного вирішення останнього питання, застосування побудованої моделі до тих питань, для яких вона і була побудована, наприклад, для прогнозування значень залежної змінної при тих чи інших значеннях незалежної змінної. Методи розв'язання вказаних задач становлять основи важливої частини математичної статистики, що має назву *регресійний аналіз*. В свою чергу, підрозділ останнього, що розглядає *лінійні* моделі вищезгаданих взаємозв'язків, має назву *лінійний регресійний аналіз*. Зауважимо, що під лінійними моделями маються тут на увазі такі співвідношення між залежними та незалежними змінними, що є лінійними відносно невідомих параметрів цих залежностей.

Для розв'язання зазначених задач потрібно мати експериментальні (статистичні) дані — вибірки сумісних значень залежних і незалежних змінних.

Припустимо, що залежна змінна y з точністю до випадкової адитивної похибки e може бути представлена як лінійна комбінація введених вище факторних змінних (незалежних змінних, регресорів) x_0, x_1, \dots, x_{p-1} :

$$y = b_0 x_0 + \dots + b_{p-1} x_{p-1} + e, \quad (5.1)$$

де коефіцієнти b_0, \dots, b_{p-1} є невідомими. Для конкретності вважатимемо надалі, що змінні x_0, x_1, \dots, x_{p-1} та y набувають дійсних значень.

Припустимо, що маємо вибірку об'єму n , яка являє собою сукупність одержаних експериментальним шляхом n наборів чисел вигляду

$$(x_{i0}, \dots, x_{i,p-1}, y_i), i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.2)$$

де x_{ij} — значення j -го регресора (j -ї незалежної змінної) при i -му спостереженні, y_i — відповідне значення залежної змінної y . Значення похибки e при i -му спостереженні позначимо e_i . Підставляючи послідовно вибіркові значення (5.2) в рівність (5.1), одержимо n рівностей:

$$y_i = b_0 x_{i0} + \dots + b_{p-1} x_{i,p-1} + e_i, i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.3)$$

Введемо наступні векторно-матричні позначення:

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} x_{10} & x_{11} & \dots & x_{1,p-1} \\ x_{20} & x_{21} & \dots & x_{2,p-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n0} & x_{n1} & \dots & x_{n,p-1} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_{p-1} \end{pmatrix}, e = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_n \end{pmatrix},$$

Таким чином: Y — вектор спостережень залежної змінної, він має розмірність n (n -вектор); X — матриця спостережень незалежних змінних розміру $(n \times p)$ ($(n \times p)$ - матриця), вона носить назву регресійної матриці або матриці експерименту, b — p -вектор (невдомих) коефіцієнтів, e — n -вектор помилок. За допомогою цих позначень систему рівностей (5.3) можна записати у вигляді однієї векторно-матричної рівності

$$Y = Xb + e, \quad (5.4)$$

Зауважимо, що з метою кращого розрізнення скалярних і векторно-матричних величин для останніх тут використовується напівжирний шрифт. Крім того, надалі використовується знак ζ як символ транспонування матриці або вектора, зокрема, вектор-стовпець Y може бути записаним як $(y_1, \dots, y_n)\zeta$

Модель залежності даних у формах (5.1) — (5.4) має назву *лінійної регресійної моделі*, причому залежність у формі (6.4) часто зветься *загальною лінійною моделлю* (ЗЛМ) [31-33, 34]. Функція

$$f(x) = b \zeta x = b_0 x_0 + \dots + b_{p-1} x_{p-1}$$

має назву (лінійної) *функції регресії*.

Для оцінювання доцільності використанні лінійної моделі при описі досліджуваної залежності можна використовувати так званий *множинний коефіцієнт кореляції*. Множинний коефіцієнт кореляції $r_{y,x}$ між залежною змінною y і предикторними (незалежними) змінними x_0, x_1, \dots, x_{p-1} є максимумом значень парних (звичайних) коефіцієнтів кореляції між y і всілякими лінійними комбінаціями x_0, x_1, \dots, x_{p-1} . Лінійна комбінація, на якій досягається зазначений максимум, є оптимальним лінійним предиктором змінної y за змінними x_0, x_1, \dots в тому сенсі, що на згаданій лінійній комбінації досягається мінімальне можливе значення величин $M[L(x)-y]^2$, де M — символ математичного сподівання, а $L(x)$ пробігає множину всіх лінійних комбінацій x_0, x_1, \dots, x_{p-1} .

Якщо відома коваріаційна матриця S_Z вектора $Z = (y, x_0, x_1, \dots, x_{p-1})$:

$$Z = \begin{pmatrix} s_y^2 & \Sigma_{yx} \\ \Sigma_{xy} & \Sigma_x \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

де s_y^2 — дисперсія y , S_{yx} — вектор-рядок коваріацій між y та x_0, x_1, \dots, x_{p-1} , S_{xy} — вектор-стовпець аналогічних коваріацій, S_x — коваріаційна матриця вектора $x = (x_0, x_1, \dots, x_{p-1})'$, то множинний коефіцієнт кореляції $r_{y,x}$ може бути знайденим за формулою

$$r_{y,x} = (S_{yx} S_x^{-1} S_{xy})^{1/2} / s_y. \quad (5.6)$$

На практиці замість величини $r_{y,x}$ обчислюється її оцінка $r_{y,x}$:

$$r_{y,x} = (S_{yx} S_x^{-1} S_{xy})^{1/2} / s_y, \quad (5.7)$$

де S_{yx} , S_x , S_{xy} та s_y — оцінки, відповідно, S_{yx} , S_x , S_{xy} та s_y : якщо x_{ij} — i -те вибіркоче значення змінної x_j , $1 \leq i \leq n$, $0 \leq j \leq p - 1$, y_i — i -те вибіркоче значення змінної y , n — кількість вибіркових значень, то (i, j) -й елемент матриці S_x і j -й елемент вектора-рядка S_{yx} дорівнюють, відповідно дорівнює

$$\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_{ki} - \bar{x}_i)(x_{kj} - \bar{x}_j), \quad \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})(x_{kj} - \bar{x}_j)$$

при

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_{kj}, \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 0, \dots, p-1$$

Чим ближче величина $r_{y,x}$ до 1, тим вищим є степінь лінійної залежності між y і змінними x_0, x_1, \dots, x_{p-1} . Для перевірки гіпотези про відсутність лінійної залежності можна використати наступний вираз (F - відношення):

$$F = \frac{n-p-1}{p} \frac{r_{y,x}^2}{1-r_{y,x}^2}. \quad (5.8)$$

Гіпотеза про відсутність лінійної залежності відхиляється на рівні значущості α , якщо величина F виявляється більшою, ніж квантиль рівня $1 - \alpha$ розподілу Фішера $F(p, n - p - 1)$ [32, 34]. Зауважимо, що вказана процедура перевірки є повністю обґрунтованою, якщо права частина рівності (5.8) розподілена за законом Фішера $F(p, n - p - 1)$ [32, 34]. Такий розподіл напевне має місце, якщо розглядувана модель є не тільки лінійною, а ще й нормальною (лінійно-нормальна модель), тобто якщо величина похибки e має нормальний розподіл з нульовим середнім значенням. У першому наближенні зазначений спосіб перевірки лінійності може застосовуватися і без гарантій наявності такого розподілу у величини e , оскільки розподіл Фішера має певні властивості стійкості по відношенню до відхилень від нормальності даних [33].

За прийняттям моделі (5.1) — (5.4) для опису досліджуваних даних першою задачею становиться оцінка вектора коефіцієнтів \mathbf{b} з використанням результатів спостережень факторних змінних x_0, x_1, \dots, x_{p-1} і змінної відгуку y . Найпоширенішим методом такої оцінки в регресійних моделях є метод найменших квадратів (МНК). Згідно з цим методом в якості оцінки вектора коефіцієнтів \mathbf{b} приймається вектор $\mathbf{b} = (b_0, \dots, b_{p-1})'$, що є розв'язком задачі мінімізації

$$\| \mathbf{Y} - \mathbf{X} \mathbf{b} \|^2 \xrightarrow{b \in R^p} \min, \quad (5.9)$$

де R^p — p -вимірний евклідов простір, мінімум розшукується по $\mathbf{b} \in R^p$, а норма $\|z\|$ вектора $z = (z_1, \dots, z_n) \in R^n$ визначена як $(z_1^2 + \dots + z_n^2)^{1/2}$. Відомо [31-33, 35],

що розв'язок задачі (5.9) можна знайти як розв'язок \mathbf{b} системи так званих нормальних рівнянь

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y}. \quad (5.10)$$

За будь-яких умов система (5.10) є сумісною, причому у випадку, коли матриця \mathbf{X} має повний ранг, її розв'язок (отже, і розв'язок задачі (5.9)) єдиний і має вигляд

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}. \quad (5.11)$$

Оцінка \mathbf{b} вектора \mathbf{b} за МНК буде скорочено називатися МНК-оцінкою.

Незалежно від того, є розв'язок системи (5.10) єдиним чи ні, величина

$$RSS := \|\mathbf{Y} - \mathbf{X} \mathbf{b}\|^2 \quad (5.12)$$

приймає одне й те ж саме значення, який би розв'язок \mathbf{b} зазначеної системи не був підставлений у праву частину рівності (5.12). (Зауважимо, що RSS — аббревіатура від англійського residual sum of squares, тобто залишкова сума квадратів.)

Очевидно, має місце рівність

$$RSS = (\mathbf{Y} - \mathbf{X} \mathbf{b})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X} \mathbf{b}), \quad (5.13)$$

Іноколи буває зручнішими інші вирази для RSS , наприклад,

$$RSS = \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{b}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{b}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b}, \quad (5.14)$$

які неважко отримати з (5.13), враховуючи рівність (5.10).

5.2. Деякі ймовірнісні припущення та їх наслідки

За прийняттям деяких припущень ймовірнісного характеру з'являється можливість дати відповідь на питання щодо якості обраної моделі і можливості її використання. У більшості випадків такі відповіді базуються на можливості побудови довірчих інтервалів для параметрів, що оцінюються, і можливості перевірки різноманітних статистичних гіпотез.

Наступні припущення є характерними для класичного регресійного аналізу [31-33, 35]

- 1) похибки визначення незалежних змінних x_j відсутні або несуттєві;

- 2) середнє значення випадкової складової змінної у дорівнює 0, зокрема, для моделі (6.1) $Me = M\varepsilon_i = 0, i = 1, \dots, n$ (M — символ математичного сподівання випадкової величини або вектора);
- 3) значення ε_i є попарно некорельованими і мають однакову скінченну дисперсію: $D\varepsilon = D\varepsilon_i = \sigma^2 = const, i = 1, \dots, n$ (D — символ дисперсії випадкової величини);
- 4) матриця X має ранг p (тобто є матрицею повного рангу);
- 5) вектор помилок e (див. (6.2)) має n -вимірний нормальний розподіл ймовірностей $N(\mathbf{0}, S^2 I_n)$, тобто n -вимірний нормальний розподіл з вектором середніх $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)'$ та коваріаційною матрицею $S^2 I_n$, де I_n — одинична матриця (діагональна матриця, всі діагональні елементи якої дорівнюють 1). Еквівалентне формулювання даного припущення: Y має n -вимірний нормальний розподіл з середнім значенням Xb та коваріаційною матрицею $S^2 I_n$ (коротше, $Y \in N(Xb, S^2 I_n)$).

Зазначені припущення гарантують наявність важливих імовірнісно-статистичних властивостей визначених вище оцінок вектора b . Так, за виконанням вимог 1) — 3) лінійна модель (6.4), очевидно, може бути подана у вигляді

$$MY = Xb.$$

Якщо при цьому виконується ще й припущення 4), то неважко переконатися, що МНК-оцінка b вектора b є незміщеною [дод]:

$$Mb = b.$$

За виконанням всіх вимог 1) — 5) МНК-оцінка $b = (b_0, \dots, b_{p-1})$ є ефективною в класі всіх лінійних за Y незміщених оцінок вектора b , тобто для довільної такої оцінки $\tilde{b} = (\tilde{b}_0, \dots, \tilde{b}_{p-1})$ мають місце нерівності $D(b_j) \leq D(\tilde{b}_j), j = 0, \dots, p-1$, де D — символ дисперсії випадкової величини. При цьому кожна оцінка, що є ефективною в означеному класі оцінок, є МНК-оцінкою (теорема Гаусса — Маркова [36]). За певних додаткових умов (які тут не наводяться — див. [37])

МНК-оцінки $\mathbf{b} = \mathbf{b}_n$ є обґрунтованими оцінками параметру \mathbf{b} , тобто такими, що збігаються до \mathbf{b} за ймовірністю:

$$\forall d > 0 P(\|\mathbf{b}_n - \mathbf{b}\| > d) \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty,$$

де P є символом ймовірності, $\|\cdot\|$ — визначена вище норма в просторі R^p .

Припущення 5) не відіграє ніякої ролі при знаходженні МНК-оцінки \mathbf{b} , але за його прийняттям з'являються додаткові приводи для використання МНК. По-перше, оцінка \mathbf{b} за МНК співпадає у даному випадку з його оцінкою максимальної правдоподібності (ММП). По-друге, з'являються можливості визначення розподілів певних статистик, що залежать від значень регресорів x_j та залежної змінної y . Останнє дає змогу ефективного знаходження довірчих інтервалів для тих чи інших параметрів регресії та виконання перевірки різноманітних статистичних гіпотез, що пов'язані з якістю побудованої моделі. Вказані можливості багато в чому засновані на наступній теоремі, яку треба розуміти так, що коли є істинною ЗЛМ (6.2) (з прийняттям припущень 1) — 5)), то мають місце твердження зазначеної теореми. При її формулюванні використовуються позначення: χ^2_n — розподіл «хі-квадрат» з n степенями свободи; $N_p(\mathbf{m}, \mathbf{S})$ — p -вимірний нормальний розподіл з вектором середніх значень \mathbf{m} і коваріаційною матрицею \mathbf{S} [35];

Теорема 1 (про ймовірнісні властивості оцінок МНК).

1. оцінка \mathbf{b} вектора параметрів \mathbf{b} має розподіл $N_p(\mathbf{b}, \mathbf{s}^2(\mathbf{X}\mathbf{X})^{-1})$;
2. квадратична форма $(\mathbf{b} - \mathbf{b})\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{b} - \mathbf{b})/\mathbf{s}^2$ має розподіл χ^2_p ;
3. вектор оцінок \mathbf{b} і величина \mathbf{s}^2 незалежні одне від одного;
4. величина $RSS \propto \mathbf{s}^2$ має розподіл χ^2_{n-p} ;
5. величина $S^2 := R S S / (n - p)$ є незміщеною оцінкою дисперсії похибки спостережень \mathbf{s}^2 ;

Теорема 1 має важливі наслідки в лінійному регресійному аналізі, але її застосування є строго обґрунтованим лише у випадку адекватності лінійної моделі (5.4) тому процесу, що представлений вказаними вище вибірковими даними (5.2).

Серед методів перевірки адекватності лінійної моделі даних досить поширеним є метод, що полягає в порівнянні оцінок дисперсій похибок, що одержані, з одного боку, з застосуванням даної моделі, а з іншого — незалежним шляхом. Реалізація зазначеного методу полягає в наступному. Позначимо для даних (5.2) буквою \mathbf{x}_i i -ту точку спостережень (вектор-рядок) незалежної змінної, тобто $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{i,p-1})$, $i = 1, 2, \dots, n$. Обговорюваний метод потребує наявності кількох спостережень за y принаймні в одній з точок \mathbf{x}_i . Припустимо, що ця вимога виконується. Кажучи іншими словами, серед точок \mathbf{x}_i є такі, що повторюються. Тоді нехай $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^m$ — різні точки спостережень (вектори-рядки), причому хоч в одній з них кількість спостережень більше ніж 1. Припустимо, що при $\mathbf{x} = \mathbf{x}^i$ спостерігалися значення y_{i1}, \dots, y_{in_i} , $i = 1, \dots, m$ (ясно, що $n = n_1 + \dots + n_m$). Нехай \hat{y} — оцінка функції регресії, тобто

$$\hat{y} = b_0 x_0 + \dots + b_{p-1} x_{p-1}. \quad (5.15)$$

Позначимо

$$\hat{y}_i = \hat{y}(\mathbf{x}^i), \quad \bar{y}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij} \quad (i = 1, \dots, m),$$

$$S_1^2 = \frac{1}{m-p} \sum_{i=1}^m n_i (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2, \quad S_2^2 = \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2.$$

Тоді, якщо дисперсії y при кожному \mathbf{x}^i можна вважати рівними між собою та $m > p$, то відношення вигляду S_1^2 / S_2^2 (варіант з сукупності так званих F -відношень) має розподіл Фішера $F(m-p, n-m)$, причому гіпотеза про адекватність моделі \hat{y} не приймається на рівні α , якщо вказане відношення перевищує квантиль рівня $1 - \alpha$ вказаного розподілу. У іншому випадку гіпотеза приймається [32, 38].

Зауваження 1. За наявністю точок повторних спостережень, про які щойно йшла мова, системі нормальних рівнянь (5.10) і її розв'язку (5.11) можна надати спеціального вигляду. Так, позначимо \bar{X} матрицю, перший, ..., m -й рядки якої утворені векторами $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^m$ відповідно, N — діагональну матрицю порядку $m \times m$ вигляду

$$N = \begin{pmatrix} n_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & n_m \end{pmatrix},$$

в якій n_j — кількість повторних спостережень в точці \mathbf{x}^j , \bar{Y} — вектор, кожна j -та координата якого дорівнює середньому арифметичному спостережень залежної змінної в точці \mathbf{x}^j , $j = 1, \dots, m$. Тоді система рівнянь (5.10) запишеться у вигляді

$$\bar{X} \mathcal{Q} \bar{X} \mathbf{b} = \bar{X} \mathcal{Q} \bar{Y}$$

і за умови повноти рангу матриці \bar{X} її розв'язок матиме вигляд

$$\mathbf{b} = (\bar{X} \mathcal{Q} \bar{X})^{-1} \bar{X} \mathcal{Q} \bar{Y}. \quad (5.16)$$

Зокрема, при $n_1 = \dots = n_m$ одержимо

$$\mathbf{b} = (\bar{X} \mathcal{C} \bar{X})^{-1} \bar{X} \mathcal{C} \bar{Y}. \quad (5.16)'$$

Надалі вважається, що виконуються сформульовані вище припущення 1) — 5) (реально це може означати, що лінійна модель (5.4) пройшла перевірку на адекватність). Щодо вибірових даних (5.2) то тут буде припускатися, що вибірка має достатньо великий об'єм, а саме, що $n > p$.

5.3. Довірчі інтервали для параметрів регресії

Твердження даного підрозділу стосуються вигляду довірчих інтервалів [додаток 14, п. 3] для параметрів регресії і можуть бути одержані як наслідки теореми 1 [33, 35].

Спочатку наведемо відомості щодо довірчих інтервалів для лінійних комбінацій невідомих коефіцієнтів регресії, зокрема, для самих вказаних коефіцієнтів. Нехай \mathbf{a} — p -вимірний дійсний вектор. Позначимо $u^t(\mathbf{a}, n - p)$ квантиль рівня $1 - \alpha / 2$ розподілу Стьюдента з $n - p$ степенями свободи, $\hat{D}(\mathbf{a}'\mathbf{b}) = S^2 [\mathbf{a} \mathcal{C} (\mathbf{X} \mathcal{C} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{a}]$ (це — незміщена оцінка дисперсії величини $\mathbf{a} \mathcal{C} \mathbf{b}$; S^2 визначено у п.5 теореми 1). Тоді інтервал $J(\mathbf{a}, \mathbf{a})$ з кінцями

$$\mathbf{a} \mathcal{C} \mathbf{b} \pm u^t(\mathbf{a}, n - p) \sqrt{\hat{D}(\mathbf{a}'\mathbf{b})}, \quad (5.17)$$

є довірчим інтервалом рівня a для параметру $a \in b$. Зокрема, довірчий інтервал рівня a для параметру b_j , $0 \leq j \leq p-1$, одержимо, поклавши $a = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, де 1 стоїть на $(j+1)$ -му місці.

Зауважимо, що прямий добуток по індексу l інтервалів $J(a_l, a)$, $1 \leq l \leq k$, не утворює довірчу множину рівня a для векторного параметра $(a_1 \Phi, \dots, a_k \Phi)$ [35]. Рівень значущості, не більший за α , забезпечить зазначений прямий добуток інтервалів $J(a_l, a \neq k)$.

Якщо вектор коефіцієнтів b є оціненим за вибірковими даними (5.2) то оцінку функцію регресії $\hat{y} = \hat{y}(x)$ (рівність (5.15)) можна використати для дослідження форми поверхні регресії

$$f(x_0, \dots, x_{p-1}) = b_0 x_0 + \dots + b_{p-1} x_{p-1}$$

Зокрема, можна побудувати довірчі інтервали для значень функції f при різних значеннях аргументу $x = (x_0, \dots, x_{p-1})$. Такі інтервали мають вигляд

$$\hat{y}(x) \pm u^t(a, n-p) S(v)^{1/2}, \quad (5.18)$$

де $v = x'(X'X)^{-1}x$, $S = (S^2)^{1/2}$, тобто в точності вигляд (5.17) при $a = x$ (оскільки $f(x) = x'b$, $\hat{y}(x) = x'\hat{b}$).

На практиці довірчі інтервали для значень функції відгуку

$$y(x) = f(x) + e$$

часто становлять навіть більший інтерес, ніж довірчі інтервали для значень функції регресії $f(x)$. При фіксованому x довірчий інтервал для $y(x)$ має вигляд [33, 35]:

$$\hat{y}(x) \pm u^t(a, n-p) S(v+1)^{1/2}, \quad (5.19)$$

де зміст позначень такий самий, що й у рівності (5.18).

5.4. МНК за наявністю лінійних обмежень

Нехай для опису даних прийнято модель (5.4) з додатковою умовою

$$A b = c, \quad (5.20)$$

де A і c — відомі матриця і вектор відповідно. Надалі для скорочення умова (5.20) інколи фігурує як «умова H », а в наступному підрозділі — як «гіпотеза H ». Принцип найменших квадратів полягає в даному випадку в визначенні

оцінки b_H вектору параметрів b як розв'язку задачі мінімізації величини $\|Y - Xb\|^2$ з урахуванням умови H (5.20)

$$\|Y - Xb\|^2 \xrightarrow{\beta: A\beta=c} \min, \quad (5.21)$$

Для розв'язання даної задачі можна застосувати відомий метод невизначених множників Лагранжа, згідно з яким мінімізується вираз

$$(Y - Xb)(Y - Xb) + I(c - Ab) \quad (5.22)$$

за (векторними) параметрами I та b . Розв'язок відносно b цієї задачі і становить шуканий вектор параметрів b_H . Якщо матриці X і A мають повний ранг, то

$$b_H = b + (X'X)^{-1}A'(A(X'X)^{-1}A')^{-1}(c - Ab) \quad (5.23)$$

(див. [33, 35]).

Надалі, поряд з аббревіатурою RSS (рівність (5.12)) використовується позначення RSS_H — залишкова сума квадратів при виконанні обмеження (5.20):

$$RSS_H = \|Y - Xb_H\|^2 = (Y - Xb_H)(Y - Xb_H). \quad (5.24)$$

5.5. Перевірка гіпотез для лінійної регресії

Розглянемо лінійну модель

$$Y = Xb + e, \quad (5.25)$$

в якій $n > p$, $X = X_{n \times p}$ є матрицею повного рангу, тобто $r(X) = p$ (нижні індекси матриці X вказують її розміри, а символ $r(X)$ означає ранг матриці). Припустимо, що треба перевірити гіпотезу

$$H: Ab = c, \quad (5.26)$$

де A — відома матриця розміру $q \times p$ рангу q , а c — відомий q -вектор. В регресійному аналізі гіпотеза H носить назву *загальної лінійної гіпотези* (ЗЛГ). Основні дії по її перевірці цієї гіпотези базуються на наступній теоремі [35].

Теорема 2. Статистика

$$F = \frac{(RSS_H - RSS)/q}{RSS/(n-p)} \quad (5.27)$$

а) дорівнює

$$(Ab - c)'[A(X'X)^{-1}A']^{-1}(Ab - c)/(qS^2); \quad (5.28)$$

б) за умови вірності гіпотези H має розподіл $F_{q, n-p}$ (F - розподіл Фішера з $(q, n - p)$ степенями свободи (див. додаток 15). З теореми 2 випливає

Процедура перевірки лінійної гіпотези H для загальної лінійної моделі регресії:

1) обчислюється F - відношення (5.27);

2) вказане F - відношення порівнюється з квантилем $u^F(a; q, n - p)$ рівня $1 - a$ розподілу Фішера $F_{q, n-p}$; гіпотеза H відхиляється на рівні значущості a , якщо $F \geq u^F(a; q, n - p)$, в протилежному випадку гіпотеза H відхиляється.

Зауваження 3. Таким чином, даний F - критерій перевірки ЗЛГ є одностороннім. Це обґрунтовується тим, що, з одного боку за умови вірності гіпотези H величини $R S S$ і $R S S_H$ повинні бути близькими одна до одної, а з другого тим, що величина (5.27) є невід'ємною (очевидно, $R S S_H \geq R S S$).

Зауважимо також, що для обчислення F - відношення не обов'язково користуватися рівністю (5.28): досить часто дане відношення припускає безпосереднє обчислення, яке полягає в явному знаходженні належних мінімальних значень в задачах (5.9) і (5.21).

Багато конкретних процедур перевірки гіпотез, що часто застосовуються на практиці, є частковими випадками щойно викладеної схеми. Розглянемо декілька прикладів з даного приводу.

Приклад 1. *Порівняння середніх значень двох нормальних сукупностей.*

Нехай $u_1, u_2, \dots, u_{n_1}, v_1, v_2, \dots, v_{n_2}$ — дві вибірки (як звичайно, вибіркові значення вважаються незалежними випадковими величинами). За умовою, величини u_j мають теоретичний розподіл $N(m_1, S^2)$, а величини v_j — розподіл $N(m_2, S^2)$. Гіпотеза H полягає в тому, що $m_1 = m_2$.

Ситуації, в яких виникає необхідність перевірки такої гіпотези, часто зустрічається при аналізі результатів механічних випробувань, течії виробничих процесів, процесів економіки і т.п.

Помітимо, що гіпотеза H може бути сформульована як деяка лінійна гіпотеза для лінійної регресійної моделі. Дійсно, за умовою

$$u_j = m_1 + e_j, j = 1, 2, \dots, n_1, \quad (5.29)$$

$$v_j = m_2 + e_{n_1 + j}, j = 1, 2, \dots, n_2. \quad (5.30)$$

Дані співвідношення можна переписати у векторно-матричному вигляді, якщо позначити

$$Y = (u_1, u_2, \dots, u_{n_1}, v_1, v_2, \dots, v_{n_2})', \quad b = (m_1, m_2)',$$

$$e = (e_1, e_2, \dots, e_{n_1}, e_{n_1+1}, e_{n_1+2}, \dots, e_{n_1+n_2})',$$

$$X' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

(в першому рядку матриці X' міститься n_1 одиниць і n_2 нулі, а у другому — навпаки, n_1 нуль і n_2 одиниці). Тоді рівності (5.29), (5.30) запишуться у вигляді (5.25). Гіпотеза H може бути записаною у вигляді (5.26), якщо покласти $A = (1, -1)$, $c = \mathbf{0} = (0, 0)'$.

Маємо $q = r(A) = 1$,

$$X \zeta X = \begin{pmatrix} n_1 & 0 \\ 0 & n_2 \end{pmatrix},$$

$$X \zeta X^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{n_2} \end{pmatrix}.$$

Звідси неважко одержати, що

$$b = (X \zeta X)^{-1} X \zeta Y = (\bar{u}, \bar{v})',$$

$$R S S = Y \zeta Y - b \zeta X \zeta X b = \sum_i (u_i - \bar{u})^2 + \sum_j (v_j - \bar{v})^2.$$

де \bar{u}, \bar{v} — вибіркові середні значення, відповідно, для змінних u_j та v_j , а для обчислення $R S S$ використовувалася рівність (5.14). Підставляючи одержані вирази в (5.28), одержуємо, що

$$F = \frac{(\bar{u} - \bar{v})^2}{S^2(1/n_1 + 1/n_2)},$$

де $S^2 = R S S / (n - p) = R S S / (n_1 + n_2 - 2)$ (врахувати: $n = n_1 + n_2, p = 2$). Якщо гіпотеза H є вірною, то F має розподіл F_{1, n_1+n_2-2} . Правило приймання або відхилення гіпотез з таким розподілом F - статистик сформульоване вище.

Зауваження 2. Будь-яка випадкова величина, що має розподіл $F_{1, n}$, є квадратом випадкової величини, що має розподіл Стьюдента t_n [34, 38].

Зокрема, звідси випливає, що гіпотезу прикладу 1 можна перевірити і за допомогою t - статистики:

$$t = \frac{\bar{u} - \bar{v}}{\sqrt{S^2(1/n_1 + 1/n_2)}} .$$

Гіпотеза H відхиляється на рівні значущості α , коли $|t| \geq u^t(\alpha, n_1 + n_2 - 2)$ (див. позначення до рівності (5.17)), у протилежному випадку не відхиляється.

Приклад 2. Гіпотеза про незначущість лінійної регресії.

Нехай математична модель залежності між y і x_0, x_1, \dots, x_{p-1} має вигляд

$$y = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_{p-1} x_{p-1} + e, \quad (5.31)$$

(так що, зокрема, $x_0 \equiv 1$). Гіпотеза H має вигляд

$$b_1 = \dots = b_{p-1} = 0.$$

Прийняття гіпотези H означає, що значення y , фактично, не залежить від тих значень, що приймають незалежні змінні, а такий стан речей свідчить про малу цінність даної моделі.

Для зведення ситуації до схеми ЗЛГ врахуємо, що запис моделі (5.31) після підстановки вибіркового даних (5.2), приймає вигляд (5.25) з матрицею експерименту

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1,p-1} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2,p-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{n,p-1} \end{pmatrix}.$$

Введемо матрицю $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{(p-1) \times p}$:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тоді наша гіпотеза H може бути записаною у вигляді (5.26) з нульовим $(p - 1)$ -вимірним вектором \mathbf{c} . Згідно з рівністю (5.14) $RSS = \mathbf{Y}'\mathbf{c}\mathbf{Y} - \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{c}\mathbf{Y}$, а

$$RSS_H = \min_{b_0} \sum_i (y_i - b_0)^2 = \sum_i (y_i - \bar{y})^2 = \mathbf{Y}'\mathbf{c}\mathbf{Y} - n\bar{y}^2,$$

де \bar{y} — середнє арифметичне значень y_i , $i = 1, \dots, n$. Тому, враховуючи, що $q = r(A) = p - 1$, одержуємо

$$F = \frac{(RSS_H - RSS)/(p - 1)}{RSS/(n - p)} = \frac{(\mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{Y} - n\bar{y}^2)}{(\mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{Y})} \cdot \frac{n - p}{p - 1},$$

і статистика F має розподіл $F_{p-1, n-p}$, якщо гіпотеза H є вірною.

Приклад 3. Біпозеза про значення коефіцієнтів регресії

Нехай має місце залежність (5.31). Розглянемо гіпотезу

$$H: b_j = c, \tag{5.32}$$

де c — задане число, $0 \leq j \leq p - 1$. На практиці найчастіше потребує перевірки випадок $c = 0$, тобто гіпотеза H має вигляд

$$H: b_j = 0. \tag{5.33}$$

У такому випадку гіпотеза H має назву гіпотези про *незначущість коефіцієнту* b_j .

Гіпотеза H має вигляд (5.26), де A — матриця з одного рядка, всі елементи якої дорівнюють 0, крім елементу з номером $j + 1$, який дорівнює 1. Звідси, якщо через d_{jj} позначити $(j + 1)$ -й діагональний елемент матриці $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$, то $A\mathbf{b} = b_j$, $A(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}A'\mathbf{c} = d_{jj}$, і F -статистика для перевірки гіпотези H має вигляд

$$F = \frac{(b_j - c)^2}{S^2 d_{jj}}. \quad (5.34)$$

При справедливості гіпотези H статистика (5.34) має розподіл $F_{1, n-p}$. Як і в прикладі 2, F - статистика може розглядатися як квадрат відповідної t -статистики (зауваження 2).

Приклад 4. Перевірка адекватності лінійної моделі регресії

Ставиться задача перевірки адекватності одне одному моделі (5.31) і наявних статистичних даних. Здається, неможливо надати тут терміну «адекватність» універсального змісту. У даному разі поняття «адекватність» означатиме добру узгодженість з деякою лінійною гіпотезою.

Припустимо, що серед наборів значень регресорів моделі (5.31), в яких виконуються спостереження змінної y , є хоч один, кількість спостережень в якому більше одиниці. Іншими словами можна сказати, що серед даних наборів незалежних змінних є такі, що повторюються. Тоді нехай $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^m$ — різні набори спостережень (інакше, точки або вектори-рядки спостережень): $\mathbf{x}^i = (x_{i1}, \dots, x_{i, r-1})$. Ми будемо вважати, що $m > p$. Позначимо n_i кількість спостережень в точці \mathbf{x}^i , n — загальну кількість спостережень, так що $n_1 + \dots + n_m = n$ (хоч одне n_i більше 1). Виконуючи відповідні підстановки результатів спостережень в вираз (5.31), одержимо n рівнянь

$$y_{ir} = b_0 + b_1 x_{i1} + \dots + b_{p-1} x_{i, p-1} + e_{ir}, \quad (5.35)$$

де y_{ir} — значення залежної змінної, $Me_{ir} = 0$, $De_{ir} = S^2$, $r = 1, \dots, n_i$, $i = 1, \dots, m$.

Позначимо

$$y_{ir} - e_{ir} = z_i.$$

Зрозуміло, що коли модель (5.31) є істинною, то

$$z_i = b_0 + b_1 x_{i1} + \dots + b_{p-1} x_{i, p-1}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (5.36)$$

Але якщо ми перевіряємо адекватність нашої моделі, то справедливість рівностей (5.36) є тільки гіпотезою. Надалі позначатимемо цю гіпотезу H . Зведемо її до деякої лінійної гіпотези, після чого скористуємося наведеною вище процедурою перевірки ЗЛГ.

Введемо наступні вектори і матриці: \bar{X} — матриця, перший, ..., m -й рядки якої утворені векторами $(1, \mathbf{x}^1), (1, \mathbf{x}^2), \dots, (1, \mathbf{x}^m)$ відповідно $((1, \mathbf{x}^i) = (1, x_{i1}, \dots, x_{i, r-1}))$, $\mathbf{b} = (b_0, b_2, \dots, b_{p-1})'$, $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_m)'$,

$$\mathbf{e} = (e_{11}, e_{12}, \dots, e_{1, n_1}, \dots, e_{m1}, \dots, e_{m, n_m})',$$

$$\mathbf{Y} = (y_{11}, y_{12}, \dots, y_{1, n_1}, \dots, y_{m1}, \dots, y_{m, n_m})',$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{n_1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_{n_2} & \dots & \mathbf{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{1}_{n_m} \end{pmatrix}.$$

Пояснимо, що \mathbf{W} — матриця, в якій $\mathbf{1}_{n_j}$ — вектори-стовпці розмірів n_j , що складені з одиниць ($j = 1, \dots, m$), $\mathbf{0}$ — вектори-стовпці відповідних розмірів, складені з нулів. Матриця \mathbf{W} має розміри $n \times m$ і ранг m .

В обраних позначеннях зв'язок між вектором спостережень \mathbf{Y} і вектором регресорів \mathbf{z} має вигляд

$$\mathbf{Y} = \mathbf{W} \mathbf{z} + \mathbf{e}, \quad (5.37)$$

а гіпотеза H може бути сформульована як

$$H: \mathbf{z} = \bar{X} \mathbf{b}. \quad (5.38)$$

У даному вигляді гіпотеза H не має ще стандартного вигляду ЗЛМ, оскільки права частина рівності (5.38) є невідомою. Але все ж таки рівності (5.38) можна надати потрібної форми. Помітимо: рівність (6.38) означає, що вектор \mathbf{z} належить векторному простору $R[\bar{X}]$, що народжений стовпцями матриці \bar{X} . Наступна лема дає зручну для нас умову такої належності.

Лема 1. Включення $\mathbf{z} \in R[\bar{X}]$ має місце тоді і тільки тоді, коли для деякої матриці $A = A_{(m-p) \times m}$, $r(A) = m - p$, виконується рівність

$$A \mathbf{z} = \mathbf{0}. \quad (5.39)$$

Відзначимо, що в якості A можна взяти матрицю, складену з будь-яких $m - p$ лінійно незалежних рядків матриці $(I - P)$, де $I = I_m$ — одинична $m \times m$ матриця, $P = \bar{X} (\bar{X} \zeta \bar{X})^{-1} \bar{X} \zeta$ [35].

Таким чином, нашу задачу зведено до перевірки лінійної гіпотези (5.39) для лінійної моделі (5.37). В позначеннях вищенаведеної процедури перевірки треба покласти $q = m - p$, $n = n$, $p = m$, тому

$$F = \frac{(RSS_H - RSS)/(m - p)}{RSS/(n - m)}. \quad (5.40)$$

Безпосереднє обчислення RSS і RSS_H тут є більш зручним, ніж використання рівності (5.28). RSS знаходиться мінімізацією по z суми $\sum_i \sum_r (y_{ir} - z_i)^2$. Беручи

похідні по z_i та прирівнюючи їх 0, одержимо

$$\hat{z}_i = \frac{\sum_r y_{ir}}{n_i} = \bar{y}_{i.}, \quad RSS = \sum_i \sum_r (y_{ir} - \bar{y}_{i.})^2.$$

Для знаходження RSS_H можна обчислити похідні по b_0, \dots, b_{p-1} від виразу

$$\sum_i \sum_r (y_{ir} - b_0 - b_1 x_{i1} - \dots - b_{p-1} x_{i,p-1})^2$$

але простіше визначити вектор оцінок коефіцієнтів $\mathbf{b} = (b_0, \dots, b_{p-1})$, просто скориставшись виразом (5.16), врахувавши, що компонентами m -вимірного вектора \bar{Y} служать величини $\bar{y}_{i.}$, $i = 1, \dots, m$. В результаті одержимо

$$RSS_H = \sum_i \sum_r (y_{ir} - b_0 - b_1 x_{i1} - \dots - b_{p-1} x_{i,p-1})^2.$$

Для остаточної перевірки адекватності слід підставити знайдені вирази RSS і RSS_H у рівність (5.40) і порівняти знайдене значення з квантилем розподілу Фішера $F_{m-p, n-m}$ у відповідності з правилом перевірки ЗЛМ.

Відзначимо ще один вираз для F - відношення (5.40), для чого наведемо зараз рівність, що досить часто зустрічається в різних питаннях лінійного регресійного аналізу [33, 35]:

$$\sum_{i=1}^m \sum_{r=1}^{n_i} (y_{ir} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{r=1}^{n_i} (y_{ir} - \bar{y}_{i.})^2 + \sum_{i=1}^m n_i (\hat{y}_i - \bar{y}_{i.})^2, \quad (5.41)$$

де \hat{y} — оцінка функції регресії (6.15), $\hat{y}_i = \hat{y}(\mathbf{x}^i)$, $i = 1, \dots, m$.

З урахуванням (5.41), F - статистика (5.40) приймає вигляд

$$F = \frac{n-m}{m-p} \cdot \frac{\sum_{i=1}^m n_i (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m \sum_{r=1}^{n_i} (y_{ir} - \bar{y}_i)^2}.$$

Одержаний вираз співпадає з відношенням S_1^2 / S_2^2 (визначення останнього — після рівності (5.15)), і тим самим вищезазначений спосіб перевірки адекватності моделі (5.31), що заснований на обчисленні даного відношення, одержує додаткове обґрунтування.

РОЗДІЛ 6. ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ

6.1 Факторний простір. Фактори та параметри оптимізації

Останнім часом відбувається постійне розширення галузі застосування методів *математичного планування експерименту*. Ці методи з успіхом використовуються для підвищення ефективності експериментальних досліджень, пошуку оптимальних технологічних режимів виробничих процесів, вибору конструктивних параметрів виробу, складу багатокомпонентної суміші тощо.

В експериментальних дослідженнях мають справу з *об'єктом дослідження*. Об'єктами дослідження можуть бути прилади, технологічні лінії, різні вироби і т.п.

Досить поширеною моделлю об'єкта дослідження є зображена на рис. 6.1 кібернетична система [39].

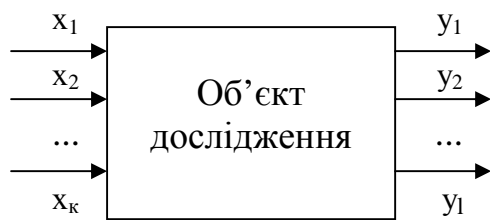


Рис. 6.1. Кібернетична система

Для такої системи розрізняють входи – керовані *фактори* x_1, x_2, \dots, x_k , що відповідають впливам на систему, і виходи (чисельні характеристики цілей дослідження) – *параметри* (критерії) оптимізації y_1, y_2, \dots, y_l .

Кожен фактор може приймати у досліді одне з декількох значень, що називаються *рівнями*. Фіксований набір рівнів факторів визначає один з можливих станів кібернетичної системи. Одночасно цей набір являє собою умови проведення одного з можливих дослідів.

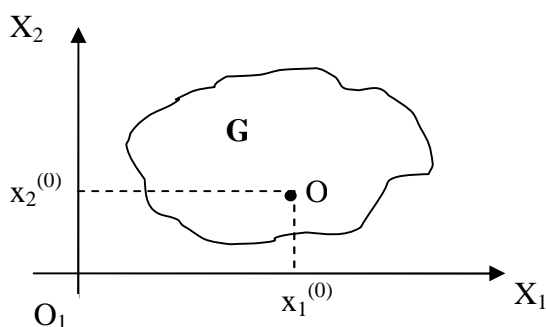


Рис. 6.2. Допустима область факторного простору

Кожному фіксованому набору рівнів факторів відповідає певна точка в багатовимірному просторі факторів, що називається *факторним простором*.

Досліди не можуть бути реалізовані в усіх точках

факторного простору, а лише в точках, що належать допустимій області факторного простору G . На різні набори рівнів факторів система реагує по-різному. Однак, існує певний зв'язок між рівнями факторів і реакцією (відгуком) системи. Цей зв'язок характеризується математичними моделями:

$$y_l = Y_l(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad l = 1, 2, \dots, m.$$

Функцію ψ , що пов'язує параметр оптимізації з факторами, називають *функцією відгуку*, а геометричний образ, що відповідає відгуку, - *поверхнею відгуку*.

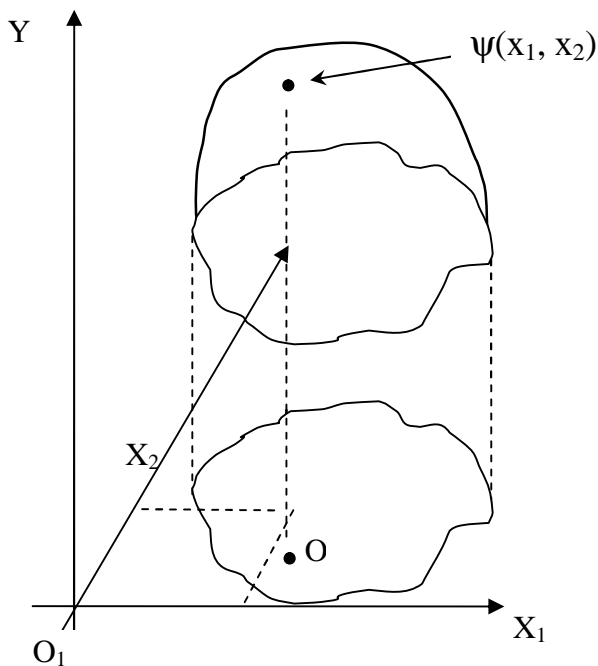


Рис. 6.3. Поверхня відгуку

Досліднику невідомий заздалегідь вигляд залежностей ψ . Йому доводиться одержувати наближені рівності:

$$\hat{Y}_l = Y(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad l = 1, 2, \dots, m.$$

за даними експерименту.

Експеримент необхідно поставити так, щоб при мінімальній кількості дослідів, варіюючи значення незалежних змінних за

спеціально сформульованими правилами, побудувати математичну модель системи і знайти оптимальні значення властивостей системи.

Вибір факторів, параметрів оптимізації і моделей відбувається з урахуванням мети дослідження.

Факторами називають змінні величини, що приймають деякі значення в будь-який момент часу.

Фактори розрізняють кількісні і якісні. *Кількісні* можна виміряти, зважити і т.д.; *якісні* – ні, але для них можна побудувати умовну шкалу, щоб розрізнити рівні фактора.

Основні *вимоги* до фактора – це керованість і вимога безпосереднього впливу на об'єкт. *Керованість* – це можливість установки і утримання обраного рівня фактора постійними під час досліду, або його змінення за заданою програмою. *Безпосередній вплив* на об'єкт передбачає незалежність від інших факторів (фактор не є функцією інших факторів).

Вимоги до сукупності факторів:

- *сумісність* (тобто здійсненність і безпечність усіх запланованих комбінацій факторів);
- *незалежність* (тобто можливість встановлення факторів на будь-якому рівні, незалежно від рівнів інших факторів).

Мета дослідження повинна бути сформульована чітко і допускати кількісну оцінку. Характеристику мети, задану кількісно, називають *параметром оптимізації* (*критерієм оптимізації, цільовою функцією*).

До параметру оптимізації висувають ряд *вимог*:

- *ефективність* з точки зору досягнення мети (тобто параметр оптимізації повинен оцінювати функціонування системи в цілому, а не окремих її підсистем);
- *універсальність* (здатність до всебічної характеристики об'єкта дослідження);
- *кількісний вираз* одним числом;
- наявність *фізичного смислу*;
- *простота* і доступність обчислення.

Властивості системи можна описувати різними *моделями*. Для вибору моделі сформулюємо *вимоги*:

- *адекватність* (тобто здатність моделі передбачити результати експерименту в деякій області з потрібною точністю);
- *змістовність* (тобто модель повинна добре пояснювати вже відомі факти, виявляти нові і передбачати подальшу поведінку системи);
- *простота* (це природня вимога: чим модель простіша, тим вона краща).

В залежності від постановки задачі, можуть використовуватись різні моделі. Часто використовують явні функціональні залежності вигляду:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n, b_1, b_2, \dots, b_m, e), \quad (6.1)$$

де f - деяка функція; x_1, x_2, \dots, x_n - незалежні змінні (фактори); b_1, b_2, \dots, b_m - параметри залежності; e - випадкова складова. Остання вводиться в модель, коли дані проявляють помітну варіативність випадкового характеру. Дуже часто вважають, що e входить у модель (6.1) адитивно, тобто (6.1) приймає вигляд:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n, b_1, b_2, \dots, b_m) + e \quad (6.2)$$

Співвідношення (6.2) називають моделлю регресії.

Незалежним змінним x_1, x_2, \dots, x_n надаються ті чи інші значення, при цьому експериментальним шляхом одержуються відповідні значення y . Тоді (6.2) переходить у систему співвідношень, з якої визначають параметри b_1, b_2, \dots, b_m . Завдяки наявності випадкової складової, коефіцієнти b_1, b_2, \dots, b_m можна лише оцінити (а не точно визначити). При цьому одержуються оцінки b_1, b_2, \dots, b_m , і замість моделі (6.2) в реальності оперують наближенням \hat{y} до неї:

$$\hat{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_n, b_1, b_2, \dots, b_m).$$

Якщо функція f є поліном, то b_1, b_2, \dots, b_m називають коефіцієнтами регресії, а функція \hat{y} приймає вигляд:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_i b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_i b_i x_i^2 + \dots \quad (6.3)$$

Якщо обрано модель, тобто обрано вид функції $y = f(x)$ і записано її рівняння, то залишається у відведеній для досліджень ділянці факторного простору спланувати і провести експеримент для оцінки чисельних значень коефіцієнтів цього рівняння. Часто коефіцієнти моделі оцінюють за методом найменших квадратів (див. розділ 4.2.4).

6.2. Повні та дробові факторні експерименти

Нехай проводяться деякі експериментальні дослідження. Кожне з різних значень, які приймає змінна X_i в досліді, називають *рівнем* цієї змінної. Число різних рівнів фактора X_i позначимо через S_i .

Визначення. Експеримент, в якому рівні кожного фактора комбінуються з усіма рівнями інших факторів, називається *повним факторним експериментом* (ПФЕ).

Повний факторний експеримент записують в вигляді: $S_1 \times S_2 \times \dots \times S_k$, оскільки число різних точок чи різних дослідів $N_1 = S_1 \times S_2 \times \dots \times S_k$.

Визначення. План експерименту називається *неповним* або *дробовим* факторним планом, якщо число різних точок $N_1 < S_1 \times S_2 \times \dots \times S_k$.

Розглянемо функцію відгуку

$$h = f(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad (6.4)$$

Нехай число різних значень, які може приймати змінна X_i ($i = 1, 2, \dots, k$) у всіх досліді, дорівнює двом, тобто $S_i = 2$. Іншими словами, змінна X_i в кожному досліді приймає одне з двох можливих значень, або кажуть, варіюється на двох рівнях. Позначимо їх X_{i1} та X_{i2} . Будемо вважати $X_{i1} < X_{i2}$, тоді X_{i2} називається верхнім рівнем фактора X_i , а X_{i1} - нижнім.

Введемо кодовані змінні: $x_i = \frac{X_i - X_i^0}{S_i}$, $i = 1, 2, \dots, k$

$$\text{де } X_i^0 = \frac{X_{i1} + X_{i2}}{2} \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad S_i = \frac{X_{i2} - X_{i1}}{2} \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Очевидно, що кодована змінна x_i ($i = 1, 2, \dots, k$) в кожному досліді може приймати значення 1 або -1. Назвемо ці значення її верхнім і нижнім рівнями. Без обмеження загальності можна вважати, що у виразі (6.4) змінні X_1, X_2, \dots, X_k подані саме у кодованій формі:

$$h = f(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (6.5)$$

Розглянемо випадок, коли в виразі (6.4) число незалежних змінних $k = 2$, тобто $h = f(x_1, x_2)$.

Всі можливі комбінації рівнів змінних x_1 і x_2 в ПФЕ 2^2 представлені в таблиці 6.1:

Таблиця 6.1

Номер досліджу	Матриця незалежних змінних				Варіант досліджень	Спостереження
	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$		
1	1	-1	-1	1	(1)	y_1
2	1	1	-1	-1	a	y_2
3	1	-1	1	-1	b	y_3
4	1	1	1	1	ab	y_4

Тут символ (1) означає, що обидва фактори знаходяться в нижньому рівні; a - x_1 в верхньому; b - x_2 в верхньому; ab – обидва в верхньому рівні. Це є ПФЕ 2^2 . Часто вважають, що функція відгуку має вигляд:

$$h = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 \quad (6.6)$$

Схему ПФЕ 2^2 можна зобразити у вигляді, наведеному на рис. 5.4.

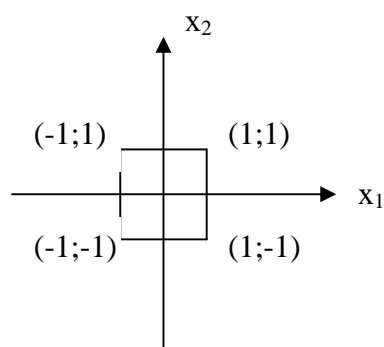


Рис.6.4. Схема ПФЕ 2^2

Легко бачити, що спостереження y_1, y_2, y_3, y_4 виконуються у вершинах квадрата. Коефіцієнти (6.6) знаходяться методом найменших квадратів.

Розглянемо випадок ПФЕ 2^3 . В цьому випадку: $h = f(x_1, x_2, x_3)$. Всі різні комбінації рівнів змінних x_1, x_2, x_3 представлені в таблиці 6.2.

Таблиця 6.2

Матриця незалежних змінних								Варіант дослідження	Спостереження
x ₀	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁ x ₂	x ₁ x ₃	x ₂ x ₃	x ₁ x ₂ x ₃		
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	(1)	y ₁
1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	A	y ₂
1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	B	y ₃
1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	Ab	y ₄
1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	C	y ₅
1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	Ac	y ₆
1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	Bc	y ₇
1	1	1	1	1	1	1	1	Abc	y ₈

Функцію відгуку шукають у вигляді:

$$h = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq 3} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq 3} b_{ij} x_i x_j + b_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (6.7)$$

Коефіцієнти (6.7) знаходяться за методом найменших квадратів.

В повному факторному експерименті 2^k число дослідів $N = 2^k$. З ростом числа змінних k число дослідів N швидко зростає. Тому при великих k реалізація ПФЕ 2^k стає практично неможливою. Для 2^k експериментів ПФЕ залежність, аналогічна (6.7) має вигляд:

$$h = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq k} b_{ij} x_i x_j + \dots + b_{12 \dots k} x_1 x_2 \dots x_k \quad (6.8)$$

З ростом N відбувається збільшення числа взаємодій і їх порядку в (6.8). Але часто в рівнянні (6.8) ефектами взаємодії високих порядків можна знехтувати, або апріорі відомо, що деякі з них відсутні. Число дослідів для знаходження оцінок невідомих коефіцієнтів такого рівняння може бути суттєво зменшено. Це досягається за рахунок застосування *дробових факторних експериментів*. Якщо в ПФЕ 2^k спостереження проводяться в усіх вершинах k -вимірного гіперкуба, то при використанні дробових планів спостереження проводяться в деяких з них.

Розглянемо приклад побудови дробової репліки. Нехай функція відгуку має вигляд:

$$h = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq 3} b_i x_i \quad (6.9)$$

В цьому виразі ефекти парних і потрійної взаємодій відсутні: $b_{12} = b_{13} = b_{23} = b_{123} = 0$.

Якщо для оцінювання невідомих коефіцієнтів використовувати ПФЕ 2^3 , то $N=8$. Однак, число дослідів можна зменшити оскільки в (6.9) ефекти взаємодії відсутні. З цією метою побудуємо план, матриця якого має вигляд:

$$D = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} & & & \end{matrix} \quad (6.10)$$



матриця ПФЕ 2^2

Матриця D отримана з матриці ПФЕ 2^3 шляхом викреслювання з неї рядків: (1; -1; 1), (-1; 1; 1), (-1; -1; -1), (1; 1; -1).

Побудований план дробового факторного експерименту (ДФЕ) (6.10) являє собою полурепліку від ПФЕ 2^3 . Для її запису використовується позначення: 2^{3-1} , де 2 – число рівнів; 3 – число змінних; $N = 2^{3-1}$ – число дослідів. Кодове позначення полурепліки: с; а; в; авс.

Розглянемо особливості побудови плану. Як видно з (6.10), змінна x_3 в точках плану задовольняє співвідношенню:

$$x_3 = x_1 x_2 \quad (6.11)$$

(6.11) – це так зване генеруюче співвідношення. За ним легко побудувати (6.10) – спочатку ПФЕ 2^2 , а потім – вектор-стовпець x_3 , що відповідає (6.11).

Коефіцієнти моделі в ДФЕ знаходяться також за методом найменших квадратів.

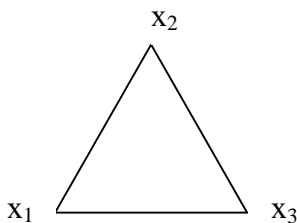
6.3. Планування на діаграмах „Склад - Властивість”

Розглянемо планування експерименту для систем, що являють собою суміші q різних компонентів [39]. Змінні x_i ($i = 1, 2, \dots, q$) таких систем являють собою пропорції (відносно вмісту) i -тих компонентів суміші і задовольняють умові:

$$\sum_{1 \leq i \leq q} x_i = 1 \quad (x_i \geq 0) \quad (6.12)$$

Геометричне місце точок, що задовольняють умові (6.12), являє собою $(q - 1)$ – мірний правильний симплекс (трикутник для $q = 3$; тетраедр для $q = 4$; і т.д.). Кожній точці такого симплекса відповідає суміш певного складу і навпаки, будь-якій комбінації відносних вмістів q компонентів відповідає певна точка симплекса.

В подальшому ми будемо оперувати факторним простором у вигляді симплексів, тому доцільно перейти від звичайних декартових координат до спеціальної симплексної системи, в якій відносні



вмісти кожного компонента відкладаються вздовж відповідних граней симплекса. На вершинах симплекса кожне $x_i = 1$, далі – визначаються за лініями (або поверхнями) рівня, паралельними протилежній стороні

Рис. 6.5 Симплексна система координат

(або грані) симплекса. Так, наприклад, для трикомпонентної суміші маємо на площині симплекс у вигляді трикутника $x_1 x_2 x_3$ (рис. 5.5). Значення x_1 у

вершині x_1 дорівнює одиниці, а на стороні $x_2 x_3$ – нулю.

Задача побудови математичної моделі „склад-властивість” може бути вирішена за допомогою запису шуканої функції у вигляді поліному степеню n у канонічній формі:

$$\hat{y} = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{m=2}^n \left\{ \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij}^{(m)} x_i x_j (x_i - x_j)^{m-2} \right\} +$$

$$+ \sum_{m=3}^n \left\{ \sum_{1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_m \leq q} b_s x_{i_1}^{s_1} x_{i_2}^{s_2} \dots x_{i_m}^{s_m} \right\} \quad (6.13)$$

де $s_1 + s_2 + \dots + s_m = n$.

Поліном такого вигляду (так звані приведені поліноми) отримуються зі звичайних поліномів відповідного ступеня з урахуванням співвідношення

$$\sum_{1 \leq i \leq q} x_i = 1 \text{ і містять } C_{q+n-1}^n \text{ коефіцієнтів.}$$

Так наприклад, поліном другого ступеня, що в загальному випадку має вигляд:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2$$

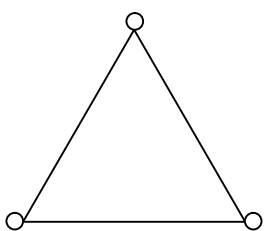
з урахуванням співвідношення $x_1 + x_2 + x_3 = 1$ прийме вигляд:

$$\hat{y} = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3.$$

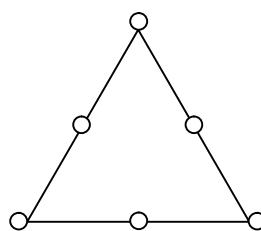
Для оцінки коефіцієнтів приведеного полінома (6.13) було запропоновано плани, що забезпечують рівномірний розкид експериментальних точок по $(q-1)$ – мірному симплексу. Точками таких планів є вузли $\{q, n\}$ -симплексних ґраток. В $\{q, n\}$ - ґратці для кожного фактора (компонента) використовується $(n+1)$ рівнорозміщених рівнів в інтервалі від 0 до 1 $(x_i = 0, 1/n, 2/n, \dots, 1)$ і беруться різноманітні їх комбінації. Так, число таких комбінацій C_{q+n-1}^n дорівнює числу коефіцієнтів в приведеному поліномі (6.13).

Набір точок $(x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{qu})$, $u = 1, 2, \dots, N = C_{q+n-1}^n$, де $x_{iu} = 0, 1/n, 2/n, \dots, 1$, $\sum_{1 \leq i \leq q} x_{iu} = 1$ утворює насичений *симплексно-ґратковий план* $\{q, n\}$.

Приклади $\{q, n\}$ – ґраток наведено на рис 6.6.



а)



б)



Рис. 6.6. $\{q, n\}$ – ґратки: а) лінійна; б) квадратична; в) неповна кубічна; г) кубічна.

6.4. Планування із попередньою трансформацією симплексної підобласті

При розв’язанні q – компонентних сумішевих задач часто необхідно дослідити лише $(q - 1)$ -вимірну симплексну підобласть повної $(q - 1)$ -вимірної області [39]. Підобласть може бути задана обмеженнями на область зміни всіх компонентів, наприклад, $x_i \geq q_i$ ($i = 1, 2, \dots, q$). В цьому випадку безпосереднє застосування описаних вище методів є неможливе, оскільки порушується умова $0 \leq x_i \leq 1$. Тому попередньо роблять трансформацію підобласті шляхом переходу до нової системи координат (z_1, z_2, \dots, z_q) (рис. 6.7).

Для підобласті маємо:

$$0 \leq z_i \leq 1, (i = 1, 2, \dots, q) ; z_1^{(u)} + z_2^{(u)} + \dots + z_q^{(u)} = 1, \quad (6.14)$$

де u – будь-яка точка підобласті.

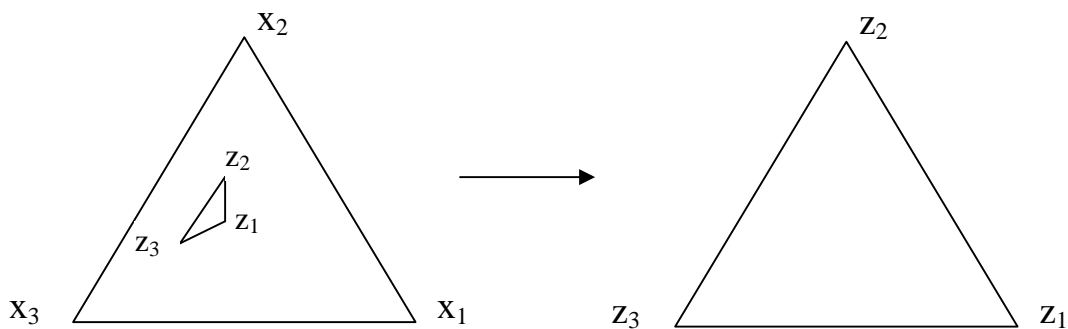


Рис. 6.7. Трансформація симплексної підобласті.

Трансформуюча залежність між координатними системами (x_1, x_2, \dots, x_q) і (z_1, z_2, \dots, z_q) , що забезпечує (6.14), задається матричним рівнянням $X = AZ$, в розгорнутому вигляді:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(u)} \\ x_2^{(u)} \\ \dots \\ x_q^{(u)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \dots & x_1^{(q)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \dots & x_2^{(q)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_q^{(1)} & x_q^{(2)} & \dots & x_q^{(q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1^{(u)} \\ z_2^{(u)} \\ \dots \\ z_q^{(u)} \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

Тут елементи матриці A – координати вершин симплекса; $x_i^{(u)}$ і $z_i^{(u)}$ - вихідні і нові координати u -ої трансформованої точки.

Відносно нових змінних z можуть бути побудовані всі плани, що використовувались для повного симплекса. Однак, реалізація експерименту в таких умовних планах неможлива. Для проведення експерименту необхідно представлення експериментальних складів в x -координатах (перехід за 6.15)).

6.5 Деякі математичні моделі фізичної хімії, що реалізуються з використанням чисельних методів

Необхідно оптимізувати склад трикомпонентної полімерної суміші поліпропілен (ПП) / співполіамід (СПА) / поліетилсилоксан (ПЕС-5) для найкращої реалізації явища специфічного волокнуутворення, а саме для отримання якомога більшої кількості волокон безперервної довжини і найменшого діаметру.

Введемо змінні: x_1 - концентрація ПП; x_2 - концентрація СПА; x_3 - концентрація ПЕС-5; причому $\sum_{i=1}^3 x_i = 1$.

У якості вихідних змінних виберемо: y_1 - середній діаметр ПП-мікрвоволокон; y_2 - числова доля безперервних волокон; y_3 - числова доля коротких волокон.

Експериментально встановлено, що шукати розв'язок потрібно не в усій області, а в певній її частині, адже саме в таких межах можливе фізичне варіювання значень концентрацій компонентів суміші [14]:

для ПП: $0.3 \leq x_1 \leq 0.5$;

для СПА: $0.5 \leq x_2 \leq 0.7$; (6.16)

для ПЕС-5: $0.003 \leq x_3 \leq 0.015$.

Для розв'язання даної задачі в середовищі Delphi розроблено спеціальну програму. Інтерфейс програми наведено на рис. 6.8.

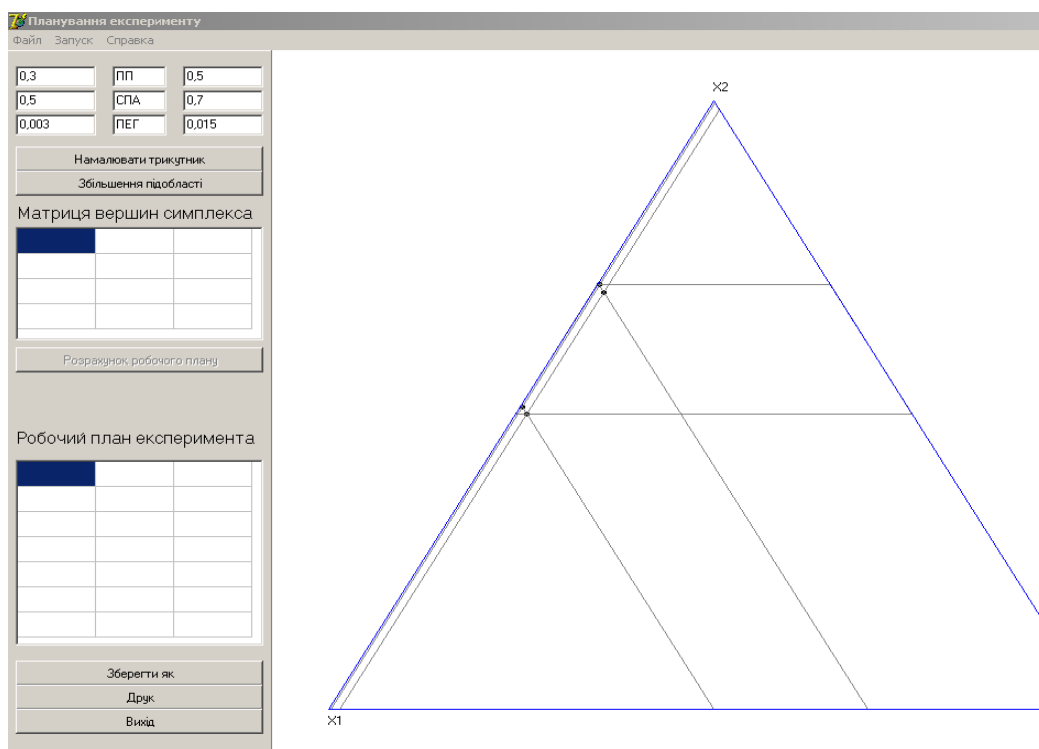


Рис. 6.8. Інтерфейс програми для інтерактивного планування експерименту для сумішевих систем

Спочатку необхідно ввести границі зміни вхідних полімерів у відповідності з (6.16) (рис. 6.9).

Після цього відбувається побудова симплекса та ліній рівня, що відповідають введеним обмеженням - $x_1 = 0.3$ та $x_1 = 0.5$; $x_2 = 0.5$ та $x_2 = 0.7$; $x_3 = 0.003$ та $x_3 = 0.015$ (рис. 6.10).

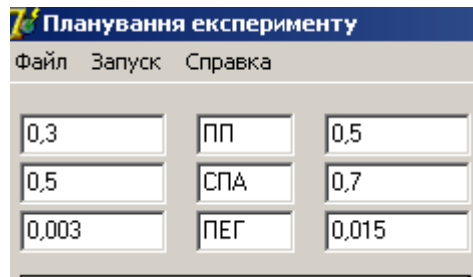


Рис. 6.9. Ввід початкових даних

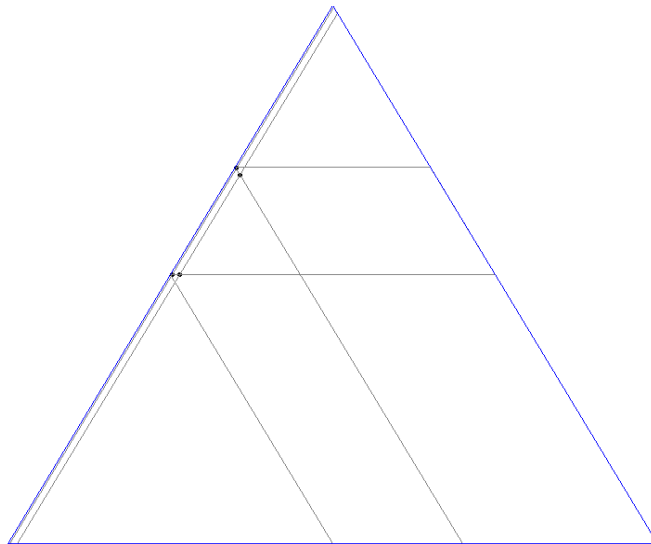


Рис. 6.10. Симплексна область та відповідні лінії рівня

Оскільки вміст компатибілізатора (ПЕС-5) у суміші малий у порівнянні з іншими компонентами суміші, то для кращої візуалізації в програмі передбачено можливість збільшення побудованої симплексної під області (рис. 6.11). В збільшеній фігурі користувач може інтерактивно виділити підобласть трикутної форми, яка найбільш повно охоплює фігуру. Це і буде трансформована підобласть для пошуку розв'язку задачі (рис. 6.11).

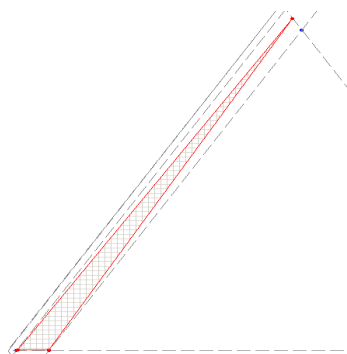


Рис. 6.11. Трансформована симплексна підобласть

Тепер знаходимо матрицю A – матрицю координат вершин побудованої симплексної підобласті (рис. 6.12).

Матриця вершин симплекса		
0,4999	0,4997	0,3000
0,4967	0,4861	0,6903
0,0034	0,0142	0,0097
1	1	1

Рис. 6.12. Матриця координат вершин трансформованої симплексної підобласті

Для розробки моделі, яка описує процеси структуроутворення ПП в матриці СПА залежно від складу вхідної суміші, використаємо поліном неповного третього порядку, оскільки така модель є найбільш прийнятною для розв'язку задач для трикомпонентних систем:

$$\hat{y} = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3$$

тут β – невідомі коефіцієнти.

Для оптимізації реалізації явища специфічного волокноутворення, побудуємо залежності основних параметрів структуроутворення від концентрацій вхідних компонентів.

Для знаходження коефіцієнтів моделі (їх 7) використаємо стандартний план (див. рис. 6.6 (в)) для поліномів неповного третього порядку у псевдокоординатах (z). Аналітично цей план може бути записаний у вигляді матриці:

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 0 & 0.5 & 0.5 \\ 0.333 & 0.333 & 0.333 \end{pmatrix}$$

Тепер можемо за (6.15) можна розрахувати робочий план експерименту (рис. 6.16).

Робочий план експеримента

49,99	49,67	0,34
49,97	48,61	1,42
30	69,03	0,97
49,98	49,14	0,88
39,98	58,82	1,2
40	59,35	0,66
42,89	55,21	0,9

Зберегти як

Друк

Рис. 6.16. Робочий план експерименту

Провівши експерименти в знайдених точках плану, було знайдено значення вихідних змінних. Результати експериментів наведено в таблиці 6.3.

Таблиця 6.3

Вихідна змінна	Номер досліджу						
	1	2	3	4	5	6	7
y_1	3.5	2.1	3.0	2.8	8.2	2.5	5.1
y_2	54.8	63.8	33.6	40.2	35.2	54.2	60.6
y_3	14.6	16.0	12.4	23.2	16.0	15.4	11.0

Далі, за допомогою програми за методом найменших квадратів (див. розділ 4.2.4) знайшли залежності y від z . Результати наведено на рис. 6.17.

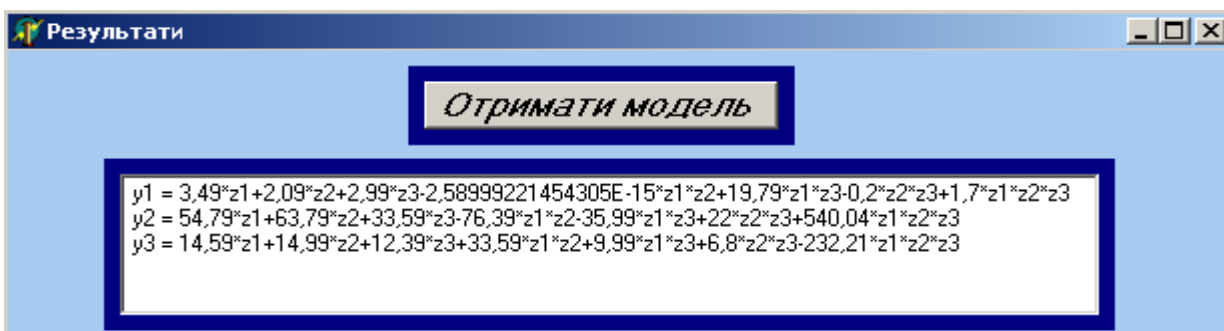


Рис. 6.17. Математична модель залежності вихідних параметрів від вхідних даних.

Створені регресійні рівняння перевірено на адекватність, тобто здатність моделі передбачити результати досліджень в деякій області з необхідною точністю. Для цього були поставлені експерименти в контрольних точках та розраховані значення критерію Стьюдента для кожної вихідної змінної. Про адекватність моделі судили за співвідношенням:

$$t_p \leq t_t$$

де t_p - розрахункове значення критерію Стьюдента;

t_t - теоретичне значення критерію Стьюдента.

Побудовану модель було використано для багатокритеріального пошуку оптимального складу суміші за допомогою узагальненого критерію бажаності [40]: $D = \sqrt[3]{d_1 \cdot d_2 \cdot d_3}$, де d_1, d_2, d_3 - часткові критерії бажаності, розраховані для кожної вихідної змінної:

$$d = \exp(-\exp(-y')),$$

де y' - безрозмірне значення вихідної змінної.

За допомогою програми було знайдено оптимальний склад суміші, а потім згідно з матричним рівнянням (6.15) перейшли до x - системи координат. Визначений оптимальний вміст компонентів складає:

ПП – 40.10 % мас., СПА – 59.27 % мас., ПЕС-5 – 0.63 % мас.;

при цьому: $y_1 = 3.3$ мкм, $y_2 = 86.7$ %, $y_3 = 4.1$ %.

Таким чином, за допомогою математичного моделювання розв'язано задачу оптимізації складу трикомпонентної полімерної суміші, що дає можливість реалізувати специфічне волокноутворення якнайкраще. Це дозволяє значною мірою зменшити затрати часу на виконання робіт по обробці результатів експерименту. Крім того, знайдений оптимальний склад суміші може бути використаний на практиці для отримання покращених мікрОВОЛОКОН і виробів на їх основі з унікальними властивостями.

Додаток 1

Процедура обчислення визначника матриці довільного порядку

```
procedure PrDetN(KoefN:Matr;n:integer; var DetN:Real);
var Koef:Matr;
    i,j:integer;
    Det,Det3:real;
begin
if n=3 then begin
    Det3:=KoefN[1,1]*KoefN[2,2]*KoefN[3,3]+
        KoefN[2,1]*KoefN[3,2]*KoefN[1,3]+
        KoefN[1,2]*KoefN[2,3]*KoefN[3,1]-
        KoefN[1,3]*KoefN[2,2]*KoefN[3,1]-
        KoefN[2,1]*KoefN[1,2]*KoefN[3,3]-
        KoefN[1,1]*KoefN[2,3]*KoefN[3,2];
    DetN:=Det3;
end
else
begin
Det:=KoefN[1,1];
for i:=2 to n do
begin
for j:=2 to n do
begin
Koef[i-1,j-1]:=
(KoefN[1,1]*KoefN[i,j]-KoefN[i,1]*KoefN[1,j])/KoefN[1,1];
end;
end;
for i:=1 to n-1 do
begin
for j:=1 to n-1 do
begin
KoefN[i,j]:=Koef[i,j];
end;
end;
end;
PrDetN(KoefN,n-1,DetN);
DetN:=DetN*Det;
end;
end;
```

Додаток 2

Процедура розв'язання системи лінійних рівнянь методом Крамера

```
procedure Kramer(A:matr;b:vector;n:integer;var x:vector);
var i,j:integer;
    DetAo,DetAd:real;
    temp:vector;
begin
PrDetN(A,n,DetAo); // Виклик процедури, описаної в додатку 1
if DetAo=0 then ShowMessage('Kramer metod can not be used')
    else
    begin
    for j:=1 to n do
    begin
    for i:=1 to n do
    begin
    temp[i]:=A[i,j];
    A[i,j]:=b[i];
    end;
    PrDetN(A,n,DetAd); // Виклик процедури, описаної в додатку 1
    x[j]:=DetAd/DetAo;
    for i:=1 to n do
    begin
    A[i,j]:=temp[i];
    end;
    end;
    end;
end;
end;
```

Додаток 3

Процедура, що реалізують метод Гауса (прямий та обернений хід)

```
procedure pram_hid(var A:mas);
var
i,j,z,rad,c:integer;
max,temp:real;
x:odnomir;
begin
for i:=1 to n do begin //schotchik stovbchikiv
//perestavlayem yakscho diagonalniy element =0
if A[i,i]=0 then begin
for j:=i to n do
if (A[j,i]<>0) then begin
rad:=j; break; end;
//perestavlayem radki
for z:=i to n+1 do begin
temp:=A[i,z]; A[i,z]:=A[rad,z];
a[rad,z]:=temp;
end;
//delim radok z diagonalnim elementom
temp:=A[i,i];
for j:=i to n+1 do begin
A[i,j]:=A[i,j]/temp;
end;
if i<=n then
for j:=i+1 to n do BEGIN TEMP:=-a[J,I];
for z:=i to n+1 do
A[j,z]:=(TEMP*A[I,Z])+A[J,z];
end;
end;
end;

procedure zvor_hid(var A:mas);
var
i,j,z,rad,c:integer;
max,temp:real;
x:odnomir;
begin
for i:=n downto 1 do begin
if i>=1 then
for j:=i-1 downto 1 do BEGIN TEMP:=-a[J,I];
for z:=n+1 downto i do
A[j,z]:=(TEMP*A[I,Z])+A[J,z];
end;
end;
end;
end;
```

Додаток 4

Процедура розв'язання системи лінійних рівнянь (в нормальному вигляді) методом простих ітерацій

```
procedure Iter(A:matr;S1:vector;X0:vector;n:integer;eps:real;var X1:vector);
var Xk,Xk_p1:vector;
    t,t0:real;
    i,j,k,k_iter:integer;
begin
t0:=0;
k_iter:=round(ln(eps*(1-norma)/norma_v)/ln(norma))+1;
  for i:=1 to n do
    begin
      Xk[i]:=X0[i];
    end;
  for k:=1 to k_iter do
    begin
      for i:=1 to n do
        begin
          Xk_p1[i]:=S1[i];
          for j:=1 to n do
            begin
              Xk_p1[i]:=Xk_p1[i]+A[i,j]*Xk[j];
            end;
          t:=abs(Xk_p1[i]-Xk[i]);
          if t>t0 then t0:=t;
          Xk[i]:=Xk_p1[i];
        end;
      for i:=1 to n do
        begin
          X1[i]:=Xk_p1[i];
        end;
      end;
    end;
end;
```

Додаток 5

Процедура розв'язання системи лінійних рівнянь (в нормальному вигляді) методом Зейделя

```
procedure Zeidel(A:matr;S1:vector;X0:vector;n:integer;eps:real;var X1:vector);
var Xk,Xk_p1:vector;
    t,t0,delta:real;
    i,j,k,k_iter:integer;
begin {proc}
  for i:=1 to n do
    begin
      Xk[i]:=X0[i];
    end;
    delta:=eps*(1-1/norma);
  repeat
    for i:=1 to n do
      begin
        Xk_p1[i]:=S1[i];
        for j:=1 to n do
          begin
            if i>j then Xk_p1[i]:=Xk_p1[i]+A[i,j]*Xk_p1[j]
              else Xk_p1[i]:=Xk_p1[i]+A[i,j]*Xk[j];
          end;
          t:=abs(Xk_p1[i]-Xk[i]);
          Xk[i]:=Xk_p1[i];
        end;
      until t>delta;
      for i:=1 to n do
        begin
          X1[i]:=Xk_p1[i];
        end;
      end;
end;
```


Додаток 6
Допоміжні процедури для реалізації методів уточнення коренів
трансцендентних рівнянь

```
procedure znaki_f(a,b:real; var flag:boolean); //Знаки функції на кінцях інтервала
var x1:real;
begin
  flag:=true;
  x1:=f(a)*f(b);
  if x1>0 then begin
    showMessage('Function doesnt change signum. Choose other interval!');
    flag:=false;
  end;
end;
```

```
procedure znak_f_(a,b:real; var flag1:boolean); //Знак першої похідної на відріжку
var x1,x2,f_x1,f_x2,h,pr:real;
begin
  flag1:=true;
  h:=0.00001;
  x1:=a;
  f_x1:=f_(x1);
  while x1<=b do
  begin
    x2:=x1+h;
    f_x2:=f_(x2);
    pr:=f_x1*f_x2;
    if pr<0 then begin
      showMessage('First proizv. changes signum. Choose other interval!');
      flag:=false;
    end;
    x1:=x2;
  end;
end;
```

```
procedure min_f_(a,b,h:real; var m1:real); //Мінімальне значення першої похідної на відріжку
var x1,x2,f_x1,f_x2:real;
begin
  x1:=a;
  f_x1:=abs(f_(x1));
  m1:=f_x1;
  while x1<=b do
  begin
    x2:=x1+h;
    f_x2:=abs(f_(x2));
    if f_x2<m1 then m1:=f_x2;
    x1:=x2;
  end;
end;
```

```
procedure max_f__(a,b:real; var M2:real); //Максимальне значення другої похідної на
//Відрізку
var x1,x2,f__x1,f__x2,h:real;
begin
  h:=0.00001;
  x1:=a;
  f__x1:=abs(f__(x1));
  M2:=f__x1;
  while x1<=b do
  begin
    x2:=x1+h;
    f__x2:=abs(f__(x2));
    if f__x2>M2 then M2:=f__x2;
    x1:=x2;
  end;
end;
```

Додаток 7

Процедура, що реалізує уточнення кореня трансцендентного рівняння за методом половинного поділу

```
procedure M_Dihot(a,b:real; var koren:real);
var c, fa, fb, fc: real;
    i:integer;
begin
if abs(b-a)<eps then begin c:=(a+b)/2;
                        koren:=c;end
    else
begin
    c:=(a+b)/2;
    fc:=f(c);
    fa:=f(a);
    fb:=f(b);
    if fc=0 then koren:=c
        else
        begin
            if fa*fc<0 then begin a:=a; b:=c; end else begin a:=c; b:=b; end;
            M_Dihot(a,b,c);
        end;
end;
end;
```

Процедура, що реалізує уточнення кореня трансцендентного рівняння за методом дотичних

```
procedure M_Dot(a,b,eps:real;var x:real);
var xk,xk1,razn,delta:real;
    i:integer;
begin
i:=1;
min_f__(a,b,0.0001,m1); // Виклик процедури, описаної в додатку 6
max_f__(a,b,M2); // Виклик процедури, описаної в додатку 6
if f(a)*f__(a)>0 then xk:=a else xk:=b;
delta:=power((eps*m1/M2),(1/2));
repeat
    xk1:=xk-f(xk)/f__(xk);
    razn:=abs(xk1-xk);
    xk:=xk1;
    i:=i+1;
until(razn<delta);
x:=xk;
end;
```

Додаток 8

Процедура знаходження коефіцієнта стиску

```
procedure k_szhattia(a,b:real;var q:real; var flag:boolean);
var x1,x2,
    f_1,f_2:real;
begin
    flag:=true;
    f_1:=abs(fi_(x1));
    q:=abs(fi_(x1));
    if f_1>1 then flag:=false;
    while x1<=b do
        begin
            x2:=x1+0.00001;
            f_2:=abs(fi_(x2));
            if f_2>1 then flag:=false
                else if f_2>q then q:=f_2;
            x1:=x2;
        end;
    end;
```

Процедура, що реалізує уточнення кореня трансцендентного рівняння за методом ітерацій

```
procedure ur_iter(x0,eps:real;var x:real);
var xn,xn1,razn:real;
begin
    k_szhattia(a,b,q,flag);
    if flag=false then showMessage('Method can not be used!')
        else
            begin
                xn:=x0;
                delta:=eps*(1/q-1);
                repeat
                    xn1:=fi(xn);
                    razn:=abs(xn1-xn);
                    vivid_iter(xn,xn1,razn);
                    xn:=xn1;
                until razn<delta;
                x:=xn1;
            end;
    end;
```

Додаток 9

Процедура, що реалізує уточнення коренів системи двох нелінійних рівнянь за методом Ньютона

```
procedure Sys2_Newton(x0,y0,eps:real;var x,y:real);
var deltax, deltay, delta:real;
begin
  repeat
    A[1,1]:=f1_x(x0,y0);
    A[1,2]:=f1_y(x0,y0);
    A[2,1]:=f2_x(x0,y0);
    A[2,2]:=f2_y(x0,y0);

    b[1]:=-f1(x0,y0);
    b[2]:=-f2(x0,y0);

    Kramer(A,b,2,x1);// Виклик процедури, описаної в додатку 2
    deltax:=x1[1];
    deltay:=x1[2];

    x:=x0+deltax;
    y:=y0+deltay;

    x0:=x;
    y0:=y;

    if abs(deltax)>abs(deltay) then delta:=abs(deltax) else delta:=abs(deltay);

  until (delta<eps);

end;
```

Додаток 10

Процедура, що реалізує розв'язання системи двох диференціальних рівнянь
методом Рунге-Кутта

```
procedure M_Runge_Kutta(CurrT,CurrTeta,CurrQ,h:real;Var Yk1,Zk1:real);
var k1,k2,k3,k4,
    m1,m2,m3,m4,
    FQ,FTeta:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
FuncQ(CurrT,CurrTeta,CurrQ,FQ);
FuncTeta(CurrT,CurrTeta,CurrQ,FTeta);
k1:=FTeta*h;
m1:=FQ*h;

FuncQ(CurrT+h/2,CurrTeta+k1/2,CurrQ+m1/2,FQ);
FuncTeta(CurrT+h/2,CurrTeta+k1/2,CurrQ+m1/2,FTeta);
k2:=FTeta*h;
m2:=FQ*h;

FuncQ(CurrT+h/2,CurrTeta+k2/2,CurrQ+m2/2,FQ);
FuncTeta(CurrT+h/2,CurrTeta+k2/2,CurrQ+m2/2,FTeta);
k3:=FTeta*h;
m3:=FQ*h;

FuncQ(CurrT+h,CurrTeta+k3,CurrQ+m3,FQ);
FuncTeta(CurrT+h,CurrTeta+k3,CurrQ+m3,FTeta);
k4:=FTeta*h;
m4:=FQ*h;

Yk1:=CurrTeta+(1/6)*(k1+2*k2+2*k3+k4);
Zk1:=CurrQ+(1/6)*(m1+2*m2+2*m3+m4);
end
end;
```

Додаток 11

Процедури обчислення реологічних функцій I_1, I_2, I_3

```

procedure lambda1(CurrQ:real;Var FI1:real);
var a,b,M, alfa0,beta0,alfa0_,beta0_,alfa0__,beta0__:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
b:=R0*power(CurrQ,(-1/3));
a:=R0*power(CurrQ,2/3);
FIalfa0(CurrQ,alfa0);
FIbeta0(CurrQ,beta0);
FIbeta0_(CurrQ,beta0_);
FIalfa0_(CurrQ,alfa0_);
FIbeta0__(CurrQ,beta0__);
FIalfa0__(CurrQ,alfa0__);
M:=4/(a*Sqr(b)*(2+3*a*Sqr(b)*(eta/mu)*beta0__))*
(
5/(6*(alfa0+2*beta0-2*beta0_*(Sqr(a)+Sqr(b))))-
( (100*beta0_*Sqr(a)*(2*beta0_*Sqr(a)-alfa0-2*beta0))/
((alfa0+2*beta0)*(alfa0+2*beta0-2*beta0_*(Sqr(a)+Sqr(b)))) ))*
(
1/(24*a*beta0)-1/(2*Sqr(beta0_)*Sqr(a)-(alfa0+2*beta0)) ) );
FI1:=
( -2*a*Sqr(b)*beta0__*G*(a/A0*(1-q0/CurrQ)) ) /
( mu*(2+3*a*Sqr(b)*beta0__*(eta/mu)) )*(1-M*Fr);
end
end;

procedure lambda2(CurrQ:real;Var FI2:real);
var a,b,pr1,pr2,M,N, alfa0,beta0,alfa0_,beta0_,alfa0__,beta0__:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
b:=R0*power(CurrQ,(-1/3));
a:=R0*power(CurrQ,2/3);
FIalfa0(CurrQ,alfa0);
FIbeta0(CurrQ,beta0);
FIbeta0_(CurrQ,beta0_);
FIalfa0_(CurrQ,alfa0_);
FIbeta0__(CurrQ,beta0__);
FIalfa0__(CurrQ,alfa0__);
M:=4/(a*Sqr(b)*(2+3*a*Sqr(b)*(eta/mu)*beta0__))*
(
5/(6*(alfa0+2*beta0-2*beta0_*(Sqr(a)+Sqr(b))))-
( (100*beta0_*Sqr(a)*(2*beta0_*Sqr(a)-alfa0-2*beta0))/
((alfa0+2*beta0)*(alfa0+2*beta0-2*beta0_*(Sqr(a)+Sqr(b)))) ))*
(
1/(24*a*beta0)-1/(2*Sqr(beta0_)*Sqr(a)-(alfa0+2*beta0)) ) );
N:=(4/(a*Sqr(b)))* (
10/(18*beta0__)+5*beta0__/(8*Sqr(Sqr(b))*Sqr(alfa0_))-
(10*(beta0__-alfa0__)*(2*Sqr(b)*alfa0_+3*beta0__)/
(72*Sqr(Sqr(b))*Sqr(alfa0_)) );
Bb:=Sqr(a)*alfa0+sqr(b)*beta0;
pr1:=Sqr(a)+Sqr(b);
pr2:=Sqr(a)-Sqr(b);

```

```

    Fl2:=(2+(N-2*M)*Fr)/(Sqr(a)*(2+3*a*Sqr(b)*beta0_*(eta/mu)))
    - (pr2+((15*pr2*(alfa0+beta0)+4*pr1*(beta0-alfa0))/(6*a*Sqr(b)*beta0_*Bb))*Fr)
    / (pr1+((15*Sqr(pr2)+4*Sqr(pr1))/(6*a*Sqr(b)*Bb))*Fr);
  end
end;

```

```

procedure lambda3(CurrQ:real;Var Fl3:real);
var a,b,pr1,pr2,alfa0,beta0,alfa_,beta0_,alfa___,beta0__:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
b:=R0*power(CurrQ,(-1/3));
a:=R0*power(CurrQ,2/3);
Bb:=Sqr(a)*alfa0+sqr(b)*beta0;
pr1:=Sqr(a)+Sqr(b);
pr2:=Sqr(a)-Sqr(b);
Fl3:=(pr2+((15*pr2*(alfa0+beta0)+4*pr1*(beta0-alfa0))/(6*a*Sqr(b)*beta0_*Bb))*Fr)
/ (pr1+((15*Sqr(pr2)+4*Sqr(pr1))/(6*a*Sqr(b)*Bb))*Fr);
end
end;

```

Процедури, що обчислюють праві частини диференціальних рівнянь системи

```

procedure FuncTeta(CurrT,CurrTeta,CurrQ:real;Var FTeta:real);
var l3:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
lambda3(CurrQ, l3);
FTeta:=(-3/4)*d{CurrQ}*l3*sin(2*CurrTeta);
end
end;

```

```

procedure FuncQ(CurrT,CurrTeta,CurrQ:real;Var FQ:real);
var l1,l2,l3:real;
begin
if CurrQ>0 then begin
lambda1(CurrQ, l1);
lambda2(CurrQ, l2);
lambda3(CurrQ, l3);
FQ:=(3/2)*CurrQ*(l1+(d{CurrQ}/2)*(l2*R0*R0*power(CurrQ,4/3)+l3)
*(2-3*sin(CurrTeta)*sin(CurrTeta)));
end
end;

```


Додаток 12

Процедура розрахунку знаменника елементарного полінома Лагранжа

```
procedure znamen;  
var k,i:integer;  
begin  
for k:=0 to z-1 do begin  
  znam[k]:=1;  
  for i:=0 to z-1 do begin  
    if k<>i then begin znam[k]:=znam[k]*(t[k]-t[i]); end;  
  end;  
end;end;
```

Процедура знаходження полінома Лагранжа

```
Procedure l(dx:real; var xc,yc:real);  
var k,i:integer;  
begin  
xc:=0; yc:=0;  
for k:=0 to z-1 do begin  
for i:=0 to z-1 do  
if i<>k then begin  
  c[k]:=c[k]*(dx-t[i]);  
  end;  
  xc:=xc+(x[k]*(c[k]/znam[k]));  
  yc:=yc+(y[k]*(c[k]/znam[k]));  
end;  
end;
```

Процедура виводу інтерполяційної кривої

```
procedure paint1(mas:real);  
var g:real;  
begin  
znamen;  
g:=-10;  
repeat  
  l(g,xc,yc);  
  form1.image1.Canvas.Pixels[round((mas*xc)+(w/2)),round((mas*-yc)+(h/2))]:=clred;  
  g:=g+0.001;  
until g>10;  
end;
```

Додаткові відомості з теорії ймовірностей

Д13.1. Векторні випадкові величини (випадкові вектори)

Д13.1.1. Означення випадкового вектора і приклади

З початкових розділів теорії ймовірностей відомо, що результати багатьох стохастичних експериментів можуть бути повністю визначеними, якщо відомо значення деякої випадкової величини, що пов'язана з даним експериментом. Проте у багатьох випадках для того, щоб охарактеризувати результат експерименту, потрібно знання значень принаймні декількох випадкових величин. Такі стохастичні експерименти (їх приклади наведені трохи нижче) приводять до бажаності розгляду одразу кількох випадкових величин, іншими словами, до розгляду *випадкових векторів*.

Д13.1.1.1. Означення. *Векторною випадковою величиною або випадковим вектором* будемо називати довільну впорядковану сукупність випадкових величин. Випадкові величини, що утворюють випадковий вектор, називатимуться його *компонентами* або *координатами*.

В якості координат випадкового вектора найчастіше розглядатимуться випадкові величини, що приймають дійсні значення і, можливо (з нульовою ймовірністю), значення $\pm \infty$. Інколи для координат припускатимуться комплексні значення. У першому випадку вектор називатиметься дійсним, а у другому — комплексним або комплекснозначним.

У даній роботі розглядаються лише вектори із скінченною кількістю координат (компонент). Кількість координат випадкового вектора називатиметься його *розмірністю*. Якщо зазначена кількість дорівнюватиме, скажімо, N , то випадковий вектор називатиметься N -вимірним. Одновимірний випадковий вектор ($N = 1$) є звичайною випадковою величиною.

Нижче наводиться кілька прикладів стохастичних експериментів, результати яких визначаються значеннями саме випадкових векторів.

Д13.1.1.2. Приклад. Нехай експеримент полягає в підкиданні N гральних костей ($N \geq 1$). Тоді його результат визначається значенням N -вимірного

випадкового вектора. Компонентами цього вектора є N випадкових величин x_1, \dots, x_N , де x_j є кількістю очок, що випала на j -й кості ($1 \leq j \leq N$).

Д13.1.1.3. Приклад. Експеримент полягає у визначенні кількох антропометричних параметрів людини, що обрана навмання. Наприклад, це може бути зріст та обхват грудей. Тоді мова піде про двовимірний випадковий вектор (дві розмірні ознаки). Зауважимо, що в загальному випадку експерименти зазначеного типу пов'язані з векторами досить великих розмірностей (стандартні антропометричні таблиці містять десятки розмірних ознак).

Д13.1.1.4. Приклад. В результаті деякого технологічного процесу створюється виріб, що характеризується кількома числовими параметрами (наприклад, це можуть бути розміри певних його частин). При виконанні виробничих операцій мають місце відхилення від потрібних (номінальних) значень цих параметрів, величини яких неможливо зарані спрогнозувати. При математичному моделюванні технологічного процесу сукупність відхилень від відповідних номінальних значень зображується як випадковий вектор.

Д13.1.1.5. Приклад. Об'єкт, що являє собою матеріальну частинку або тіло, переміщується з часом у просторі, підлягаючи дії випадкових збурень тієї чи іншої природи. Для будь-якого моменту часу сукупність величин, що визначають положення даного об'єкта (координат у фазовому просторі), є випадковим вектором.

Д13.1.1.6. Угоди відносно позначень (П1 — П10).

П1) Якщо N -вимірний вектор позначено деякою буквою, то, коли не обумовлене супротивне, його координати позначаються тією ж літерою, але з індексами. Наприклад, $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$, $X = (X_1, X_2, \dots, X_N)$.

П2) Замість $g(x_1, x_2, \dots, x_N)$, де g — деяка функція N змінних, часто пишеться $g(x)$.

П3) Якщо деякий вектор названо додатним ($h > 0$), то це означає, що всі його координати — додатні числа.

П4) Нерівність $x < (\leq) y$ означає, що $x_1 < (\leq) y_1, \dots, x_N < (\leq) y_N$. Аналогічне стосується нерівностей типу $> (\geq)$.

П5) Для векторного x за означенням $dx = dx_1 \dots dx_N$.

П6) Для векторних $a = (a_1, \dots, a_N), b = (b_1, \dots, b_N), a < b$ за означенням

$$\int_a^b g(x) dx = \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_N}^{b_N} g(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N.$$

П7) Взагалі більш компактним позначенням типу

$$\int_A g(x) dx, A \subset R^N,$$

віддається перевага перед більш детальними позначення типу

$$\int_{A_1} \dots \int_{A_N} g(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N.$$

Останні вживаються тільки в разі спеціальної потреби. Іноді для скорочення ми не пишемо аргументу у підінтегральній функції, а у ситуації, коли невірне трактування виключене, взагалі лишаємо тільки знак інтегралу і множину інтегрування, тобто можливі позначення типу $\int_A g dx$ і навіть просто \int_A .

П8) Відсутність вказівки на множину інтегрування означає, що інтеграл береться по всьому простору.

П9) Для позначень випадкових векторів перевагою користуються літери грецького алфавіту. Так, N -вимірний випадковий вектор загального вигляду часто буде записуватися у вигляді (x_1, x_2, \dots, x_N) , де x_1, \dots, x_N — випадкові величини (координати або компоненти випадкового вектора). Будуть вживатися і скорочені позначення, коли випадкові вектори позначатимуться у той же спосіб, що й випадкові величини, наприклад, літерою x (тоді у N -вимірному випадку $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$). Іноді для зручності виконання деяких перетворень ми розрізнятимемо вектори-рядки (це щойно продемонстрований спосіб запису) і вектори-стовпці — це коли координати вектора виписуються не в рядок, а в стовпчик. В останньому випадку для скороченого позначення векторів буде використовуватись напівжирний шрифт. Наприклад, замість x

писатимемо x . В тих місцях тексту, в яких застосовуватиметься останній спосіб запису, з метою більш чіткого розрізнення ситуацій замість позначення x для вектора-рядка також вживатиметься напівжирний шрифт, але вже з символом транспонування ζ . Таким чином, при даному способі позначень матимемо рівності

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_N \end{pmatrix}, \quad x \zeta = (x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (\text{Д13.1.1.1})$$

П10) Якщо для позначення вектора вживатиметься звичайний шрифт (x), то це, зокрема, означатиме, що немає різниці, як записувати вектор — у стовпчик чи у рядок.

Д13.1.2. Поняття про розподіл випадкового вектора

Як і для випадкової величини, найбільш ґрунтовною імовірнісною характеристикою випадкового вектора є його розподіл ймовірностей.

Д13.1.2.1. Означення. Розподіл випадкового вектора — це сукупність всіляких ймовірностей вигляду

$$P(x \in A), \quad A \subset R^N, \quad (\text{Д13.1.2.1})$$

де « $x \in A$ » — скорочений запис події {в результаті стохастичного експерименту випадковий вектор x прийняв значення з множини $A \subset R^N$ }.

Д13.1.2.2*. Зауваження. З точки зору математичної строгості визначення розподілу випадкового вектора за допомогою сукупності співвідношень (Д13.1.2.1) треба дещо уточнити. Справа полягає в тому, що за прийнятим означенням випадкового вектора ймовірності типу (1.2.1) визначені насправді не для всіх підмножин R^N , а лише «практично для всіх». Для деяких множин $A \subset R^N$ дуже складної структури (так званих «не вимірних за Лебегом»; в інженерних розрахунках вони майже ніколи не виникають), ймовірності типу (Д13.1.2.1) можуть бути не визначеними.

Д13.1.3. Функція розподілу випадкового вектора та деякі її властивості

Відомо, що розподіл ймовірностей випадкової величини повністю визначається її функцією розподілу. Поняття функції розподілу вводиться і у зв'язку з розподілами випадкових векторів. Як і для випадкових величин, ми будемо позначати функцію розподілу переважно буквою F .

Д13.1.3.1. Означення. Функцією розподілу F випадкового N -вимірного вектора або сумісною функцією розподілу N випадкових величин називають функцію N дійсних аргументів, що визначена на всьому просторі R^N рівністю

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) = P(\mathbf{x}_1 < x_1, \mathbf{x}_2 < x_2, \dots, \mathbf{x}_N < x_N). \quad (\text{Д13.1.3.1})$$

Тобто $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$ дорівнює ймовірності того, що в результаті стохастичного експерименту величина x_1 прийме значення менше, ніж x_1 , x_2 — менше, ніж x_2 , ..., x_N — менше, ніж x_N .

При використанні скорочених позначень типу п. Д13.1.1.6 співвідношення (Д13.1.3.1) можна переписати у вигляді

$$F(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x} < \mathbf{x}), \quad (\text{Д13.1.3.2})$$

який зовні нічим не відрізняється від відповідної рівності для звичайної одновимірної (скалярної) випадкової величини.

Нагадаємо, що у одновимірному випадку за допомогою функції розподілу зручним чином знаходяться ймовірності попадання x у довільні числові напівзамкнені інтервали $[x, x + h)$, де x — довільне дійсне, h — довільне додатне число, тобто ймовірності вигляду

$$P(\mathbf{x} \in [x, x + h)). \quad (\text{Д13.1.3.3})$$

А саме,

$$P(\mathbf{x} \in [x, x + h)) = P(x \leq \mathbf{x} < x + h) = F(x + h) - F(x). \quad (\text{Д13.1.3.4})$$

Для порівняння формули (7) з її багатовимірним аналогом, що буде наведений нижче, перепишемо її в дещо інших позначеннях. Введемо *різницевий оператор* Δ^h , який діє на функцію F у відповідності з рівністю

$$\Delta^h F(x) = F(x + h) - F(x).$$

Тоді рівність (Д13.1.3.4) прийме вигляд

$$P(\mathbf{x} \in [x, x + h)) = \Delta^h F(x). \quad (\text{Д13.1.3.5})$$

Звертаючись до N -вимірного випадку, введемо множину, яку по аналогії з одновимірним випадком також позначимо $[x, x + h)$, але, на відміну від одновимірного випадку, $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ та $h = (h_1, h_2, \dots, h_N)$ — вектори, причому x — довільний дійсний вектор (його координати $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathbb{R}$), а h — довільний додатний вектор (його координати $h_1, h_2, \dots, h_N \in \mathbb{R}^+$). За означенням, N -вимірна множина $[x, x + h)$ — це сукупність N -вимірних точок, кожна j -та координата яких лежить у числовому проміжку $[x_j, x_j + h_j)$, $1 \leq j \leq N$. Тобто

$$[x, x + h) = \{ y : y = (y_1, \dots, y_N) \in \mathbb{R}^N, x_1 \leq y_1 < x_1 + h_1, \dots, x_N \leq y_N < x_N + h_N \}. \quad (\text{Д13.1.3.6})$$

Множина (Д13.1.3.6) зветься N -вимірним прямокутником або N -вимірним інтервалом. Є і інші назви. Неважко також побачити, що множина $[x, x + h)$ може бути представленою у вигляді прямого (декартового) добутку:

$$[x, x + h) = [x_1, x_1 + h_1) \times [x_2, x_2 + h_2) \times \dots \times [x_N, x_N + h_N). \quad (\text{Д13.1.3.7})$$

Тепер для кожного цілого j : $1 \leq j \leq N$ і додатного h_j визначимо *різницевий оператор* $\Delta_j^{h_j}$, що діє на функцію F у відповідності з рівністю

$$\begin{aligned} \Delta_j^{h_j} F(x) &= \\ &= F(x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_j + h_j, x_{j+1}, \dots, x_N) - F(x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (\text{Д13.1.3.8})$$

(Роз'яснимо запис: після дії оператора $\Delta_j^{h_j}$ на функцію F ми одержуємо нову функцію $\Delta_j^{h_j} F$, що залежить від h_j як від параметра і значення якої $\Delta_j^{h_j} F(x)$ в довільній точці $x \in \mathbb{R}^N$ дорівнює правій частині останньої рівності). Нехай тепер $h = (h_1, h_2, \dots, h_N)$ — довільний додатний вектор. Визначимо різницевий оператор Δ^h рівністю:

$$\Delta^h F(x) = \Delta_1^{h_1} \Delta_2^{h_2} \dots \Delta_N^{h_N} F(x). \quad (\text{Д13.1.3.9})$$

Тобто дія оператора Δ^h полягає в наступному: до функції F застосовуємо оператор $\Delta_N^{h_N}$, при цьому, у відповідності із рівністю (1.3.8), одержуємо нову

функцію $\Delta_N^{h_N} F$; до одержаної функції застосовуємо оператор $\Delta_{N-1}^{h_{N-1}}$ і т.д. до застосування оператора Δ_1^h включно.

Завдяки застосуванню оператора Δ^h вираз ймовірності попадання випадкового вектора x у довільний N -вимірний прямокутник $[x, x + h)$ через функцію розподілу x стає не більш складним, ніж у одновимірному випадку. А саме, має місце наступне твердження.

Д13.1.3.2. Теорема. Нехай x — випадковий вектор, F — його функція розподілу, $[x, x + h)$ — довільний N -вимірний прямокутник (рівності (Д13.1.3.6), (Д13.1.3.7)). Тоді має місце рівність

$$P(x \in [x, x + h)) = \Delta^h F(x). \quad (\text{Д13.1.3.10})$$

Зауважимо, що рівність (Д13.1.3.10) має такий самий вигляд, що й рівність (Д13.1.3.5). Звичайно, це досягнуто за допомогою позначень, що скорочують записи.

Д13.1.3.3. Зауваження. У випадку $N = 2$ дія оператора Δ^h на функцію F має вигляд

$$\begin{aligned} \Delta^h F(x) &= \\ &= \Delta^h F(x_1, x_2) = F(x_1 + h_1, x_2 + h_2) - F(x_1 + h_1, x_2) - F(x_1, x_2 + h_2) + F(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (\text{Д13.1.3.11})$$

Функції розподілу випадкових векторів мають характерні властивості, деякі з яких зараз будуть сформульовані. Більш повний перелік таких властивостей з доведеннями можна знайти у літературі [32, 34, 41].

Д13.1.3.4. Деякі властивості функцій розподілу випадкових векторів.

В.1) $0 \leq F(x) \leq 1$.

В.2) Якщо хоч одне з x_k при інших фіксованих значеннях компонентів вектора x прямує до $-\infty$, то $F(x_1, \dots, x_k, \dots, x_N)$ прямує до 0. Коротше,

$$F(x_1, \dots, -\infty, \dots, x_N) = 0, \quad 1 \leq k \leq N.$$

В.3) Якщо всі x_k , $1 \leq k \leq N$, прямують до $+\infty$, то $F(x_1, \dots, x_k, \dots, x_N)$ прямує до 1. Коротше,

$$F(+\infty, \dots, +\infty, \dots, +\infty) = 1.$$

В.4) Функція F є неспадною функцією за кожною компонентою вектора x при фіксованих значеннях інших компонент.

В.5) Функція розподілу однозначно визначає розподіл ймовірностей у просторі R^N .

Д13.1.4. Дискретні та абсолютно неперервні розподіли випадкових векторів

Як і при $N = 1$, має сенс розглядати два частинні випадки розподілів випадкових векторів: дискретний та абсолютно неперервний. Звернемося спочатку до першого випадку.

Д13.1.4.1. Означення. Розподіл N -вимірною випадкового вектора зветься *дискретним*, якщо множина можливих значень цього вектора становить собою дискретну множину в просторі R^N .

Зауважимо, що, аналогічно одновимірному випадку, вектор з дискретним розподілом часто і сам зветься дискретним вектором.

За означенням, для кожного випадкового вектора з дискретним розподілом існує не більш ніж зліченна множина точок $X = \{x^1, x^2, \dots, x^j, \dots\} \subset R^N$, для якої $P(x \in X) = 1$. *Дискретні розподіли часто буває зручнішим задавати не за допомогою функції розподілу, а за допомогою ймовірностей $P(x = x^j)$, $x^j \in X$.* Якщо позначити $p(x^j) = P(x = x^j)$, то ймовірність з виразу (1.2.1) можна в даному випадку переписати у вигляді

$$P(x \in A) = \sum_{x^j \in A \cap X} p(x^j). \quad (\text{Д13.1.4.1})$$

Зауважимо, що у конкретних випадках можуть використовуватися дещо інші (формально) записи рівностей типу (Д13.1.4.1). Наприклад, позначимо X_1, \dots, X_N множини значень компонент x_1, \dots, x_N вектора x (відповідно). Нехай

$$X_1 = \{x_1^1, x_1^2, \dots, x_1^i, \dots\}, X_2 = \{x_1^2, x_2^2, \dots, x_i^2, \dots\}, \dots, X_N = \{x_1^N, x_2^N, \dots, x_{i_N}^N, \dots\}.$$

Позначимо $p_{i_1 i_2 \dots i_N} = P(x_1 = x_{i_1}^1, x_2 = x_{i_2}^2, \dots, x_N = x_{i_N}^N)$. Тоді ймовірність $P(x \in A)$ можна записати як суму величин $p_{i_1 i_2 \dots i_N}$ за такими комбінаціями індексів i_1, i_2, \dots, i_N , для яких вектор $(x_{i_1}^1, x_{i_2}^2, \dots, x_{i_N}^N)$ належить множині A :

$$P(x \in A) = \sum_{i_1, \dots, i_N: (x_{i_1}^1, \dots, x_{i_N}^N) \in A} p_{i_1 \dots i_N}. \quad (\text{Д13.1.4.2})$$

У важливому частковому випадку $N = 2$ буває зручно ввести позначення: $z = (x, h)$ (таким чином, x тут, на відміну від попередніх позначень, не вектор, а випадкова величина — перша компонента вектора z). Позначимо $\{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots\}$ множину можливих значень x , $\{y_1, y_2, \dots, y_j, \dots\}$ — множину можливих значень h , $p_{ij} = P(x = x_i, h = y_j)$. Тоді формула (Д13.1.4.2) набуде простішого вигляду:

$$P(z \in A) = \sum_{i, j: (x_i, y_j) \in A} p_{ij}. \quad (\text{Д13.1.4.3})$$

Д13.1.4.2. Приклад. Поліноміальний розподіл ймовірностей.

Розподіл вектора $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ називається поліноміальним або мультиноміальним з параметрами p_1, p_2, \dots, p_N, n , де $0 \leq p_i \leq 1, p_1 + \dots + p_N = 1, n \geq 1$ — ціле число, якщо для довільного набору невід'ємних цілих чисел x_1, x_2, \dots, x_N , таких, що $x_1 + x_2 + \dots + x_N = n$, ймовірність

$$P(x_1 = x_1, x_2 = x_2, \dots, x_N = x_N) \quad (\text{Д13.1.4.4})$$

дорівнює

$$\frac{n!}{x_1! x_2! \dots x_N!} p_1^{x_1} p_2^{x_2} \dots p_N^{x_N}, \quad (\text{Д13.1.4.5})$$

а для всіх інших комбінацій значень x_1, x_2, \dots, x_N зазначена ймовірність дорівнює 0.

Очевидно, при $N = 2$ поліноміальний розподіл переходить в добре відомий з загального курсу теорії ймовірностей біноміальний розподіл ймовірностей.

До поліноміального розподілу приводить наступна імовірнісна схема. Нехай виконується n незалежних випробувань, в кожному з яких може

трапитись N взаємовиключних подій A_1, A_2, \dots, A_N . Ймовірність кожного такого результату ϵ , за умовою, p_1, p_2, \dots, p_N відповідно. Якщо позначити x_1, x_2, \dots, x_N кількості експериментів, що закінчилися результатами, відповідно, A_1, A_2, \dots, A_N , то ймовірність $P(x_1 = x_1, x_2 = x_2, \dots, x_N = x_N)$ буде обчислюватися якраз за вищенаведеними рівностями (Д13.1.4.4), (Д13.1.4.5).

Перейдемо до розгляду випадкових векторів з абсолютно неперервними розподілами ймовірностей.

Д13.1.4.6. Означення. Розподіл N -вимірною випадкового вектора називається *абсолютно неперервним*, якщо його функція розподілу F може бути представленою у вигляді

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) = \int_{-\infty}^{x_1} \int_{-\infty}^{x_2} \dots \int_{-\infty}^{x_N} f(y_1, y_2, \dots, y_N) dy_1 dy_2 \dots dy_N, \quad (\text{Д13.1.4.6})$$

де f — деяка невід’ємна функція. Функція f зветься *щільністю ймовірності* або *щільністю розподілу* випадкового вектора x .

Зауважимо, що надалі ми будемо скорочувати як назви, так і записи, що пов’язані з щільністю розподілу. Так, функцію f ми часто будемо називати просто щільністю, а для кратних інтегралів застосовувати векторні позначення. З їх застосуванням різні вирази, як ми вже бачили, стають не складнішими, ніж при $N = 1$. Наприклад, вживаючи позначення Д13.1.1.6 і поклавши

$$(-\infty, x) = (-\infty, x_1) \times (-\infty, x_2) \times \dots \times (-\infty, x_N),$$

можемо переписати рівність (Д13.1.4.4) у вигляді

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(y) dy, \quad (\text{Д13.1.4.7})$$

яке також має той самий вигляд, що й в одновимірному випадку.

Д13.1.4.7. Зауваження. Легко бачити, що, як і в одновимірному випадку,

$$\int f(x) dx = 1.$$

(Тут знов вживаються скорочені позначення Д13.1.1.7).

Взагалі кажучи, за наявності щільності розподілу знаходження ймовірностей, що пов'язані з випадковим вектором, спрощується. Це пояснюється тим, що у даному випадку для ймовірності з виразу (Д13.1.2.1) має місце рівність

$$P(x \in A) = \int_A f(x) dx, \quad (\text{Д13.1.4.8})$$

яку й слід застосовувати у даному випадку для знаходження потрібних ймовірностей.

Рівність (Д13.1.4.8) дозволяє, в принципі, обчислити будь-яку ймовірність, що пов'язана з ймовірнісною поведінкою випадкового вектора у випадку існування щільності розподілу, і є одним з найголовніших співвідношень «багатовимірної» теорії ймовірностей. «Дискретними аналогами» рівності (Д13.1.4.6) є рівності (Д13.1.4.1), (Д13.1.4.2).

Д13.1.4.8. Вираз щільності розподілу через функцію розподілу. Якщо щільність ймовірностей існує, то її можна одержати за допомогою диференціювання функції розподілу:

$$f(x) = \frac{\partial^N F}{\partial x_1 \dots \partial x_N}(x). \quad (\text{Д13.1.4.9})$$

Д13.1.4.9. Зауваження з приводу виконання рівності (Д13.1.4.9). Якщо f є неперервною функцією, то у кожній точці $x \in R^N$ існує мішана похідна з правої частини (Д13.1.4.9), яка теж є неперервною функцією, і зазначена рівність має місце *для кожного* $x \in R^N$. В сказаному неважко переконатися, диференціюючи інтеграл з (Д13.1.4.6). У будь-якому разі (незалежно від того, є f неперервною функцією чи ні) можна показати, що вказана похідна напевне існує майже всюди в R^N . Тоді рівність (Д13.1.4.9) можна розуміти як рівність двох виразів *майже всюди в* R^N . Відзначимо з приводу сказаного, що значення щільності розподілу можна довільним чином змінювати на множині нульової міри в R^N : рівність (Д13.1.4.6) (а отже і рівність (Д13.1.4.8)) при цьому залишиться вірною. Справа в тому, що вказана зміна не впливає на значення правих частин згаданих рівностей.

Д13.1.5. Часткові (маргінальні) розподіли випадкових векторів

Поставимо таке питання. Нехай вектор z складається з деякої частини компонент N -вимірному вектора x . Як, знаючи розподіл вектора x , знайти розподіл вектора z ? Такі розподіли називають *частковими або маргінальними*. Зокрема, як знайти розподіли координат (компонентів) випадкового вектора за відомим його розподілом?

Поставлена задача має нескладний розв'язок. Нехай, для простоти позначень, вектор $z = (z_1, z_2, \dots, z_M)$ складається з перших M координат вектора $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ ($M \leq N$). Досить знайти функцію розподілу z . Позначимо її $F_z(x)$. Маємо

$$F_z(x) = P(z_1 < x_1, z_2 < x_2, \dots, z_M < x_M) = P(x_1 < x_1, x_2 < x_2, \dots, x_M < x_M) = \\ = P(x_1 < x_1, x_2 < x_2, \dots, x_M < x_M, x_{M+1} < +\infty, \dots, x_N < +\infty)$$

(остання рівність випливає з того, що подія $\{x_{M+1} < +\infty, \dots, x_N < +\infty\}$ є вірогідною). Одержаний вираз дорівнює $F_x(x_1, x_2, \dots, x_M, +\infty, \dots, +\infty)$, де F_x — функція розподілу x . Отже одержано рівність

$$F_z(x_1, x_2, \dots, x_M) = F_x(x_1, x_2, \dots, x_M, +\infty, \dots, +\infty), \quad (\text{Д13.1.5.1})$$

що й розв'язує задачу.

Припустимо, що вектор x має щільність ймовірності f_x . Покажемо, що тоді вектор z також має щільність розподілу f_z (у просторі R^M) і вкажемо, як її знайти. Користуючись рівностями (Д13.1.5.1) і (Д13.1.4.6), одержуємо

$$F_z(x_1, x_2, \dots, x_M) = \int_{-\infty}^{x_1} \int_{-\infty}^{x_2} \dots \int_{-\infty}^{x_M} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_x(y_1, y_2, \dots, y_M, y_{M+1}, \dots, y_N) dy_1 dy_2 \dots dy_M y_{M+1} \dots dy_N = \\ = \int_{-\infty}^{x_1} \int_{-\infty}^{x_2} \dots \int_{-\infty}^{x_M} f_z(y_1, y_2, \dots, y_M) dy_1 dy_2 \dots dy_M, \quad (\text{Д13.1.5.2})$$

де

$$f_z(y_1, y_2, \dots, y_M) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_x(y_1, y_2, \dots, y_M, y_{M+1}, \dots, y_N) dy_{M+1} \dots dy_N. \quad (\text{Д13.1.5.3})$$

Рівності (Д13.1.5.2), (Д13.1.5.3) доводять існування щільності f_z , причому рівність (Д13.1.5.3) дає спосіб її знаходження за наступним правилом:

Д13.1.5.1. Правило знаходження часткової щільності f_z . Для знаходження щільності розподілу f_z треба проінтегрувати щільність f_x по множині R^{N-M} за всіма $N-M$ змінними, що не входять в число координат вектора z .

Для дискретного випадку, якщо є заданими ймовірності $P_{i_1 i_2 \dots i_N}$ (див. позначення перед рівністю (Д13.1.4.2)), розшукувати функцію розподілу z може виявитися недоцільним. Буває зручнішим визначити ймовірності

$$P_{i_1 i_2 \dots i_M} = P(z_1 = x_{i_1}^1, z_2 = x_{i_2}^2, \dots, z_M = x_{i_M}^M).$$

Враховуючи, що подія $\sum_{i_{M+1} \dots i_N} \{x_{M+1} = x_{i_{M+1}}^M, \dots, x_N = x_{i_N}^N\}$ є вірогідною, остання

ймовірність дорівнює

$$\sum_{i_{M+1} \dots i_N} P\{x_1 = x_{i_1}^1, \dots, x_M = x_{i_M}^M, x_{M+1} = x_{i_{M+1}}^M, \dots, x_N = x_{i_N}^N\} = \sum_{i_{M+1} \dots i_N} P_{i_1 \dots i_M i_{M+1} \dots i_N}.$$

Бачимо, що має місце рівність

$$P_{i_1 i_2 \dots i_M} = \sum_{i_{M+1} \dots i_N} P_{i_1 \dots i_M i_{M+1} \dots i_N}. \quad (\text{Д13.1.5.4})$$

Наступне правило є дискретним аналогом правила Д13.1.5.1 і також сформульовано у формі, що не залежить від конкретно обраних компонент для вектора z .

Д13.1.5.2. Правило знаходження розподілу дискретного вектора z . Нехай вектор z утворено підмножиною компонент дискретно розподіленого вектора x : $z = (x_k, x_l, \dots, x_m)$, де $1 \leq k < l < \dots < m \leq N$. Для знаходження ймовірності $P(x_k = a, x_l = b, \dots, x_m = c)$, де a, b, \dots, c — числа з множин X_k, X_l, \dots, X_m , відповідно, треба виконати підсумовування величин $P_{i_1 i_2 \dots i_N}$ за всіма значеннями всіх індексів, окрім i_k, i_l, \dots, i_m . Останнім треба надати фіксованих значень, що відповідають обраним значенням a, b, \dots, c .

Правило (Д13.1.5.2) та рівність (Д13.1.5.4) у двовимірному випадку виглядають зовсім просто. Якщо $z = (x, h)$ (застосовуються позначення, що введені перед рівністю (Д13.1.4.3)), то маємо співвідношення:

$$P(\mathbf{x} = x_i) = \sum_j P_{ij}, \quad P(h = y_j) = \sum_i P_{ij}, \quad (\text{Д13.1.5.5})$$

де у першому випадку сума береться по всім значенням індексу j , а у другому — по всім значенням індексу i .

Д13.1.6. Розподіли випадкових векторів з взаємно незалежними компонентами

У попередньому підрозділі ми бачили, що розподіл випадкового вектора, зокрема, повністю визначає розподіл кожної його координати (в даному підрозділі термін «частинний розподіл» буде відноситися тільки до розподілів окремих координат). В той же час розподіли навіть всіх координат випадкового вектора ще не визначають розподіл ймовірностей самого вектора. Є багато прикладів різних розподілів випадкових векторів, що мають одні й ті ж самі частинні розподіли (див., наприклад, [42]).

Втім є принаймні одна важлива ситуація, коли розподіли компонент випадкового вектора все-таки визначають розподіл самого вектора. Тут мається на увазі ситуація, коли компоненти вектора є незалежними випадковими величинами.

Нехай $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$. Припустимо, що x_1, x_2, \dots, x_N — взаємно незалежні випадкові величини. Позначимо $F(\mathbf{x})$ функцію розподілу вектора \mathbf{x} , а через $F_i(x_i)$ — функцію розподілу випадкової величини (в.в.) x_i , $1 \leq i \leq N$. З незалежності компонентів \mathbf{x} одразу випливає рівність

$$F(\mathbf{x}) = F_1(x_1) \cdot F_2(x_2) \cdot \dots \cdot F_N(x_N). \quad (\text{Д13.1.6.1})$$

З рівностей (Д13.1.6.1) та (Д13.1.4.9) неважко дійти висновку, що за зробленим припущенням незалежності існування щільності розподілу вектора \mathbf{x} є рівносильним існуванню щільностей розподілів всіх компонентів \mathbf{x} , причому якщо позначити щільність вектора через $f(\mathbf{x})$, а щільність величини x_i — через $f_i(x_i)$, то має місце рівність

$$f(\mathbf{x}) = f_1(x_1) \cdot f_2(x_2) \cdot \dots \cdot f_N(x_N). \quad (\text{Д13.1.6.2})$$

Д13.1.7. Математичне сподівання випадкових векторів і матриць

Поряд з випадковими векторами часто розглядаються також і випадкові матриці. Спочатку коротко нагадаємо деякі допоміжні відомості з алгебри звичайних (не випадкових) матриць.

Надалі матриці (випадкові чи ні) позначатимуться великими латинськими літерами, як правило, напівжирного шрифту або малими літерами з подвійними індексами у квадратних або круглих дужках. Так, вирази:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_{m \times n} = [a_{ij}] = [a_{ij}]_{m \times n}$$

є не що інше як скорочені позначення для матриці

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{Д13.1.7.1})$$

з m рядків та n стовпців. Символ типу $m \times n$ в якості нижнього індексу застосовується, якщо треба підкреслити розмірність матриці. Без спеціальних нагадувань вектори і навіть числа можуть розглядатися як часткові випадки матриць (так, число — матриця розміру 1×1). Вважатимуться відомими основні правила дій над матрицями і умови, коли ці дії є визначеними: додавання та множення матриць, множення матриці на число, транспонування та знаходження оберненої матриці. Транспонування матриці (як і вектора) позначається значком $'$. За умовчужанням позначка типу \mathbf{x} означає вектор-стовпчик (позначення Д13.1.1.7). Звідси випливає, що вираз типу $\mathbf{x}'\mathbf{y}$, де \mathbf{x} та \mathbf{y} — вектори однакової розмірності n , є число — так званий скалярний добуток \mathbf{x} і \mathbf{y} :

$$\mathbf{x}'\mathbf{y} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n, \quad (\text{Д13.1.7.2})$$

а $\mathbf{x}\mathbf{y}'$, де вектори \mathbf{x} і \mathbf{y} мають розмірності m і n відповідно (тут не обов'язково $m = n$), є матриця $[x_i y_j]_{m \times n}$:

$$\mathbf{x}\mathbf{y}' = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \dots & x_1 y_n \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \dots & x_2 y_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_m y_1 & x_m y_2 & \dots & x_m y_n \end{pmatrix} \quad (\text{Д13.1.7.3})$$

(тут x_i та y_j — координати векторів \mathbf{x} та \mathbf{y} відповідно). Якщо у рівності (Д13.1.7.2) буде $\mathbf{x} = \mathbf{y}$, то одержимо рівність

$$\mathbf{x}' \mathbf{x} = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2. \quad (\text{Д13.1.7.4})$$

Корінь квадратний з величини $\mathbf{x}' \mathbf{x}$ зветься модулем або нормою або довжиною вектора \mathbf{x} і позначається надалі $\|\mathbf{x}\|$.

Символом A^{-1} позначається обернена матриця до A . Визначник A позначається $\det A$ або $|A|$.

Д13.1.7.1. Означення. Випадковою називатиметься матриця, елементи якої є випадковими величинами.

Зауважимо, що всі вищезгадані операції над матрицями і векторами, а також функції від них, визначаються однакою чином і мають зміст незалежно від того, є розглядувані матриці і вектори випадковими чи звичайними. В той же час більшість операцій, що буде введено нижче, має змістовність лише для випадкових матриць та векторів.

Д13.1.7.2. Означення. Математичним сподіванням випадкової матриці називається матриця, що складена з математичних сподівань елементів даної матриці.

Тобто, для матриці $\mathbf{Z} = [z_{ij}]$ буде $M\mathbf{Z} = [Mz_{ij}]$, де M символ математичного сподівання; докладніше, якщо

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} & \dots & z_{1n} \\ z_{21} & z_{22} & \dots & z_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_{n1} & z_{n2} & \dots & z_{nn} \end{pmatrix},$$

то

$$M\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} Mz_{11} & Mz_{12} & \dots & Mz_{1n} \\ Mz_{21} & Mz_{22} & \dots & Mz_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Mz_{n1} & Mz_{n2} & \dots & Mz_{nn} \end{pmatrix}. \quad (\text{Д13.1.7.5})$$

Зокрема, якщо $\mathbf{x}' = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, то $M\mathbf{x}' = (M\mathbf{x})' = (Mx_1, Mx_2, \dots, Mx_N)$.

Д13.1.7.3. Зауваження. Нехай A, B — не випадкові матриці, Z — випадкова матриця. Неважко переконатися, що

$$M(AZ) = A(MZ), \quad (\text{Д13.1.7.6})$$

Аналогічно, має місце рівність

$$M(ZB) = (MZ)B. \quad (\text{Д13.1.7.7})$$

Сформулюємо деякі властивості математичного сподівання випадкових матриць. Звичайно, всі умови узгодженості дій над матрицями, про які йтиме мова, вважатимуться виконаними.

Д13.1.7.4. Властивості.

1) Нехай A, B, C — не випадкові матриці, Z — випадкова матриця. Тоді має місце рівність

$$M(AZB) + C = A(MZ)B + C. \quad (\text{Д13.1.7.8})$$

Зокрема, якщо x — випадковий вектор, A — не випадкова матриця, то

$$M(Ax) = A(Mx). \quad (\text{Д13.1.7.9})$$

2) Якщо x та h — випадкові вектори, а A, B — не випадкові матриці, то

$$M(Ax + Bh) = A(Mx) + B(Mh). \quad (\text{Д13.1.7.10})$$

Зокрема, для довільних дійсних або комплексних чисел a, b маємо

$$M(ax + bh) = a(Mx) + b(Mh). \quad (\text{Д13.1.7.11})$$

□ Обидві властивості є наслідками означення математичного сподівання випадкової матриці і рівностей (Д13.1.7.6), (Д13.1.7.7).

Д13.1.8. Коваріаційні оператори і коваріаційні матриці випадкових векторів

Позначимо $L^{2, fin}$ множину випадкових векторів, кожна координата яких є випадковою величиною із скінченим моментом другого порядку.

Д13.1.8.1. Означення. Введемо оператор C , що є визначеним на прямому добутку $L^{2, fin} \times L^{2, fin}$ (тобто на парах векторів (x, h)): $x \in L^{2, fin}, h \in L^{2, fin}$) рівністю

$$C(x, h) = M(x - Mx)(h - Mh)'. \quad (\text{Д13.1.8.1})$$

Оператор C зветься *коваріаційним оператором* або *оператором коваріації*. Матриця з правої частини (Д13.1.8.1) зветься *коваріаційною матрицею* або *матрицею коваріацій* векторів x, h .

Таким чином, в прийнятих позначеннях C — оператор, $C(x, h)$ — матриця. Елементом цієї матриці, що знаходиться на перетині її i -го рядку та j -го стовпця, є коваріація величин x_i та h_j , а розмірність дорівнює $m \times n$, де m — розмірність вектора x , n — розмірність вектора h . Так що має місце рівність

$$C(x, h) = [\text{cov}(x_i, h_j)]_{m \times n},$$

де для випадкових α, β величина $\text{cov}(\alpha, \beta)$ (коваріація α та β) визначається рівністю

$$\text{cov}(\alpha, \beta) = M(\alpha - M\alpha)(\beta - M\beta) = M(\alpha\beta) - M\alpha \cdot M\beta.$$

Д13.1.8.2. Деякі властивості коваріаційних матриць і операторів.

1) Має місце рівність

$$C(x, h) = Mx h' - Mx \cdot Mh'. \quad (\text{Д13.1.8.2})$$

2) Для довільних a, b, c, d та векторів x, h, x^1, x^2, h^1, h^2 мають місце рівності (див. Д13.1.7.3)

$$C(ax^1 + bx^2, h) = a C(x^1, h) + b C(x^2, h), \quad (\text{Д13.1.8.3})$$

$$C(x, ch^1 + dh^2) = c C(x, h^1) + d C(x, h^2). \quad (\text{Д13.1.8.4})$$

3) Якщо A, B — не випадкові матриці, то має місце наступна рівність

$$C(Ax, Bh) = A C(x, h) B'. \quad (\text{Д13.1.8.5})$$

Властивості 1) і 2) легко випливають з означення кореляційних операторів і властивостей 1), 2) математичних сподівань випадкових матриць і векторів. Властивість 3) одержуємо з рівності

$$C(Ax, Bh) = M[Ax - M(Ax)][Bh - M(Bh)]',$$

застосовуючи рівність (Д13.1.7.8):

$$M[A(x - Mx)][B(h - Mh)]' = M[A(x - Mx)(h - Mh)'B']$$

(в останній рівності використовувалася ще відома властивість транспонування матриць $(X Y)' = Y' X'$). Знову використовуючи (Д13.1.7.8), а також (1.7.9), з останнього виразу, одержуємо праву частину рівності (1.8.5).

Д13.1.8.3. Означення. Коваріаційною або дисперсійною матрицею випадкового вектора x називається матриця $C(x, x)$. Позначатиметься ця матриця надалі як $D(x)$ (на відміну від позначення дисперсії скалярної випадкової величини літера «д велике» тут набирається напівжирним шрифтом).

Якщо $x' = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, то, згідно з означенням, (i, j) -й елемент матриці $D(x) \in cov(x_i, x_j)$. Розмірність цієї матриці є $N \times N$. Елемент (i, i) її головної діагоналі дорівнює $D(x_i)$, де D — символ дисперсії в.в. У зв'язку з такою структурою матриця $D(x)$ інколи називається ще коваріаційно-дисперсійною.

Д13.1.8.4. Деякі властивості матриці $D(x)$.

1) $D(x) = M x x' - M x M x'$.

2) Для довільної сталої a і сталого вектора b має місце рівність

$$D(ax + b) = a^2 D(x).$$

3) Якщо x — скаляр, то $D(x) = D(x)$.

4) Для довільної невикладкової матриці A має місце рівність

$$D(Ax) = AD(x)A^c \quad (\text{Д13.1.8.6})$$

5) $D(x)$ є симетричною матрицею.

6) $D(x)$ є невід'ємно визначеною матрицею, тобто $\forall x \in R^N$ має місце нерівність

$$x'D(x)x \geq 0. \quad (\text{Д13.1.8.7})$$

Властивість 1) — частковий випадок рівності (Д13.1.8.2). 2) легко впливає з означення $D(x)$. 3) — безпосередній наслідок означення. 4) є частковим випадком рівності (Д13.1.8.5). Властивість 5) є простим наслідком означення $D(x)$ і рівності $cov(\alpha, \beta) = cov(\beta, \alpha)$ для довільних випадкових α, β . Нарешті, властивість 6) є наслідком 4): завдяки цій властивості ліва частина (Д13.1.8.7) дорівнює $D(x'x)$, але $x'x$ є скалярною величиною, тому

$$D(x'x) = D(x'x) \geq 0,$$

що й лишалося довести.

Д13.1.9. Поняття про багатовимірний нормальний розподіл ймовірностей

Без перебільшення, багатовимірний нормальний розподіл є найбільш вживаним розподілом як у теоретичних, так і у прикладних ймовірнісних та статистичних дослідженнях, що використовують поняття багатовимірних випадкових величин.

Нехай $\mathbf{0}$ — нульовий вектор, \mathbf{I} — одинична матриця:

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

У відповідності з прийнятими вище позначеннями, за необхідністю уточнити їх розмірності, вживаються відповідні індекси, наприклад $\mathbf{0}_p, \mathbf{I}_{p \times p}$.

Д13.1.9.1. Означення. Позначимо $N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ закон розподілу p -вимірного випадкового вектора, компонентами якого є взаємно незалежні нормально розподілені випадкові величини з параметрами $(0,1)$ кожна. Такий вектор будемо називати *стандартним p -вимірним нормальним вектором*.

Таким чином, у позначенні даного закону нижній індекс p вказує на вимірність відповідного випадкового вектора. Якщо ця вимірність однозначно визначається контекстом, то даний індекс може бути і відсутнім, тобто у цьому випадку вживається позначення $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Зокрема, при $p = 1$ розподіл $N(\mathbf{0}, \mathbf{I}) = N_1(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ є одновимірним нормальним розподілом з параметрами $0,1$.

З означення одразу випливає: вектор h , що розподіляється за законом $N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I})$, має нульовий (p -вимірний) вектор математичного сподівання і одиничну коваріаційну матрицю розмірності $p \times p$:

$$Mx = \mathbf{0} = \mathbf{0}_p, \quad Dh = \mathbf{I} = \mathbf{I}_{p \times p}. \quad (\text{Д13.1.9.1})$$

Д13.1.9.2. Означення. Нехай вектор h має розподіл $N_p(\mathbf{0}, \mathbf{I})$, а вектор x визначається рівністю

$$x = Ah + m, \quad (\text{Д13.1.9.2})$$

де A — матриця розмірності $q \times p$, m — вектор розмірності q . Розподіл вектора x назовемо загальним нормальним q -вимірним розподілом.

Для $x = (x_1, x_2, \dots, x_q)'$ синонімами висловлювання « x має нормальний розподіл» є « x розподілений за нормальним законом» або «величини x_1, x_2, \dots, x_q мають сумісний нормальний розподіл». Можливі і інші (близькі за звучанням) варіанти.

Покладемо $S = AA'$ і будемо позначати щойно введений розподіл $N_q(m, S)$. Будемо також писати просто $N(m, S)$ (без нижнього індексу), якщо розмірність не викликає питань або не є суттєвим питанням.

З рівності (Д13.1.9.1) і наведених вище властивостей середніх значень та коваріаційно-дисперсійних матриць випадкових векторів (див. Д13.1.8.5) одразу впливає, що для вектора x типу $N(m, S)$ мають місце рівності:

$$Mx = m, Dx = S. \quad (\text{Д13.1.9.3})$$

Д13.1.9.3. Про збереження нормальності розподілів випадкових векторів при афінних перетвореннях.

Відзначимо одну важливу властивість нормально розподілених випадкових векторів.

Якщо $x \in N_q(m, S)$, а r -вимірний вектор z є афінним перетворенням x , тобто

$$z = Bx + v,$$

де $B = B_{r \times q}$ — не випадкова $(r \times q)$ -матриця, v — r -вимірний не випадковий вектор, то вектор z також має нормальний розподіл, точніше, $z \in N_r(I, K)$, де $I = Bm + v$, $K = BSB'$

□ Маємо $z = Bx + v = B(Ah + m) + v = (BA)h + (Bm + v)$. Зважаючи на означення 1.9.2, лишається помітити, що $(BA)(BA)' = BAA'B' \hat{=} BSB'$ □

Д13.1.9.4. Наслідок. 1) Лінійне перетворення нормально розподіленого вектора є нормально розподіленим вектором. 2) Точніше, якщо $z = Bx$, де $x \in N(m, S)$, B — деяка матриця (узгоджена за розмірністю з x), то $z \in N(Bm, BSB')$.

Це одразу випливає з властивості 1.9.3, якщо взяти $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.

Д13.1.9.5. Наслідок. 1) Сумісний розподіл будь-якої підмножини компонент нормального випадкового вектора є нормальним випадковим вектором.

2) Точніше, якщо q -вимірний вектор \mathbf{x} має розподіл $N(\mathbf{m}, \mathbf{S})$, а вектор \mathbf{x}^j утворюється з \mathbf{x} видаленням його компонентів з номерами $j_1, j_2, \dots, j_k, 1 \leq k < q$, то $(q - k)$ -вимірний вектор \mathbf{x}^j має розподіл $N(\mathbf{m}^j, \mathbf{S}^j)$, де вектор \mathbf{m}^j утворюється з вектора \mathbf{m} таким же чином, що й \mathbf{x}^j з \mathbf{x} , а матриця \mathbf{S}^j утворюється з матриці \mathbf{S} видаленням рядків і стовпців з тими самими номерами j_1, j_2, \dots, j_k .

Перша частина даного наслідку одразу випливає з першої частини наслідку Д13.1.9.4, оскільки утворення з даного вектора нового вектора за допомогою видалення компонентів з фіксованими номерами є лінійним перетворенням. Для доведення другої частини скористуємося другою частиною наслідку Д13.1.9.4. Для цього помітимо, що «вирізання» компонентів з q -вектора можна реалізувати, виконуючи множення зліва цього вектора на матрицю \mathbf{I}^j , що утворена з матриці $\mathbf{I} = \mathbf{I}_{q \times q}$ вилученням з останньої рядків з номерами тих компонентів, що «вирізаються». Отже маємо: $\mathbf{x}^j = \mathbf{I}^j \mathbf{x}$, і лишається у другій частині зазначеного наслідку покласти $\mathbf{B} = \mathbf{I}^j$ і помітити, що результатом операції $(\mathbf{I}^j) \mathbf{S} (\mathbf{I}^j)'$ є вилучення з матриці \mathbf{S} тих самих рядків і стовпців, про які йде мова. \square

Д13.1.9.6. Наслідок. Нехай $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q)'$ має розподіл $N(\mathbf{m}, \mathbf{S})$, $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_q)'$ — дійсний вектор (невипадковий). Тоді лінійна комбінація $c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_q x_q$ має (одновимірний) нормальний розподіл з середнім значенням $\mathbf{c}' \mathbf{m}$ і дисперсією $\mathbf{c}' \mathbf{S} \mathbf{c}$.

Покласти в наслідку Д13.1.9.4 $\mathbf{B} = \mathbf{c}'$. \square

Д13.1.9.7. Наслідок. Якщо величини x_1, x_2, \dots, x_q мають сумісний нормальний розподіл $N(\mathbf{m}, \mathbf{S})$ ($\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_q)'$, $\mathbf{S} = [\sigma_{ij}]_{q \times q}$, то їх сума z є нормально розподіленою випадковою величиною. Її математичне сподівання і дисперсія дорівнюють:

$$Mz = \sum_{j=1}^q m_j, Dz = \sum_{j=1}^q s_{jj}^2 + 2 \sum_{i,j:i < j} s_{ij}.$$

Наступна властивість є характеристичною для нормально розподілених випадкових векторів.

Д13.1.9.8. Теорема. Для того, щоб q -вимірний випадковий вектор x мав нормальний розподіл, необхідно і достатньо, щоб для довільного дійсного (не випадкового) вектора $c = c_q$ випадкова величина $c'x$ була нормально розподіленою випадковою величиною.

Звернімося до питання про існування щільності розподілу вектора $x \in N_q(m, S)$. Якщо ранг дисперсійної матриці S є меншим q , то можна показати, що розподіл x зосереджено у власній підмножині простору R^q , і щільність розподілу у цьому випадку не існує. Припустимо, що ранг S дорівнює q . У цьому випадку щільність f_x існує [41, 42].

Д13.1.9.9. Теорема. Для існування щільності розподілу вектора $x \in N(m, S)$ необхідно і достатньо, щоб коваріаційна матриця S була невиродженою. В цьому випадку щільність розподілу x задається наступною рівністю:

$$f_x(x) = (2\pi)^{-q/2} (\det S)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)'S^{-1}(x-\mu)}. \quad (\text{Д13.1.9.4})$$

Д13.1.9.10. Двовимірний випадок. В якості часткового випадку спеціально розглянемо двовимірний нормальний розподіл. Середнє значення m вектора $x = (x_1, x_2)'$ дорівнює

$$M \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{Д13.1.9.5})$$

а матриця коваріацій S може бути записаною наступним чином:

$$S = M \begin{pmatrix} (x_1 - m_1)^2 & (x_1 - m_1)(x_2 - m_2) \\ (x_2 - m_2)(x_1 - m_1) & (x_2 - m_2)^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1^2 & s_{12} \\ s_{21} & s_2^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{Д13.1.9.6})$$

де s_1^2 є дисперсією x_1 , s_2^2 — дисперсією x_2 , а $s_{12} = s_{21} = cov(x_1, x_2)$ (коваріація між x_1 і x_2). Позначимо r коефіцієнт кореляції між x_1 і x_2 :

$$r = \text{cov}(x_1, x_2) / (Dx_1 D x_2)^{1/2} = \sigma_{12} / (\sigma_1 \sigma_2).$$

Тоді коваріаційна матриця S вектора x може бути записаною у вигляді

$$S = \begin{pmatrix} s_1^2 & r s_1 s_2 \\ r s_1 s_2 & s_2^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{Д13.1.9.7})$$

Неважко пересвідчитись, що матрицею, оберненою до матриці (Д13.1.9.7), є матриця

$$S^{-1} = \frac{1}{1-r^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{s_1^2} & -\frac{r}{s_1 s_2} \\ -\frac{r}{s_1 s_2} & \frac{1}{s_2^2} \end{pmatrix}. \quad (\text{Д13.1.9.8})$$

Щільність імовірності x (щільність сумісного розподілу x_1 і x_2), згідно із рівностями (Д13.1.9.4) і (Д13.1.9.8) дорівнює

$$f_x(x) = \frac{1}{2\pi s_1 s_2} \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-r^2)} \left[\frac{(x_1 - m_1)^2}{s_1^2} - 2r \frac{(x_1 - m_1)(x_2 - m_2)}{s_1 s_2} + \frac{(x_2 - m_2)^2}{s_2^2} \right] \right\}. \quad (\text{Д13.1.9.9})$$

При

$$r = 0 \quad (\text{Д13.1.9.10})$$

щільність (Д13.1.9.9) розпадається у добуток двох щільностей одновимірних нормальних розподілів. Зокрема, бачимо, що за умовою (Д13.1.9.10) величини x_1 і x_2 взаємно незалежні. Нижче останнє спостереження буде узагальнено.

З виразу (Д13.1.9.9) ми бачимо, що щільність нормального розподілу зберігає стале значення на кожному еліпсі

$$\frac{(x_1 - m_1)^2}{s_1^2} - 2r \frac{(x_1 - m_1)(x_2 - m_2)}{s_1 s_2} + \frac{(x_2 - m_2)^2}{s_2^2} = c^2, \quad (\text{Д13.1.9.11})$$

де c — стала. Тобто еліпси (Д13.1.9.11) є лініями рівня щільності розподілу (Д13.1.9.9). Інколи їх називають еліпсами рівних ймовірностей.

У випадку загального q -вимірному розподілу поверхні рівня (еліпсоїди) нормальної щільності ймовірності (Д13.1.9.4) мають рівняння

$$(x - m)' S^{-1} (x - m) = c^2. \quad (\text{Д13.1.9.12})$$

Додаткові відомості з математичної статистики

Д14.1 Параметри розподілів випадкових величин та їх оцінки**Д14.1.1. Постановка задачі статистичного оцінювання**

При імовірнісному аналізі статистичних даних припускається, що вони з'являються згідно з деяким розподілом ймовірностей. Як правило, вгадати або якимось іншим чином визначити точний вигляд цього розподілу неможливо. Але часто досить обґрунтовано можна припустити, що вказаний розподіл ймовірностей (так званий *теоретичний розподіл*) належить деякій цілком конкретній сім'ї розподілів P . У багатьох реальних ситуаціях множина розподілів P припускає параметризацію, тобто існує така множина Q (множина параметрів) що кожному елементу $q \in Q$ однозначним чином відповідає розподіл ймовірностей $P = P_q \in P$. Елемент q називається параметром розподілу $P = P_q$. У такому випадку сім'я розподілів P припускає запис: $P = \{P_q, q \in Q\}$. Якщо при цьому розподіли сім'ї P зосереджені в скінченновимірному евклідовому просторі, то вони характеризуються своїми функціями розподілу, кожна з яких визначається своїм параметром q . Тож для сім'ї F зазначених функцій розподілу також є припустимим запис $F = \{F = F_q, q \in Q\}$, де при кожному q F_q є деякою функцією розподілу. Далі якщо треба буде підкреслити залежність значення F_q не тільки від параметру, а й від аргументу цієї функції, то будуть використовуватися записи типу $F_q(x)$ або $F(x; q)$.

Одним з вихідних умов різних задач математичної статистики є припущення про наявність експериментальних (вибіркових) даних x_1, x_2, \dots, x_n , $n \geq 1$ щодо процесу або явища, яке вивчається. Такі експериментальні дані називаються вибіркою, а число n — її об'ємом.. Вибіркові дані можуть мати різну природу. Дуже часто вибірка являє собою набір дійсних чисел, і тоді вважають, що ці числа є реалізацією деякої скалярної випадкової величини, яку надалі позначатимемо x .

Природа параметру q також може бути різною. У прикладних дослідженнях найчастіше q є дійсним вектором: $q = (q_1, \dots, q_m)$, $m \geq 1$. У відповідності із сказаним вище координати цього вектора принаймні частково є невідомими.

Однією з найважливіших задач математичної статистики є задача про оцінку (тобто про наближене визначення) параметру теоретичного розподілу q за допомогою вибірки x_1, x_2, \dots, x_n .

Хороша оцінка параметру q надає можливість виконувати розрахунки, що базуються на знанні теоретичного розподілу. Інколи таку оцінку зробити важко, і тоді задовольняються оцінкою лише частини координат вектора q , які характеризують теоретичний розподіл хоча б частково. Для вище введеної величини x , реалізаціями якої є вибіркові дані, найбільш важливими є її так звані характеристики центру або розташування та розкиду або відхилення. Характеристики першого типу характеризують в тому чи іншому розумінні центральні значення з тих, які може приймати величина x , а характеристики другого типу дають уявлення про можливі відхилення від таких центральних значень.

За центральне значення випадкової величини ξ найчастіше приймають одне з наступних чисел:

- *математичне сподівання* (середнє значення) випадкової величини x — позначається Mx або Ex
- *медіану* випадкової величини — позначається $med x$;

Нагадаємо, що математичне сподівання випадкової величини x — це число, яке обчислюється за однією з формул:

а) $Mx = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$ - для абсолютно неперервних випадкових величин із

щільністю розподілу $f(x)$.

б) $Mx = \sum_i x_i p_i$ - для дискретних випадкових величин, які приймають

значення x_i з імовірністю p_i ($i = 1, 2, \dots$).

Медіаною ($med\ x$) неперервної випадкової величини x називається найменше з чисел x , для яких $P(x < x) = 0,5$ (P символ ймовірності). Це означає, що число $med\ x$ ділить числову вісь на два інтервали, в які випадкова величина x попадає з однаковою ймовірністю 0,5.

В якості міри відхилення від середнього значення випадкової величини x найчастіше використовують дисперсію Dx і середнє квадратичне відхилення S_x . Вказані показники визначаються рівностями

$$Dx = M(x - Mx)^2, S_x = (Dx)^{1/2}.$$

Д14.1.2. Приклад. Нехай відомо, що спостерігаються значення випадкової величини x , яка має нормальний розподіл ймовірностей. Коротко позначатимемо цей факт як $x \in N(m, S^2)$. Нагадаємо, що нормальність x означає, що ця випадкова величина має щільність розподілу f_x , яка визначається рівністю

$$f_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi S}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2S^2}}.$$

причому $m = Mx$, $S^2 = Dx$.

Припустивши, що m та S^2 є невідомими величинами і використовуючи вищевведені позначення, покладемо $q = (m, S^2)$, отже невідомий параметр є двовимірним дійсним вектором. Враховуючи, що величина m в принципі, може бути довільною, а S — додатною, знаходимо, що

$$Q = (-\infty, +\infty) \times (0, +\infty)$$

тобто Q можна вважати верхньої півплощиною декартової площини.

Д14.1.3. Приклад. Нехай $x \in b(n, p)$, тобто випадкова величина x є кількістю успіхів у схемі n незалежних випробувань Бернуллі з невідомою ймовірністю успіху p в окремому випробуванні.

Роль параметру q грає невідома ймовірність успіху p : $q = p$, $Q = [0, 1]$, тобто Q є інтервалом дійсних чисел з початком у точці 0 і кінцем у точці 1.

Вище вже пояснювалося, що мається на увазі під оцінкою параметра. Надамо цьому роз'ясненню строгої математичної форми.

Д14.1.4. Означення. Будемо називати *статистикою* довільну функцію від вибірових значень.

Наприклад, якщо x_1, x_2, \dots, x_n — числова вибірка, то величина \bar{x} :

$$\bar{x} = (x_1 + x_2 + \dots + x_n) / n \quad (\text{Д14.1.1})$$

є статистикою. Ця статистика називається *вибірковим середнім*.

Д14.1.5. Означення. Під *точковою статистичною оцінкою* невідомого параметра $\theta \in Q$ будемо розуміти статистику $\hat{q} = \hat{q}_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$, що при кожному фіксованому n визначена на множині X^n можливих вибірок (x_1, x_2, \dots, x_n) , приймає значення у множині Q і використовується як наближене значення параметра θ .

Д14.1.6. Зауваження. Дуже часто вибірові значення x_1, x_2, \dots, x_n має сенс розглядати як випадкові величини, і тоді статистики і, зокрема, оцінки параметрів, що робляться на базі вибірки, теж слід вважати випадковими величинами. Якщо вказані статистики приймають значення у скінченновимірних евклідових просторах (зокрема, є просто дійсними функціями), то у цьому випадку мають цілком очевидний зміст такі поняття як функція розподілу оцінки \hat{q} і її числові характеристики: математичне сподівання, дисперсія, квантілі і т.д.

Назвемо деякі показники якості статистичного оцінювання

Д14.1.7. Означення. Оцінка \hat{q} параметра q називається *незміщеною* або *незсуненою*, якщо виконується рівність

$$M\hat{q} = q. \quad (\text{Д14.1.2})$$

Рівність (Д14.1.2) зветься умовою або рівнянням незсуненості.

Властивість незсуненості відноситься до бажаних властивостей статистичних оцінок. Однією з причин цього є той факт, що за виконанням рівності (Д14.1.2) при можливості одержання повторених вибірок і, як наслідок, при можливості одержання кількох значень $\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_m, \dots$ оцінок шуканого значення q останнє є одним з показників центру розташування значень $\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_m, \dots$ в просторі оцінок Q , що уточнює інформацію відносно q . Втім,

при великому значенні показників розсіювання відносно центрального значення величини \hat{q} зазначене уточнення може виявитися незначним, тому до бажаних властивостей оцінки відносять також її малі значення згаданих показників. На малості таких значень базуються порівняння оцінок параметрів за їх *ефективністю* (див. нижче означення Д14.1.8).

Зауважимо, що згадані показники малості розсіювання значень \hat{q} відносно q , в свою чергу, можуть бути різними. Наприклад, якщо множина Q є метричним простором з метрикою r , то в якості показника розсіювання може бути взятим середнє значення відстані між \hat{q} і q , тобто

$$M r(\hat{q}, q).$$

або, що часто є більш зручним, величину

$$d^2 = M r^2(\hat{q}, q). \quad (\text{Д14.1.3})$$

Наприклад, якщо $q = (q_1, \dots, q_m)$, $\hat{q} = (\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_m)$ — точки у евклідовому просторі R^m , то

$$d^2 = M r^2(\hat{q}, q) = [M(q_1 - \hat{q}_1)^2 + \dots + M(q_m - \hat{q}_m)^2],$$

так що величина (1.3) дорівнює тут сумі дисперсій компонент оцінки \hat{q} , а якщо q — дійсне число, то d^2 дорівнює дисперсії оцінки.

Сказаному відповідає наступне означення.

Д14.1.8. Означення. Нехай \hat{q}^1, \hat{q}^2 — дві незміщені оцінки одного й того ж самого параметру q . Тоді оцінка \hat{q}^1 зветься ефективнішою за оцінку \hat{q}^2 , якщо

$$M r^2(\hat{q}^1, q) < M r^2(\hat{q}^2, q).$$

Зокрема, якщо q — числовий параметр, то з двох його незміщених оцінок \hat{q}^1, \hat{q}^2 ефективніша та, яка має меншу дисперсію.

Наведемо ще одну бажану властивість статистичних оцінок, наявність якої гарантує практично правильне визначення параметру q , якщо тільки кількість вибірових значень можна як завгодно збільшувати.

Д14.1.9. Означення. Оцінка $\hat{q} = \hat{q}_n$ параметра q називається *обґрунтованою* або *слухною* або *консистентною*, якщо \hat{q}_n у якому-небудь імовірнісному сенсі прямує до q при $n \rightarrow \infty$.

Зауважимо, що у даному означенні позначення \hat{q}_n відображає залежність оцінки \hat{q} від об'єму вибірки n , а збіжність найчастіше розуміють як збіжність за ймовірністю або з ймовірністю 1 [41,42].

Д14.1.10. Приклад. Нехай q є математичним сподіванням (яке припускається скінченним) деякої випадкової величини x , так що $q = Mx$. Тоді статистика $\hat{q} = \bar{x}$ (див. рівність (1.1)) є незміщеною оцінкою q .

Дійсно,

$$\begin{aligned} M\hat{q} &= M\bar{x} = M[(x_1 + x_2 + \dots + x_n)/n] = [(Mx_1 + Mx_2 + \dots + Mx_n)]/n = \\ &= [(Mx + Mx + \dots + Mx)]/n = nMx/n = Mx = q. \end{aligned}$$

Д14.1.11. Зауваження. Нагадаємо, що при розгляданні вибірових значень в якості випадкових величин вказані значення є взаємно незалежними і мають один і той самий розподіл, що співпадає з розподілом величини x , реалізаціями якої і являються розглядувані вибірові значення). Дещо із щойно сказаного було використано у викладках прикладу Д14.1.10.

За припущенням скінченності величини Mx^2 неважко переконатися і в консистентності такої оцінки. Дійсно, у цьому випадку величина \bar{x} як середнє арифметичне незалежних однаково розподілених випадкових величин прямує до $q = Mx$ за ймовірністю в силу закону великих чисел [41,42].

Д14.1.12. Зауваження. Будь-яке вибірове значення x_i , $1 \leq i \leq n$, також є незсуненою оцінкою Mx . Це одразу впливає з зауваження 11. Але така оцінка менш ефективна, ніж оцінка \bar{x} , оскільки $Dx_i = Dx$, а $D\bar{x} = Dx/n$, де D — символ дисперсії випадкової величини.

Д14.1.13. Зауваження. Не слід вважати, що оцінка \bar{x} є найкращою з можливих оцінок Mx . Наприклад, якщо x рівномірно розподілена на відрізку $[a, b]$ з

невідомими кінцями a, b , то оцінка $\hat{q} = (x_{(1)} + x_{(n)})/2$, де $x_{(1)}$ та $x_{(n)}$ — найменше та найбільше вибіркові значення відповідно, є ефективнішою за \bar{x} [43].

Д14.2. Метод максимальної правдоподібності оцінювання параметрів

Методи, за допомогою яких можна одержати ті чи інші оцінки невідомих параметрів, є дуже різноманітними [32, 34, 43-50]. Одним з найважливіших методів оцінювання параметрів імовірнісних розподілів за експериментальними даними є так званий метод або принцип максимальної правдоподібності (метод МП або принцип МП; повне скорочення — ММП або ПМП). Ідея цього методу належить видатному англійському математику і статистику Рональду Фішеру. Нижче наводяться основні положення даного метода.

При формулювання основного принципу ММП використовується поняття так званої функції правдоподібності, означення якої зараз буде наведено.

Припустимо, що параметр q , від якого залежить розподіл випадкової величини x , є дійсним вектором: $q = (q_1, q_2, \dots, q_m)$. Зокрема, якщо розмірність m цього вектора дорівнює 1, то параметр є дійсним числом. Позначимо Q множину можливих значень вектора q . Зауважимо, що у реальних ситуаціях дослідник часто має інформацію щодо множини Q (див. вище приклади Д14.1.2 і Д14.1.3). Для знаходження оцінки \hat{q} невідомого параметра q за ММП вводиться так звана *функція правдоподібності* вибірки. При її визначенні будуть використані наступні позначення. Якщо x — дискретна випадкова величина, то вираз $P(x = x; q)$, де x — одне з можливих значень x , позначатиме ймовірність того, що x дорівнює x . При цьому запис q після крапки з комою символізує залежність вказаної ймовірності від значення параметру q . Аналогічно у абсолютно неперервному випадку, тобто за умови існування щільності розподілу, яка залежить від невідомого параметру, позначатимемо цю щільність $f_x(x; q)$.

Д14.2.1. Означення. Нехай x_1, x_2, \dots, x_n — вибірка значень випадкової величини x . Функцією правдоподібності $L = L(x_1, x_2, \dots, x_n; q)$ даної вибірки називається функція параметру $q \in Q$, що визначається рівністю

$$L(x_1, x_2, \dots, x_n; q) = \begin{cases} \prod_{j=1}^n P(x = x_j; q) & \text{у дискретному випадку} \\ \prod_{j=1}^n f_x(x_j; q) & \text{за існуванням щільності розподілу} \end{cases}.$$

Скорочене позначення функції правдоподібності — $L(x; q)$. Зауважимо, що надалі, якщо не буде обумовлене протилежне, $L(x; q)$ розглядатиметься як функція параметра q при фіксованому $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Д14.2.2. Формулювання ММП. Згідно з ММП в якості оцінки \hat{q} невідомого параметра q береться таке значення з множини Q , для якого величина функції правдоподібності $L(x; q)$ є найбільшою.

Д14.2.3. Обґрунтування принципу МП. Позначимо $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ вибірку значень x , що розглядається як набір випадкових величин. Неважко бачити, що у дискретному випадку $L(x; q)$ дорівнює ймовірності $P_q(X = x)$, тобто ймовірності того, що $X = x$ (нижній індекс q підкреслює, що зазначена ймовірність залежить від параметру q). Іншими словами, $L(x; q)$ дорівнює ймовірності одержати саме таку вибірку, що й була одержана в розглядуваних експериментах. Врахування того, що частіше зустрічаються більш ймовірні значення, ніж менш ймовірні, веде до прийняття сформульованого вище принципу МП. У абсолютно неперервному випадку міркування аналогічні. Треба лише врахувати, що $L(x; q)$ дорівнює щільності розподілу вектора X , а найбільш ймовірні значення абсолютно неперервної випадкової величини (байдуже, скалярної чи векторної) містяться в околі точки найбільшого значення її щільності розподілу.

Д14.2.4. Реалізація методу. Якщо $L(x; q)$, $q \in Q$ є диференційовною функцією q , то \hat{q} є розв'язком системи рівнянь

$$\frac{\partial L(x; q)}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Ця система має назву системи *рівнянь максимальної правдоподібності* або просто *рівнянь правдоподібності*. Часто буває зручнішим досліджувати на максимум не функцію правдоподібності $L(\mathbf{x}; \mathbf{q})$, а так звану логарифмічну функцію правдоподібності $\ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q})$ (в силу монотонності логарифмічної функції максимальні значення $L(\mathbf{x}; \mathbf{q})$ і $\ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q})$ приймаються в одних і тих самих точках \mathbf{q}). У цьому випадку для пошуку оцінки параметру маємо систему рівнянь

$$\frac{\partial \ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q})}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

які зветься логарифмічною системою максимальної правдоподібності або просто логарифмічної системою правдоподібності.

Д14.2.5. Приклад. Оцінимо за ММП параметр p схеми Бернуллі з прикладу Д14.1.3. Нехай проведено n незалежних експериментів, результатом кожного з яких є «успіх» або «невдача». Будемо вважати вибірку x_1, x_2, \dots, x_n складаною з одиниць та нулів, записуючи 1 в разі успіху і 0 в разі невдачі. Позначимо кількість одиниць k , тоді кількість нулів дорівнює $n - k$. Очевидно, у даному разі $L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = L(\mathbf{x}; p)$ дорівнює $p^k q^{n-k}$, де $q = 1 - p$ — ймовірність невдачі. Маємо

$$\ln L(\mathbf{x}; p) = k \ln p + (n - k) \ln(1 - p),$$

і рівняння логарифмічної правдоподібності має вигляд

$$\frac{d}{dp} \ln L(\mathbf{x}; p) = 0,$$

$$k/p - (n - k)/(1 - p) = 0,$$

$$k - kp - np + kp = 0,$$

$$k - np = 0,$$

$$\hat{p} = k/n. \quad (\text{Д14.2.1})$$

Отже оцінка \hat{p} ймовірності успіху p за ММП дається рівністю (2.1).

Д14.2.6. Приклад. Оцінимо за ММП параметри μ , σ нормально розподіленої випадкової величини x (приклад Д14.1.3). Виходячи з вигляду щільності розподілу x , маємо

$$L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = L(\mathbf{x}; (m, \sigma)) = \left(\frac{1}{\sqrt{2ps}} \right)^n \prod_{j=1}^n e^{-\frac{(x_j - m)^2}{2s^2}} = \left(\frac{1}{\sqrt{2ps}} \right)^n e^{-\frac{1}{2s^2} \sum_{j=1}^n (x_j - m)^2},$$

звідки

$$\ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = n \left[\ln \frac{1}{\sqrt{2ps}} - \ln \sigma \right] - \frac{1}{2s^2} \sum_{j=1}^n (x_j - m)^2,$$

$$\frac{\partial}{\partial m} \ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = \frac{1}{s^2} \sum_{j=1}^n (x_j - m); \quad \frac{\partial}{\partial s} \ln L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = -\frac{n}{s} + \sigma^{-3} \sum_{j=1}^n (x_j - m)^2,$$

і логарифмічна система рівнянь ММП набуває вигляду

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n (x_j - m) = 0, \\ -n + s^{-2} \sum_{j=1}^n (x_j - m)^2 = 0, \end{cases}$$

З першого рівняння маємо, позначивши його розв'язок \hat{m} :

$$\hat{m} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j.$$

Ця величина вже зустрічалася вище (рівність (Д14.1.1)), була позначена \bar{x} і одержала назву *вибіркове середнє*. Отже оцінкою параметра m з ММП є величина

$$\hat{m} = \bar{x}. \quad (\text{Д14.2.2})$$

З другого рівняння, позначивши відповідний розв'язок \hat{s} знаходимо

$$\hat{s} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2}. \quad (\text{Д14.2.3})$$

Оцінки, що знайдені з ММП, володіють багатьма важливими властивостями, однією з яких є наступний принцип.

Д14.2.7. Принцип інваріантності для ММП. Нехай $g: Q \rightarrow Y \subset R^k$ — деяка функція ($1 \leq k \leq m$). Тоді якщо $\hat{\mathbf{q}}$ — оцінка ММП параметра \mathbf{q} , то $g(\hat{\mathbf{q}})$ — оцінка за ММП параметра $g(\mathbf{q})$.

Доведення принципу Д14.2.7 можна знайти у [44]. Зазначений принцип часто буває зручно використовувати для уникнення зайвих викладок. Наприклад, якщо в умовах попереднього прикладу треба оцінити за ММП

дисперсію (σ^2), а не середньоквадратичне відхилення (σ), то немає потреби заново складати рівняння ММП: шукана оцінка дорівнює $\hat{s}^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2$.

Д14.2.8. Зауваження. Встановлено, що за широких умов оцінки, що одержані за МНК, є консистентними (означення Д14.1.9).

На даний час розв'язано багато питань, що пов'язані з чисельними реалізаціями ММП.

Зауважимо, що ММП можна ефективно застосовувати і навіть у випадках, коли функція правдоподібності не є диференційованою.

Д14.2.9. Приклад. Нехай x є випадковою величиною, що розподілена рівномірно на проміжку $[q_1, q_2]$, причому граничні значення q_1, q_2 не відомі. Треба оцінити граничні значення і математичне сподівання x за ММП.

Для розв'язання задачі покладемо $\mathbf{q} = (q_1, q_2)$. Маємо

$$f_x(x; \mathbf{q}) = \begin{cases} \frac{1}{q_2 - q_1}, & q_1 \leq x \leq q_2, \\ 0, & \text{якщо } x \text{ поза } [q_1, q_2]. \end{cases}$$

Тож позначивши $x_{(1)}$ і $x_{(n)}$ найменше і найбільше значення серед вибірових значень x_1, x_2, \dots, x_n , одержимо вираз для функції правдоподібності:

$$L(\mathbf{x}; \mathbf{q}) = h(x_{(1)} - q_1) h(q_2 - x_{(n)}) \frac{1}{(q_2 - q_1)^n}.$$

де $h(x)$ — функція Хевісайда (ця функція визначена на всій дійсній прямій і дорівнює 1 для невід'ємних x і 0 для від'ємних x). Зрозуміло, що ця функція відмінна від 0 лише для тих (q_1, q_2) , для яких q_1 лежить не правіше точки $x_{(1)}$, а q_2 — не лівіше точки $x_{(n)}$. При цьому дріб у правій частині останньої рівності приймає максимальне значення, коли різниця $q_2 - q_1$ буде найменшою, тобто $q_1 = x_{(1)}$, $q_2 = x_{(n)}$. При вказаних значеннях q_1, q_2 множник перед дробом у виразі для $L(\mathbf{x}; \mathbf{q})$ приймає своє максимальне значення 1. Отже в якості оцінки $\hat{\mathbf{q}}$ за ММП одержано

$$\hat{\mathbf{q}} = (\hat{q}_1, \hat{q}_2) = (x_{(1)}, x_{(n)}).$$

Для остаточного розв'язання задачі скористаємося принципом інваріантності Д14.1.3.17, згадавши, що для рівномірно розподіленої на відрізку $[q_1, q_2]$ випадкової величини X має місце рівність

$$Mx = (q_1 + q_2) / 2.$$

Отже застосувавши згаданий принцип інваріантності, одержимо

$$\hat{Mx} = (x_{(1)} + x_{(n)}) / 2.$$

Звертаємо увагу, що в якості оцінки середнього значення x тут *не пропонується* середнє вибіркве значення (див. зауваження 1.13).

Наприкінці підрозділу зауважимо, що існує багато інших статистичних методів оцінки невідомих параметрів. Наприклад, назвемо метод підстановки емпіричного розподілу, метод моментів, метод найменших квадратів, метод мінімуму χ^2 . З цими методами можна ознайомитися за підручниками та монографіями [31-34, 43-50]. Метод найменших квадратів в задачах оцінювання параметрів емпіричних залежностей розглядається і в даній роботі в розділі 5.

Д14.3. Інтервальне оцінювання

Методи оцінювання параметрів розподілів, про які йшла мова вище, є точковими. Тобто якщо параметр q є елементом деякої множини (простору параметрів) Q , то і його оцінка \hat{q} є елементом цього ж простору. Припустимо, що невідомий параметр q розподілу ймовірностей або деякої залежності є дійсним вектором — елементом простору R^m :

$$q = (q_1, \dots, q_m). \quad (\text{Д14.3.1})$$

Д14.3.1 Означення. Нехай $a \in [0,1]$ — дійсне число. Назвемо довірчим прямокутником (або m - вимірним інтервалом) рівня a для параметру q вигляду (Д14.3.1) m -вимірний прямокутник (інтервал)

$$V_a = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_m, b_m] \quad (\text{Д14.3.2})$$

(тобто $V_a = \{ x = (x_1, \dots, x_m): a_i \leq x_i \leq b_i \}$), в якому числа a_i, b_i є випадковими величинами, причому

$$P(q \in V_a) = 1 - a. \quad (\text{Д14.3.3})$$

У випадку $m = 1$, тобто коли q є числовим параметром, довірчий прямокутник називається довірчим інтервалом. В цьому випадку V_a є інтервалом дійсної осі і рівність (3.3) записується як

$$P(a \leq q \leq b) = 1 - a, \quad (\text{Д14.3.3})'$$

де a, b — деякі випадкові величини. Число $1 - a$ називають *надійністю* довірчого інтервалу, а також *коефіцієнтом довіри* або *довірчою ймовірністю*.

Підкреслимо, що в рівностях (Д14.3.3), (Д14.3.3)' параметр q вважається невідомою фіксованою величиною, але не випадковою величиною. На відміну від ситуації, коли, наприклад, в рівності (3.3)' q є випадковою величиною, а a, b — не випадкові, подію $\{ a \leq q \leq b \}$ слід розуміти не як « q попадає в інтервал $[a, b]$ », а як «інтервал $[a, b]$ накриває q ».

Зауважимо, що довірчі множини (прямокутники або інтервали), будучи заданими у явному вигляді, вказують на місце знаходження невідомого параметру. У зв'язку з цим приймається наступне

Д14.3.2. Означення. Довірчі інтервали і прямокутники для параметрів розподілів ймовірностей типу (Д14.3.1) називаються їх інтервальними оцінками.

При явній побудові довірчих інтервалів «рівні» a задаються заздалегідь. Зрозуміло, що чим менший рівень a довірчого інтервалу параметру, тим надійніше така інтервальна оцінка виявляє місце знаходження даного параметру. З іншого боку, довірчі інтервали надто високої надійності можуть мати такі великі розміри, що перестають бути інформативними. На практиці в якості α часто береться одне з чисел із стандартного набору: 0,1 або 0,05 або 0,01 (тоді відповідні надійності дорівнюють 0,9 або 0,95 або 0,99 відповідно).

В даний час відомі точні або наближені вирази для довірчих інтервалів (прямокутників) для параметрів більшості застосовуваних на практиці розподілів ймовірностей [34, 44-50]. Нижче наводяться явні вирази довірчих інтервалів для параметрів m та s^2 (позначення див. в прикладі Д14.1.2)

нормального розподілу ймовірностей, а також для параметру p біноміального розподілу. Зауважимо, що загальні методи побудови довірчих інтервалів можна знайти, наприклад, в літературі [34, 44-50].

Д14.3.2. Приклад. Довірчі інтервали для середнього значення m і дисперсії S^2 нормального розподілу ймовірностей.

Нехай x_1, \dots, x_n — вибірка значень нормально розподіленої випадкової величини з невідомими математичним сподіванням і дисперсією. Тоді інтервал

$$A = \left[\bar{x} - U_{1-\frac{a}{2}}^t \cdot \frac{S}{\sqrt{n}}; \bar{x} + U_{1-\frac{a}{2}}^t \cdot \frac{S}{\sqrt{n}} \right], \quad (\text{Д14.3.4})$$

в якому \bar{x} — вибіркове середнє, S — вибіркове середньоквадратичне відхилення: $S = (S^2)^{1/2}$, $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)^2$ — вибіркова дисперсія, U_b^t — квантиль рівня b розподілу Стюдента з $n - 1$ степенем свободи, є довірчим інтервалом рівня a для середнього значення m даного розподілу. Інтервал

$$B = \left[\frac{(n-1)S^2}{U_{1-\frac{a}{2}}^c}; \frac{(n-1)S^2}{U_{\frac{a}{2}}^c} \right], \quad (\text{Д14.3.5})$$

в якому U_b^c — квантиль рівня b розподілу χ^2 з $n - 1$ степенем свободи, є довірчим інтервалом рівня a для дисперсії S^2 даного розподілу.

Д14.3.3. Приклад. Довірчий інтервал для параметру p біноміального розподілу.

Нехай в n випробуваннях Бернуллі успіх мав місце m разів. Нехай P_1, P_2 — два додатних числа, $0 < P_1 \leq 0,5 < P_2 < 1$. Тоді інтервал (\underline{p}, \bar{p}) , де

$$\underline{p} = \frac{m}{(n-m+1) \cdot U_{P_2}^F(2(n-m+1), 2m) + m},$$

$$\bar{p} = \frac{(m+1) \cdot U_{1-P_1}^F(2(m+1), 2(n-m))}{n-m+(m+1) \cdot U_{1-P_1}^F(2(m+1), 2(n-m))},$$

$U_b^F(x, y)$ — квантиль рівня b F - розподілу Фішера з (x, y) степенями свободи, є довірчим інтервалом з коефіцієнтом довіри $P_2 - P_1$ (тобто рівня $1 - P_2 + P_1$) [47]. Зауважимо, що таблиці квантилів F - розподілу наводяться у більшості посібників з теорії ймовірностей і математичної статистики, а також можуть бути одержані за допомогою сучасних комп'ютерних систем математичного забезпечення. Виключно повні таблиці зазначених квантилів містяться в роботі [48]. В роботі [46] можна знайти таблиці самих довірчих інтервалів, втім, зазначені інтервали можна одержувати безпосередньо за допомогою згаданих комп'ютерних програм. Нарешті, в літературі можна знайти і більш прості асимптотичні вирази (наближені) границь довірчих інтервалів для ймовірності успіху у схемі Бернуллі (див., наприклад, [45-49]).

Д14.4. Основні положення теорії перевірки статистичних гіпотез

Під *статистичною* гіпотезою в математичній статистиці розуміють будь-яке припущення щодо властивостей теоретичного розподілу ймовірностей (див. початок розділу Д14.1.1) спостережуваних даних. Дуже часто досліднику доводиться висувати дві гіпотези: *основну і альтернативну*. Це — гіпотези, що відмінні одна від одної. Що вважати основною гіпотезою і що альтернативною у конкретних випадках — питання досить умовне. Найчастіше основна гіпотеза позначається H_0 , а альтернативна — H_1 .

Д14.4.1. Приклад. Спостерігається вибірка значень випадкової величини x , що має нормальний розподіл з невідомими параметрами m та s , тобто

$$x \in N(m, s). \quad (\text{Д14.4.1})$$

Нехай (m_0, s_0) задана пара чисел. Гіпотеза (основна) H_0 полягає в тому, що $m = m_0$, а $s = s_0$. Коротше це можна записати як

$$H_0: (m, s) = (m_0, s_0). \quad (\text{Д14.4.2})$$

Альтернативною тут може бути гіпотеза

$$H_1: (m, s) \neq (m_0, s_0), \quad (\text{Д14.4.3})$$

тобто що або $m \neq m_0$, або $s \neq s_0$. Можливі і інші варіанти. Наприклад,

$$H_1: m = m_0, s \neq s_0. \quad (\text{Д14.4.4})$$

Д14.4.2. Приклад. Знову виконується (4.1) з невідомими (m, s).

$$H_0: m = m_0. \quad (Д14.4.2)$$

Альтернатива:

$$H_1: m \neq m_0. \quad (4.3)$$

Д14.4.3. Приклад. Розглядаються ті ж самі гіпотези, що й прикладі Д14.4.2, але за умови, що S відоме.

Д14.4.4 Приклад. В якості основної гіпотези береться рівність (Д14.4.1). Щодо параметрів (m, s) нічого не стверджується. Тобто невідомо точно, чи є x нормально розподіленою випадковою величиною (з якими - не будь параметрами). Це лише припущення, яке треба перевірити. Щоб підкреслити «непараметричний» характер цієї гіпотези, використовують записи типу

$$H_0: x \in N(\mu, \sigma). \quad (Д14.4.4)$$

Д14.4.5. Приклад. Є дві вибірки: x_1, \dots, x_n і y_1, \dots, y_n . Першій вибірці відповідає теоретичний розподіл ймовірностей P_x , а другій — розподіл P_h . Обидва розподіли невідомі. Гіпотеза полягає в тому, що вони співпадають:

$$H_0: P_x = P_h. \quad (Д14.4.5)$$

Всі статистичні гіпотези можна розділити на *прості* і *складені* (або *складні*).

Д14.4.6. Означення. Гіпотеза називається простою, якщо вона повністю визначає теоретичний розподіл ймовірностей. Гіпотеза, що не є простою, називається складеною або складною.

Так, основні гіпотези прикладів Д14.4.1 і Д14.4.3 є простими. Інші гіпотези наведених вище прикладів є складними.

Д14.4.7. Основний принцип перевірки статистичних гіпотез

Правило, згідно з яким гіпотеза, що перевіряється, приймається або відхиляється, називається *статистичним критерієм* або просто *критерієм* перевірки гіпотези. Сформулюємо одне загальне правило (або процедуру) перевірки статистичних гіпотез, яке має назву *критерій узгодження*.

Для перевірки статистичної гіпотези H_0 треба мати в розпорядженні статистику $T(x) = T(x_1, \dots, x_n)$ (функцію спостережень — означення Д14.1.4), розподіл якої за умови справедливості H_0 є відомим. Далі множину можливих значень Y даної статистики ділять на дві непересічні частини Y_0 і Y_1 (конкретні способи розбиття залежать від конкретного змісту гіпотези, поки що це питання залишимо в стороні). Таким чином, буде

$$Y = Y_0 \cup Y_1, Y_0 \cap Y_1 = \emptyset. \quad (\text{Д14.4.6})$$

При цьому множина Y_1 обирається таким чином, що ймовірність прийняття в цій множині значення статистикою $T(x)$ є малою, якщо гіпотеза H_0 є вірною. Точніше, задається мале число $e > 0$ (на практиці e часто береться з набору стандартних значень: 0,1 або 0,05 або 0,001; при більш глибокому аналізі треба враховувати можливі наслідки такого вибору [32, 34, 50]) і ставиться вимога

$$P(T(x) \in Y_1 | H_0) = e, \quad (\text{Д14.4.7})$$

де вираз у лівій частині означає ймовірність прийняття статистикою $T(x)$ значення в множині Y_1 за умови, що гіпотеза H_0 є вірною, а сама рівність може бути наближеною. Іноді замість рівності (Д14.4.7) вимагають виконання нерівності, в яку переходить (Д14.4.7) при заміні знаку рівності на знак \leq .

Далі, одержавши вибіркові значення x_1, \dots, x_n , обчислюють значення $T(x)$, і якщо це значення попадає в область Y_1 , то гіпотеза H_0 відхиляється, як така, що суперечить реальним даним. (На практиці, якщо є можливість одержання додаткових вибірових даних, а гіпотеза здається правдоподібною, то її можна не відхиляти одразу, а тільки поставити під сумнів до подальших перевірок.) Якщо ж значення $T(x)$ попало в множину Y_0 , то гіпотеза H_0 приймається як така, що не суперечить статистичним даним. (Тут, звичайно, також можливе подальше коригування ситуації при можливості одержання додаткових даних).

Термінологія, що відповідає описаній процедурі, є наступною. Функцію спостережень $T(x)$ називають *статистикою критерію*. Множина Y_1 має назву *критичної області* або *критичної множини*. Множина Y_0 називається областю (множиною) *прийняття гіпотези*. Число e називається *рівнем значущості критерію*.

Доцільний вибір критичної області, окрім співвідношення (Д14.4.7), може враховувати різні міркування (виконання (Д14.4.7) у загальному випадку не визначає множину Y_1 однозначно). Врахування альтернативної гіпотези часто дозволяє зробити належний вибір. Припустимо, що основна і альтернативна гіпотези мають вигляд, відповідно,

$$H_0 = \{m = m_0\}, H_1 = \{m > m_0\},$$

де m — середнє значення деякої випадкової величини, m_0 — задане число. Нехай в якості статистики критерію $T(x)$ виступає оцінка середнього значення m цієї величини (зокрема, можна вважати, що $T(x) \cong m$). Тоді зрозуміло, що доцільною критичною множиною є півнескінченний інтервал дійсної осі, що лежить правіше деякої точки b_0 . Дійсно, при досить великому b_0 (про конкретний вибір цього числа — трохи нижче) попадання $T(x)$ в множину $[b_0, +\infty)$ свідчить про більше значення m , ніж це очікується у відповідності з гіпотезою H_0 . Конкретне значення b_0 треба обрати так, щоб виконувалася рівність (Д14.4.7), яка у даному випадку набуває вигляду

$$P(T(x) \geq b_0 | H_0) = e, \quad (\text{Д14.4.8})$$

так що $P(T(x) < b_0 | H_0) = 1 - e$, звідки бачимо, що b є квантилем рівня $1 - e$ розподілу статистики $T(x)$, який вона має при справедливості гіпотези H_0 .

Критична множина вигляду $[b_0, +\infty)$ відноситься до класу так званих *однобічних* (односторонніх) критичних множин. Найчастіше на практиці критичні множини мають наступні типи, до доцільності застосування яких буває можливо прийти на основі простих міркувань, аналогічних щойно наведеним:

$$Y_1 = (-\infty, a_0] \quad (\text{лівостороння критична область})$$

$$Y_1 = [b_0, +\infty) \quad (\text{правостороння критична область})$$

$$Y_1 = (-\infty, c_0] \cup [d_0, +\infty) \quad (\text{двостороння критична область})$$

Граничні точки a_0, b_0, c_0, d_0 називаються критичними точками. Позначимо символом U_b квантиль рівня b розподілу статистики критерію $T(x)$, який вона

має при справедливості гіпотези H_0 . Для критичних точок критеріїв рівня значущості ϵ мають місце рівності

$$b_0 = U_{1-\epsilon}, a_0 = U_{\epsilon}, c_0 = U_{\epsilon/2}, d_0 = U_{1-\epsilon/2}, \quad (\text{Д14.4.9})$$

так що для визначення зазначених критичних точок достатньо мати в розпорядженні таблицю квантилів вищезазначеного розподілу статистики критерію $T(x)$.

Д14.4.8. Приклад. Перевірка гіпотези про параметр біноміального розподілу

Нехай ϵ вибірка задано вибірку об'єму n , що складається з нулів та одиниць, що символізують успіхи та невдачі у схемі Бернуллі (див. приклад Д14.2.5). За умовою, гіпотеза H_0 полягає в тому, що ймовірність успіху p не перевищує деякого числа p_0 , тобто

$$H_0 = \{p \leq p_0\}.$$

Альтернативну гіпотезу H_1 оберемо наступним чином:

$$H_1 = \{p > p_0\}.$$

В якості статистики критерію візьмемо кількість одиниць (успіхів) k у вибірці. При справедливості H_0 величина k розподілена за біноміальним законом $b(n, p)$. Вигляд критичної множини визначається альтернативною гіпотезою це правостороння критична область (див. вище) з квантилем рівня $1 - \epsilon$ розподілу $b(n, p)$ в якості критично точки. Зауважимо, що оскільки квантилі біноміального розподілу наводяться не у всіх посібниках із математичної статистики, то буває доцільним використовувати той чи інший асимптотичний критерій з тих що наводяться, наприклад, у [34, 38, 46-50].

Д14.4.9. Приклад. Перевірка гіпотези про значення математичного сподівання нормального розподілу ймовірностей

Нехай x_1, \dots, x_n — вибірка значень нормально розподіленої випадкової величини x з обома невідомими математичним сподіванням m і дисперсією. Треба перевірити гіпотезу, згідно з якою середнє значення x дорівнює заданому числу m_0 , тобто

$$H_0 = \{m = m_0\}.$$

В якості альтернативи візьмемо гіпотезу

$$H_1 = \{m \neq m_0\},$$

а в якості статистики критерію — величину $t = \sqrt{n} \frac{\bar{x} - m_0}{s}$, яка, згідно з теоремою додатку С має t - розподіл Стюдента з $n - 1$ степенями свободи, якщо гіпотеза H_0 є справедливою. Згідно з обраною альтернативою критичну множину рівня e доцільно взяти двосторонньою з квантилями розподілу Стюдента відповідних рівнів згідно з рівністю (Д14.4.9). Зауважимо, що теорія перевірки різноманітних гіпотез для нормального розподілу ймовірностей розвинена дуже добре [34, 38, 44, 50].

В результаті перевірки гіпотез у відповідності з вищевикладеною методикою можуть бути зроблені помилки двох типів. Помилка першого роду a полягає в тому, що буде відкинута гіпотеза H_0 в той час, як вона є вірною. Помилка другого роду b полягає в тому, що H_0 приймається в той час, як вона не є вірною.

Ймовірність помилки першого роду співпадає з ймовірністю в лівій частині рівності (Д14.4.7):

$$a = P(T(x) \in Y_1 | H_0).$$

Отже ймовірність помилки першого роду дорівнює рівню значущості критерію e , точно або наближено — в залежності від того, як розуміти вказану рівність. Якщо замість (Д14.4.7) має місце нерівність (\leq), то ймовірність такої помилки не перевищує e .

Ймовірність помилки другого роду b можна обчислити, якщо, крім H_0 , апріорно може мати місце лише проста гіпотеза H_1 (альтернативна). У цьому випадку шукана ймовірність дорівнює ймовірності того, що статистика $T(x)$ приймає значення в множині Y_0 в той час, як є вірною гіпотеза H_1 :

$$b = P(T(x) \in Y_0 | H_1).$$

Д14.5. Поняття про функцію потужності і оперативну характеристику критерію перевірки статистичної гіпотези

Припустимо, що є деяка параметрична сім'я розподілів ймовірностей $P = \{P_q, q \in Q\}$, причому Q розділено на дві непересічні частини Q_0 і Q_1 :

$$Q = Q_0 \cup Q_1, Q_0 \cap Q_1 = \emptyset.$$

Припустимо також, що деякій (основній) гіпотезі H_0 відповідає множина Q_0 , а альтернативній — множина Q_1 . Це можна інтерпретувати в термінах належності невідомого параметру q тій чи іншій множині:

$$H_0 = \{q \in Q_0\}, H_1 = \{q \in Q_1\}.$$

Можна уявляти справу так, що складні гіпотези H_0 і H_1 складаються з простих гіпотез H_q , де $H_q = \{\text{значення невідомого параметру дорівнює } q\}$, причому $q \in Q_0$ для H_0 і $q \in Q_1$ для H_1 .

Нехай фіксовано $\epsilon > 0$, і побудовано деякий критерій K рівня значущості ϵ для перевірки H_0 проти H_1 , причому $Y_1 = Y_1(\epsilon)$ є відповідною критичною множиною. Позначимо $W(q) = W(q, \epsilon)$ ймовірність того, що $T(x)$ належить Y_1 , якщо істинною є гіпотеза H_q .

Д14.5.1. Означення. Щойно введена функція $W(q)$ називається *функцією потужності* критерію. Значення цієї функції при $q \in Q_1$ має назву *потужності* критерію при альтернативі H_q .

Зауважимо, що критерій перевірки є тим кращим, чим більше значення $W(q)$ при альтернативі H_1 , тобто для $q \in Q_1$. Можна сказати, що критерій тим кращий, чим він потужніший. Це впливає з того, що для більш потужного критерію є більше шансів прийняти правильне рішення, коли основна гіпотеза H_0 є хибною. Що стосується значень функції потужності при $q \in Q_0$, то, враховуючи, що гіпотеза H_0 , взагалі кажучи, є складною, вимагається, щоб виконувалися нерівності

$$W(q) \leq \epsilon, q \in Q_0 \quad (\text{Д14.5.1})$$

(порівняти з (Д14.4.7)). Враховуючи сказане вище стосовно потужності критерію, бажано [34], щоб поруч з умовою (5.1) виконувалися і нерівності

$$W(q) > e, q \in Q_1. \quad (\text{Д14.5.2})$$

Критерії перевірки, для яких виконуються нерівності (Д14.5.1) і (Д14.5.2), називаються *незміщеними*.

Замість функції потужності для характеристики критерію часто використовується так звана *оперативна характеристика* $A(q)$. За означенням, це функція $q \in Q$, що задається рівністю

$$A(q) = 1 - W(q), q \in Q. \quad (\text{Д14.5.3})$$

Таким чином, якщо $W(q)$ є ймовірністю відхилити H_0 , коли є вірною гіпотеза H_q , то $A(q)$, навпаки, є ймовірністю прийняти H_0 , коли є вірною H_q .

Д14.5.2 Про оперативні характеристики процедур статистичного контролю якості виробничої продукції

Важливі застосування оперативні характеристики статистичних критеріїв знаходять, зокрема, у процедурах статистичного контролю якості виробничої продукції. Типовою ситуацією тут є така, в якій Q є відрізком $[0,1]$ дійсної числової осі: $Q = \{0 \leq q \leq 1\}$. Цю параметризацію можна інтерпретувати наступним чином. Є партія виробів, доля бракованих серед яких дорівнює q . За умовою, доля браку не повинна перевищувати деякого заданого числа q_0 . Перевірка такого співвідношення є рівносильною перевірці гіпотези $H_0 = \{q \leq q_0\}$, проти альтернативи $H_1 = \{q > q_0\}$ де q_0 — деяке задане число. Зрозуміло, що гіпотеза H_0 означає тут припущення про достатньо високу якість виробничого процесу, а H_1 — навпаки, про надто низьку. При цьому прості гіпотези $H_q, q \in Q$ (див. вище) полягають у тому, що доля бракованих виробів у сукупності в точності дорівнює q .

У найпростішій ситуації, коли для контролю використовується вибірка виробів фіксованого об'єму, в якості статистики критерію доцільно обрати кількість бракованих виробів, що присутні у даній вибірці. Тоді маємо схему Бернуллі з невідомою ймовірністю успіху («успіх» полягає у появі події «виріб бракований»). Спосіб перевірки такої гіпотези був викладений вище (приклад ...). Взагалі може бути багато різних виробничих ситуацій і методів контролю

якості [50-52]. Кожна процедура вибіркового контролю має свою оперативну характеристику $A(q)$. Її ймовірнісний зміст: значення $A(q)$ дає ймовірність того, що при рівні браку q виробничий процес буде визнаний достатньо якісним. Такою характеристикою завжди повинна супроводжуватися процедура вибіркового контролю, що дістає офіційний статус. Типовий графік функції $A(q)$ представлено на наступному рисунку.

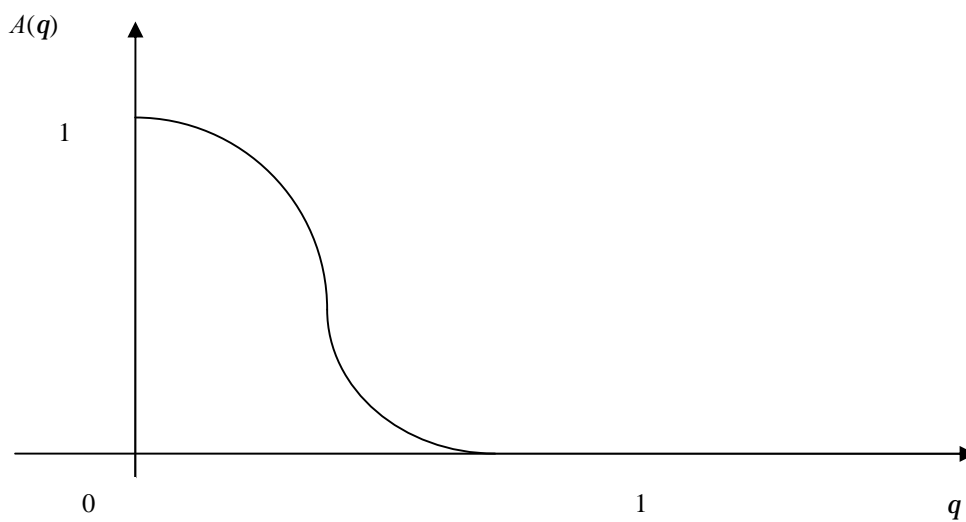


Рис. Д14.1. Графічне зображення типової оперативної характеристики процедури вибіркового контролю

Додаток 15

Розподіли χ^2 , t і F

Д15.1. Означення. Нехай x_1, x_2, \dots, x_n взаємно незалежні однаково розподілені за нормальним законом $N(0,1)$ випадкові величини. Розглянемо випадкову величину

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2. \quad (\text{Д15.1})$$

Її розподіл називається *розподілом χ^2 (хі-квадрат) з n степенями свободи*.

Будемо позначати цей розподіл χ_n^2 або $\chi^2(n)$.

Д15.2. Означення. Нехай x та h — незалежні випадкові величини, причому x має стандартний нормальний розподіл $N(0,1)$, а h — розподіл χ_n^2 . Тоді розподіл випадкової величини

$$\frac{x}{\sqrt{\frac{1}{n}h}}$$

називається *розподілом Стьюдента* або *t -розподілом з n степенями свободи*.

Позначення розподілу Стьюдента: t_n або $t(n)$.

Д15.3. Означення. Нехай x та h — незалежні випадкові величини, причому x має розподіл χ_n^2 , а h — χ_m^2 . Тоді розподіл випадкової величини

$$\frac{mx}{nh}$$

називається *розподілом Фішера з (n, m) степенями свободи*.

Позначення: $F_{n,m}$ або $F(n, m)$.

Всі три зазначені розподіли мають щільності розподілу. Вони володіють багатьма цікавими властивостями і дуже широко використовуються у багатьох розділах математичної статистики та її застосуваннях [31-38, 43-50].

Д15.4. Зауваження. З означень Д15.2 і Д15.3 випливає, що випадкова величина, що має розподіл Фішера $F_{1,m}$, є квадратом випадкової величини, що має розподіл Стьюдента t_m .

В застосуваннях, зокрема, в теорії перевірки статистичних гіпотез дуже важливу роль грає наступна теорема. В її формулюванні використовуються стандартні позначення: для вибірки x_1, x_2, \dots, x_n

$$\bar{x} = (x_1 + x_2 + \dots + x_n) / n \text{ — вибіркоче середнє,}$$

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \text{ — вибіркова дисперсія.}$$

Д15.5. Теорема про статистики \bar{x} , s^2 для вибірок з нормальним теоретичним розподілом ймовірностей.

Нехай x_1, x_2, \dots, x_n — вибірка значень нормально розподіленої випадкової величини $x \in N(m, s)$. Тоді

а) величини \bar{x} і s^2 є взаємно незалежними випадковими величинами;

б) величина

$$\sqrt{n} \frac{\bar{x} - m}{s}$$

має розподіл Стюдента з $n - 1$ степенем свободи;

в) величина

$$\frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

має розподіл χ^2 з $n - 1$ степенем свободи.

Про деякі числові характеристики випадкових величин

З випадковою величиною x можна зв'язати деякі не випадкові величини, що, з одного боку, визначаються розподілом x , а, з іншого боку, самі несуть в собі суттєву інформацію щодо цього розподілу. З огляду на останнє, такі величини називають *числовими характеристиками* випадкової величини (або розподілу ймовірностей випадкової величини). Знання кількох числових характеристик часто дає можливість краще уявити собі суттєві особливості розглядуваного розподілу. Останнє тим більш важливо, що досить часто трапляється так, що деякі числові характеристики x є відомими (можливо, наближено), а сам розподіл не є відомим, і уявлення про нього, нехай і неповне, складають на основі вказаних числових характеристик.

В теоретичних побудовах і в практичному аналізі даних використовується досить значна кількість числових характеристик [42-50], але в розглядуваних в даній роботі питаннях зустрічаються тільки два їх типи: *моменти і квантілі*.

Д16.1. Означення. Нехай k — ціле невід'ємне число. *Моментом* (інакше, початковим моментом) порядку k скалярної випадкової величини x називається число a_k , що визначається рівністю

$$a_k = Mx^k, \quad (\text{Д16.1})$$

де M — символ математичного сподівання випадкової величини. Очевидно, при $k = 1$ одержуємо звичайне математичне сподівання Mx випадкової величини x : $a_1 = Mx$.

Звичайно, тут припускається, що математичне сподівання у правій частині (Д16.1) існує. Нагадаємо також, що у загальному випадку математичне сподівання визначається за допомогою інтегралу Лебега [41,42], але у двох найважливіших з прикладної точки зору випадках: дискретної та абсолютно неперервної випадкової величини це поняття потребує лише досить елементарних засобів. А саме, у дискретному випадку, тобто для випадкової величини x , можливими значеннями якої є не більш ніж злічений набір

значень $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ з ймовірностями прийняття $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ відповідно, за означенням

$$Mx = \sum_n x_n p_n, \quad (\text{Д16.2})$$

де у разі нескінченної кількості доданків сума розуміється як абсолютно збіжний ряд. У абсолютно неперервному випадку, тобто при існуванні щільності розподілу $f(x)$, також за означенням

$$Mx = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx, \quad (\text{Д16.3})$$

де інтеграл розуміється як абсолютно збіжний.

Д16.2. Означення. Нехай k — ціле невід'ємне число. *Центральним моментом* порядку k скалярної випадкової величини x називається число m_k , що визначається рівністю

$$m_k = M(x - Mx)^k. \quad (\text{Д16.4})$$

Центральний момент m_2 носить назву дисперсії і позначається Dx (іноді — $\text{var}x$), так що

$$Dx = M(x - Mx)^2. \quad (\text{Д16.5})$$

Д16.3. Означення. *Квантилем рівня p* ($0 < p < 1$) випадкової величини x (або розподілу x) називається число u_p , що визначається співвідношеннями

$$F(u_p) \leq p, F(u_p + 0) \geq p, \quad (\text{Д16.6})$$

де F — функція розподілу x . Якщо функція розподілу x є неперервною, то u_p є мінімальним коренем рівняння

$$F(x) = p. \quad (\text{Д16.7})$$

Зауважимо, що у випадку строгої монотонності функції F рівняння (Д16.7) має єдиний корінь, і квантиль рівня p можна визначити як таке (єдине) число, значення менше за яке x приймає з ймовірністю p :

$$P(x < u_p) = p. \quad (\text{Д16.8})$$

Відзначимо лише дві найпростіші характеристики розподілів ймовірностей, які визначаються за допомогою моментів і квантилів. Це — характеристики *центру* або *розташування* та характеристики *розсіювання*.

В якості найпоширенішої показника центру розподілу випадкової величини x назвемо Mx — математичне сподівання x , інакше кажучи, середнє значення x , що співпадає з моментом першого порядку a_1 . Зауважимо, що коли уявити розподіл ймовірностей як розподілену одиничну масу на прямій, то Mx є в точності її центром ваги (механічна інтерпретація). Основним конкурентом Mx як показника центру розподілу є квантиль рівня 0,5 — так звана *медіана*. У випадку неперервного розподілу медіана є точкою на дійсній прямій, значення лівіше і правіше якої x приймає з однаковою ймовірністю 0,5. (Механічна інтерпретація цього поняття полягає в тому, що медіана поділяє всю розподілену одиничну масу на дві частини, кожна з яких містить масу 0,5).

Також і характеристики розсіювання значень випадкової величини можуть визначатися як за допомогою моментів, так і за допомогою квантилів. До характеристик першого типу, в першу чергу, відноситься дисперсія (рівність (Д16.5)), а також середньоквадратичне відхилення S_x :

$$S_x = \sqrt{Dx} . \quad (\text{Д16.9})$$

Поширеною квантильною характеристикою розсіювання є так званий міжкватрильний розкид, що визначається як

$$(C_2 - C_1)/2, \quad (\text{Д16.10})$$

це C_1, C_2 — нижній і верхній кватилі розподілу, тобто квантили рівнів 0,25 і 0,75 відповідно.

ЛІТЕРАТУРА

1. Щербань В.Ю., Волков О.И., Щербань Ю.Ю. Математические модели в САПР оборудования и технологических процессов лёгкой и текстильной промышленности. – К.: КНУТД, 2003. – 588 с.
2. Фильчаков П.Ф. Численные и графические методы прикладной математики. —Киев: Наукова думка, 1970 — 792 с.
3. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. — М.: Наука, 1987. — 598 с.
4. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. — М.: Наука, 1978. — 664 с.
5. Сердюк В.П. Расчёт приводов машин лёгкой промышленности. – К.: Техніка, 1978. – 232 с.
6. Гарбарук В.П. Проектирование трикотажных машин. – Л.: Машиностроение, 1980. – 472 с.
7. Князев В.И., Пискорский Г.А., Янкин Л.Н., Голотко А.Л. Работа и усилие сдвига, развиваемые роликовым ровнителем. // Изв. вузов. Технология лёгкой пром-сти. – 1985. - № 3. – с.113-116.
8. Современная технология бесчелночного ткачества. Перематывание и снование. / Ефремов Р.Д., Шевелева Л.В., Дзыга М.П.. – К.: Техніка, 1984. – 152 с.
9. Гарбарук В.П. Расчёт и конструирование основных механизмов челночных швейных машин. – Л.: Машиностроение, 1977. – 231 с.
10. Щербань В.Ю., Хомяк О.Н., Щербань Ю.Ю. Механика нити. – К.: КНУТД, 2002. – 196 с.
11. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Мир, 1990. — 512 с.
12. Самойленко А.М., Перестюк М.О., Парасюк І.О. Диференціальні рівняння. — Київ, Либідь, 2003. — 599 с.
13. Хартман Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения. — М.: Наука, 1970. — 720 с.

14. Цебренько М.В. Ультратонкие синтетические волокна. - М.: Химия, 1991. – 214 с.
15. Шмаков Ю.И., Таран Е.Ю. Структурно-континуальный подход к реологии полимерных материалов // Инженерно-физический журнал // 1970. - №18. - С. 1019- 1024.
16. Придатченко Ю.В., Шмаков Ю.И. Влияние внутренней вязкости и упругости эллипсоидных макромолекул на реологическое поведение разбавленных растворов полимеров. Реологические уравнения состояния // Журнал прикладной механики и технической физики. - 1976. - №3 - С. 94-98.
17. Затонацька Т.Г., Придатченко Ю.В., Таран Є.Ю. Реологічна поведінка розбавлених суспензій деформівних частинок // Доповіді НАН України. – 1998. - №10. – с.88-93.
18. Придатченко Ю.В., Пасечник З.В. Определение реологических характеристик разбавленных суспензий деформируемых частиц // Прикладная механика. – 1985. - Т.21, №6. – С.107-111.
19. Куак Ван Донг, Шмаков Ю.И. Реологические уравнения состояния слабоконцентрированных суспензий деформируемых эллипсоидальных частиц.// Журнал прикладной механики и технической физики. – 1980. - №3 -С.84-90.
20. Jeffery G.V. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid // Proc. Roy. Soc. – 1922. – Vol. A102, №715. - P. 161-179.
21. Резанова В.Г., Придатченко Ю.В., Цебренько М.В. Математическое описание деформирования полимера дисперсной фазы при течении расплавов смесей полимеров // Хим. Волокна. – 2003. - №2.
22. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука. – 1984. – 382 с.
23. Tsebrenko M.V., Rezanova N.M., Vinogradov G.V. Rheology of molten blends of polyoxymethylene and ethylene-vinyl acetate copolymer and the

- microstructure of extrudates as a function of their melt viscosities // Polym. Eng. and Sci. – 1980. – Vol.20, N 15. – P.1023-1028.
24. Taylor G.I. The formation of emulsions in definable fluids of flow // Proc. Roy. Soc. – London, 1934. – Vol.A 146. – P 501-526.
25. Математический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – 847 с.
26. Ахиезер Н.И. Лекции по теории аппроксимации. — М.: Наука, 1965 — 407 с.
27. Лоран П.-Ж. Аппроксимация и оптимизация. — М.: Мир, 1975 — 496 с.
28. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. — М.: Мир, 1986 — 318 с.
29. Бокий В.И., Скатерной В.А., Свистунова Л.Т. Аналитическое описание контуров обувных деталей // Изв. вузов. Технология лёгкой пром-сти. – 1970. – № 4.
30. Скатерной В.А., Веселов В.В. Координатно-трапецеидальный способ аппроксимации фигур // Изв. вузов. Технология лёгкой пром-сти. – 1973. – № 2. – с.72-76.
31. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Исследование зависимостей. — М.: Финансы и статистика, 1985 — 488 с.
32. Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ. Подход с использованием ЭВМ. — М.: Мир, 1982 — 488 с.
33. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. — Москва·Санкт-Петербург·Киев: ДИАЛЕКТИКА, 2007 — 912 с.
34. Ивченко Г.И., Медведев Ю.И. Математическая статистика. — М.: Высшая школа, 1984 — 248 с.
35. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ. — М.: Мир, 1980 — 456 с.
36. Шеффе Г. Дисперсионный анализ. — М.: ФМ, 1963 — 625 с.
37. Ибрагимов Ю.А., Розанов Ю.А. Гауссовские случайные процессы. — М.: Наука, 1970 — 384 с.

38. Тюрин Ю.Н., Макаров А.А. Статистический анализ данных на компьютере. — М.: ИНФРА•М, 1998 — 528 с.
39. Зедгенидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. . — М.: Наука, 1976 — 390 с.
40. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. . — М.: Высшая школа, 1985 — 328 с.
41. Краснитський С.М., Щербань В.Ю. та ін. Векторні випадкові величини та випадкові процеси. — Київ: Конус Ю, 2008 — 191 с.
42. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей. — М.: Наука, 1988 — 448 с.
43. Воинов В.Г., Никулин М.С. Несмещённые оценки и их приложения. — М.: Наука, 1989 — 437 с.
44. Закс Ш. Теория статистических выводов. — М.: Мир, 1975 — 776 с.
45. Боровков А.А. Математическая статистика. — М.: Наука, 1984 — 472с.
46. Большев Л.Н., Смирнов Н.В. Таблицы математической статистики. — М.: Наука, 1983 — 416 с.
47. Браунли К.А. Статистическая теория и методология в науке и технике. — М.: Наука, 1977 — 407 с.
48. Мардиа К., Земроч П. Таблицы F - распределений. — М.: Наука, 1984 — 255 с.
49. Гихман И.И., Скороход А.В., Ядренко М.И. Теория вероятностей и математическая статистика. — Киев: Вища школа, 1979 — 408 с.
50. Справочник по прикладной статистике. В 2-х т., под ред. Э. Ллойда, У. Ледермана, Ю.Н. Тюрина — М.: Финансы и статистика, 1989, 1990.
51. Карташова А.Н., Дунин-Барковский И.В. Технологические измерения и приборы в текстильной и легкой промышленности. — М.: Легкая и пищевая промышленность, 1984 — 307 с.
52. Богатырёв А.А., Филиппов Ю.Д. Стандартизация статистических методов управления качеством. — М.: Издательство стандартов, 1989 — 120 с.

ЗМІСТ

Передмова	3
РОЗДІЛ 1. СИСТЕМИ ЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ	
1.1 Вступні положення	7
1.2 Методи розв'язання систем лінійних рівнянь	9
1.2.1 Формули Крамера	9
1.2.2 Метод Гаусса	13
1.2.3 Ітераційні методи	16
1.3 Деякі математичні моделі технічної механіки, що реалізуються з використанням чисельних методів	21
РОЗДІЛ 2. НЕЛІНІЙНІ РІВНЯННЯ ТА СИСТЕМИ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ	
2.1 Вступні положення	27
2.2 Розв'язання нелінійних рівнянь	27
2.2.1 Відділення коренів	27
2.2.2 Уточнення коренів	30
2.2.2.1 Метод половинного поділу	30
2.2.2.2 Метод Ньютона (метод дотичних)	34
2.2.2.3 Метод ітерацій	37
2.3 Розв'язання систем трансцендентних рівнянь	41
2.3.1 Метод Ньютона	41
2.3.2 Метод Ньютона для системи двох рівнянь	43
2.4 Деякі математичні моделі технічної механіки, що реалізуються з використанням чисельних методів	47
РОЗДІЛ 3. ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ ТА СИСТЕМИ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ	
3.1 Вступні положення	59

3.2 Диференціальні рівняння	59
3.2.1 Основні поняття	59
3.2.2 Теореми про існування та єдиність розв'язку диференціальних рівнянь першого та n-го порядку	61
3.2.3 Методи розв'язання диференціальних рівнянь	63
3.3 Системи диференціальних рівнянь	70
3.4 Деякі математичні моделі з фізичної хімії, що реалізуються з використанням чисельних методів	71
3.4.1 Вступні положення	71
3.4.2 Механізм явища специфічного волокноутворення	72
3.4.3 Математичні методи моделювання реологічної поведінки дисперсних систем	74
3.4.4 Дослідження закономірностей деформування полімеру дисперсної фази при течії розплавів сумішей шляхом математичного моделювання	77
РОЗДІЛ 4. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ	
4.1. Вступні положення	91
4.2. Деякі методи апроксимації функцій	92
4.2.1 Постановка задачі інтерполяції	92
4.2.2. Стандартна інтерполяція за Лагранжем	93
4.2.3 Векторна інтерполяція за Лагранжем	96
4.2.4 Сплайн-інтерполяція	99
4.2.5 Апроксимація за методом найменших квадратів	102
4.3 Деякі математичні моделі прикладної механіки, що реалізуються за допомогою чисельних методів	106
РОЗДІЛ 5. ОЦІНЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЗА МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (МНК) І ЛІНІЙНИЙ РЕГРЕСІЙНИЙ АНАЛІЗ	

5.1 Загальна лінійна модель та оцінювання її параметрів за МНК.	112
5.2. Деякі ймовірнісні припущення та їх наслідки	116
5.3. Довірчі інтервали для параметрів регресії	120
5.4. МНК за наявністю лінійних обмежень	121
5.5. Перевірка гіпотез для лінійної регресії	122
РОЗДІЛ 6. ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ	
6.1 Факторний простір. Фактори та параметри оптимізації	131
6.2. Повні та дробові факторні експерименти	135
6.3. Планування на діаграмах „Склад - Властивість”	139
6.4. Планування із попередньою трансформацією симплексної під області	141
6.5 Деякі математичні моделі фізичної хімії, що реалізуються з використанням чисельних методів	142
Додаток 1	148
Додаток 2	149
Додаток 3	150
Додаток 4	151
Додаток 5	152
Додаток 6	153
Додаток 7	155
Додаток 8	156
Додаток 9	157
Додаток 10	158
Додаток 11	159
Додаток 12	161
Додаток 13	162

Додаток 14	186
Додаток 15	209
Додаток 16	211
Література	214

Навчальне видання

ЩЕРБАНЬ Володимир Юрійович
КРАСНИТСЬКИЙ Сергій Михайлович
РЕЗАНОВА Вікторія Георгіївна

МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ В САПР

Обрані розділи та приклади застосування

ДЛЯ СТУДЕНТІВ, АСПИРАНТІВ ТА МОЛОДИХ СПЕЦІАЛІСТІВ
СПЕЦІАЛЬНОСТІ «ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ПРОЕКТУВАННЯ»

Навчальний посібник

Відповідальний за поліграфічне видання Т.А. Назаревич
Редактор Л.Л. Овечкіна
Коректор Н.П. Біланюк

Підп. До друку ???.??р. ISBN ???-????-??-?. Формат ??x?? ?/?. Папір офсетний.
Друк цифровий. Умовн. др. арк. ?,??. Умовн. фарбо-відб. ?,??.

Облік.-вид.арк. ?,??. Тираж ??. Зам. ???

Дільниця оперативної поліграфії при КНУТД.
01601, ДСП, Київ-11, вул. Немировича-Данченка, 2.

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру ДК № 993 від 24.07.02 р.