

Задания к зачету для аспирантов

Вопросы:

- 1. Определение моделирования. Математическая модель. Классификация математических моделей.**
- 2. Решения нелинейных уравнений: метод деления отрезка пополам.**
- 3. Решения нелинейных уравнений: метод Ньютона (метод касательных).**
- 4. Решения нелинейных уравнений: метод хорд).**
- 5. Понятие о приближении функции. Интерполирование и аппроксимация.**
- 6. Линейная и квадратичная интерполяция.**
- 7. Многочлен Лагранжа.**
- 8. Метод наименьших квадратов.**
- 9. Определение параметров эмпирических формул в случае линейной зависимости.**
- 10. Определение параметров эмпирических формул в случае квадратичной зависимости.**
- 11. Методы оптимизации. Одномерная оптимизация.**
- 12. Метод золотого сечения.**
- 13. Численное интегрирование. Формула прямоугольников.**
- 14. Численное интегрирование. Формула трапеций.**
- 15. Численное интегрирование. Формула парабол (формула Симпсона).**

Задание 1. «Моделирование пространственного распределения электронной плотности в атомах».

Теория. В классической механике для описания движения частиц используются координаты, импульсы частиц и другие физические величины, называемые динамическими переменными. В квантовой механике можно говорить лишь о вероятности того или иного значения динамической переменной, а не об ее определенном числовом значении в данный момент времени и изменении этого значения со временем. Поэтому классическое описание движения частицы и выражение динамических переменных в виде функций времени теряют смысл.

Уравнение Шредингера является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики. Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, т.е. не зависит от времени, уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi .$$

В этом уравнении оператор \hat{H} называют гамильтонианом или оператором энергии. Он имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U ,$$

где m – масса частицы, E – полная энергия, U – потенциальная энергия частицы, ∇^2 – оператор Лапласа, результат действия которого на некоторую функцию, в декартовой системе координат, представляет собой сумму вторых частных производных по координатам:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} .$$

В общем случае пси-функция представляет собой весьма сложную функцию координат и времени, т.е. $\psi = \psi(x, y, z, t)$. Квадрат модуля пси-функции определяет вероятность dW того, что частица будет обнаружена в пределах объема dV

$$dW = |\psi(x, y, z)|^2 dV .$$

Величину $w(x, y, z, t) = \frac{dW}{dV}$ называют плотностью вероятности. Таким образом

$$w(x, y, z, t) = |\psi|^2 .$$

Если произвести интегрирование по всему объему, то мы получим вероятность того, что в момент времени t частица находится где-нибудь. Это вероятность достоверного события. Она равна единице.

$$\int_{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1 .$$

Это условие носит название условия нормировки.

Решение уравнения Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ ищут в виде произведения двух функций

$$\psi = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Одна из которых зависит только от r , другая от углов θ, φ .

Итак, различные состояния водородоподобного атома, могут быть описаны при помощи трёх квантовых чисел n, l, m .

Где n – главное квантовое число ($n = 1, 2, 3 \dots$).

l – орбитальное квантовое число ($l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$).

m – магнитное квантовое число ($-l, -l+1, \dots, l$).

При заданном n , определяющем энергию атома, l может принимать n значений ($l=0,1,\dots,n-1$), но каждому l соответствует ещё $2l+1$ различных значений m , следовательно каждый уровень энергии имеет следующую кратность вырождения

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1+3+5+7+\dots+(2n-1) = n^2.$$

Различные состояния принято обозначать символами, каждый из которых содержит численный коэффициент, равный главному квантовому числу, и буквенные обозначения числа l . Например:

если $n=1, l=0$ – то получается уровень 1s

$n=2, l=0$ – уровень 2s

$n=2, l=1$ – уровень 2p

$n=3, l=0$ – уровень 3s

$n=3, l=1$ – уровень 3p

$n=3, l=2$ – уровень 3d

$n=4, l=0$ – уровень 4s и т.д.

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – называют сферическими функциями Лежандра

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta),$$

где $P_l^m(\cos\theta)$ – присоединенные функции Лежандра

$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

В квантовой механике мы не можем говорить о траектории движения электрона, а можем говорить о вероятности местоположения электрона в той или иной области пространства. Плотность вероятности углового распределения электронов равна

$$Y_{lm}^* \cdot Y_{lm} = |Y_{lm}|^2.$$

Явный вид сферических функций Y_{lm} и соответствующие плотности вероятности приводятся в таблице 1.

Также в среде компьютерной алгебры MAPLE можно составить процедуру, позволяющую получить аналитический вид сферических функций любого порядка. Использовалось то, что сферическую функцию Лежандра также можно представить в виде

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi), \quad \Theta_{lm} = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta),$$

$$\Phi_m = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Здесь полагается, что $m \geq 0$. Для $m < 0$

$$\Theta_{l-|m|} = (-1)^m \Theta_{l|m|}.$$

**Таблица 1. Сферические функции Y_{lm}
и соответствующие плотности вероятности $|Y_{lm}|^2$.**

СОСТОЯНИЕ	Y_{lm}	$ Y_{lm} ^2$
$l=0, m=0$	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$ Y_{00} ^2 = \frac{1}{4\pi}$
$l=1, m=0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos \theta$	$ Y_{10} ^2 = \frac{3}{4\pi} \cdot \cos^2 \theta$
$l=1, m=1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi}$	$ Y_{11} ^2 = \frac{3}{8\pi} \cdot \sin^2 \theta$
$l=1, m=-1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}$	$ Y_{1-1} ^2 = \frac{3}{8\pi} \cdot \sin^2 \theta$
$l=2, m=0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3\cos \theta - 1)$	$ Y_{20} ^2 = \frac{5}{16\pi} \cdot (3\cos^2 \theta - 1)^2$
$l=2, m=\pm 1$	$Y_{21} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\varphi}$	$ Y_{21} ^2 = \frac{15}{8\pi} \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta$
$l=2, m=\pm 2$	$Y_{2\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}$	$ Y_{2\pm 2} ^2 = \frac{15}{32\pi} \cdot \sin^4 \theta$
$l=3, m=0$	$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left(\frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right)$	$ Y_{30} ^2 = \frac{7}{4\pi} \left(\frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right)^2$
$l=3, m=\pm 1$	$Y_{3\pm 1} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin \theta (5\cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$	$ Y_{3\pm 1} ^2 = \frac{21}{64\pi} \sin^2 \theta (5\cos^2 \theta - 1)^2$
$l=3, m=\pm 2$	$Y_{3\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm i2\varphi}$	$ Y_{3\pm 2} ^2 = \frac{105}{32\pi} \sin^4 \theta \cos^2 \theta$
$l=3, m=\pm 3$	$Y_{3\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm i3\varphi}$	$ Y_{3\pm 3} ^2 = \frac{35}{64\pi} \sin^6 \theta$

В таблице 1 под i понимается мнимая единица, т.е. $i^2 = -1$.

**Процедура для получения аналитического вида
сферических функций любого порядка**

```
> restart;
> Y:=proc(l,m) local m1,phi1,s,P,Theta,Phi,Y;
> m1:=abs(m);
```

```

> if l+m1>0 then s:=1/(2^l)/l!*diff((x^2-1)^l,x$(l+m1))
else s:=1 end if;
> P:=(sin(theta))^m1*subs(x=cos(theta),s);
> Theta:=(-1)^m1*sqrt((2*l+1)*(l-m1)!/2/(l+m1!))*P;
> Phi:=exp(I*m1*phi1)/sqrt(2*Pi);
> Y:=Theta*Phi;
> if m>=0 then Y:=subs(phi1=phi,Y) else Y:=subs(phi1=-
phi,Y) end if;
> if m<0 then (-1)^m*Y else Y end if
> end proc;

```

При обращении к данной процедуре используют следующую команду

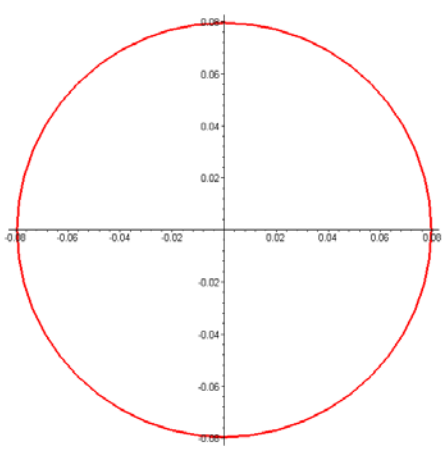
```
> Y10:=simplify(Y(1,0));
```

При этом значение после вычисления будет записано в переменную Y10 и будет иметь вид

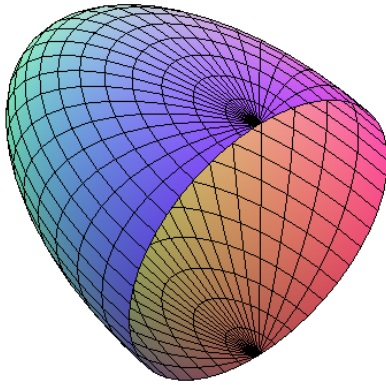
$$Y10 := \frac{1}{2} \frac{\sqrt{3} \cos(\theta)}{\sqrt{\pi}}$$

Таким образом, получена сферическая функция для $l = 1, m = 0$. Получения аналитического вида функций для других значений l и m аналогично.

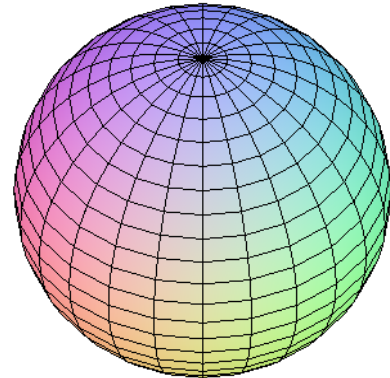
Построение графиков плотностей вероятности углового распределения в полярной и сферической системах координат

График в полярной системе координат	
График в сферической системе координат (в разрезе, $0 \leq \varphi \leq \pi$)	График в сферической системе координат (общий вид, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$)
<u>$l=0, m=0$</u>	
<pre> > restart; > plot([1/(4*Pi), phi, phi=0..2*Pi], coords=polar, thickness=3); </pre>	
	<pre> > plot3d(1/(4*Pi), phi=0..Pi, theta=0..Pi, </pre>
<pre> > plot3d(1/(4*Pi), phi=0..Pi, theta=0..Pi, </pre>	<pre> > plot3d(1/(4*Pi), phi=0..2*Pi, theta=0..Pi, </pre>

```
coords=spherical,  
style=patch);
```



```
coords=spherical,  
style=patch);
```



Замечание 1. Полярная система координат

Положение точки на плоскости можно определять с помощью так называемой *полярной системы координат*.

На плоскости выбираем некоторую точку O , называемую *полюсом*, и выходящую из этой точки полупрямую, называемую *полярной осью*. Положение точки P на плоскости можно определить двумя числами: числом ρ , выражающим расстояние точки P от полюса, и числом φ – величиной угла, образованного отрезком OP с полярной осью. Положительным направлением отсчета угла φ считается направление против часовой стрелки. Числа ρ и φ называются *полярными координатами* точки P (рис. 4).

Радиус-вектор ρ будем считать неотрицательным. Если полярный угол φ брать в пределах $0 \leq \varphi < 2\pi$, то каждой точке плоскости, кроме полюса, соответствует вполне определенная пара чисел ρ и φ . Для полюса $\rho = 0$, φ – произвольное.

Установим связь между полярными и прямоугольными декартовыми координатами. Пусть начало прямоугольной системы координат совпадает с полюсом, а положительное направление оси Ox – с *полярной осью*. Из рис. 5 непосредственно следует:

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi$$

и, обратно, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\operatorname{tg} \varphi = y/x$.

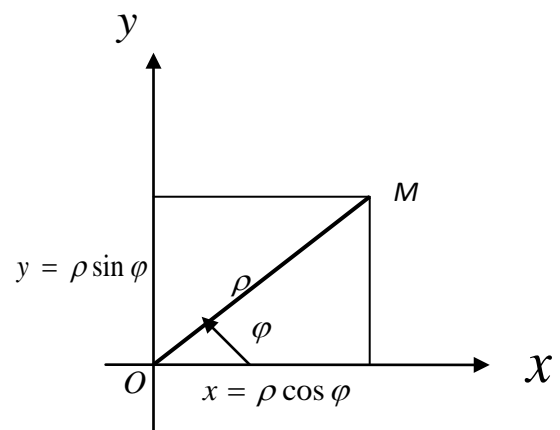
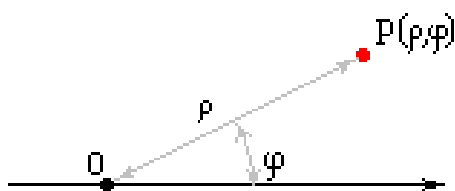


Рис. 1. Полярная система координат.

Рис. 2. Связь декартовой системы координат и полярной.

Замечание 2. Сферические системы координат

В сферических координатах положение точки P в пространстве определяется тремя числами φ , r , θ , где r – расстояние точки от начала координат, так называемый радиус-вектор точки, θ – угол между радиус-вектором и осью Oz , φ – угол между проекцией радиус-вектора на плоскость Oxy и осью Ox , отсчитываемый от этой оси в положительном направлении (т. е. против часовой стрелки) (рис. 11). Для любой точки пространства имеем:

$$0 \leq r < \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi.$$

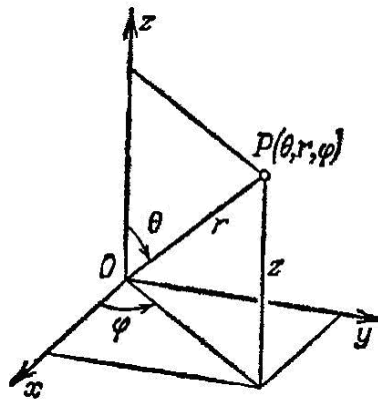


Рис. 3. Сферическая система координат.

Разобьем данную область V на элементарные части Δv координатными поверхностями $r = \text{const}$ (сферы), $\theta = \text{const}$ (конические поверхности с вершинами в начале координат), $\varphi = \text{const}$ (полуплоскости, проходящие через ось Oz). С точностью до бесконечно малых высшего порядка элементарный объем Δv можно считать параллелепипедом с ребрами длины Δr , $r\Delta\theta$, $r \sin\theta \Delta\varphi$. Тогда элементарный объем равен

$$\Delta v = r^2 \sin\theta \Delta r \Delta\varphi \Delta\theta.$$

Из рис. 3 легко устанавливаются выражения декартовых координат через сферические:

$$x = r \sin\theta \cos\varphi,$$

$$y = r \sin\theta \sin\varphi,$$

$$z = r \cos\theta.$$

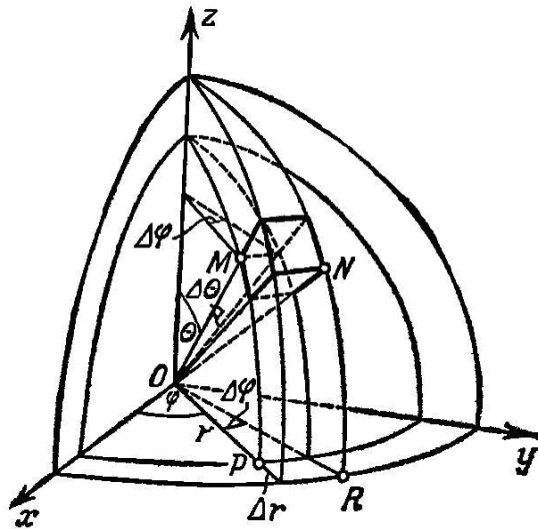


Рис. 4. Элемент объема в сферической системе координат.

Функции R_{nl} получили название радиальных функций. Явный вид радиальных волновых функций даётся в таблице 2.

Вероятность нахождения электрона в элементе объема $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ определяется выражением

$$dW_{r,\theta,\varphi} = R_{nl}^2 r^2 dr |Y_{lm}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Проинтегрировав это выражение по полному телесному углу 4π и учитывая, что

$$\int_{4\pi} |Y_{lm}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

получим

$$dW_r = R_{nl}^2 r^2 dr.$$

Из формулы следует, что выражение $R_{nl}^2 r^2$ представляет собой плотность вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра.

Таблица 2. Радиальные волновые функции $R(r)$ и квадраты модулей $|R_{nl}(r)|^2$ для водородоподобных систем

СОСТОЯНИЕ	R_{nl}	$R_{nl}^2(r)$
$n=1$ $l=0$	$R_{10} = \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot 2e^{-r/a_0}$	$R_{10}^2 = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \cdot 4e^{-2r/a_0}$
$n=2$ $l=1$	$R_{21} = \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2a_0} \cdot \frac{r}{a_0}$	$R_{21}^2 = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \cdot \frac{1}{4 \cdot 6} e^{-2r/2a_0} \cdot \left(\frac{r}{a_0}\right)^2$
$n=2$ $l=0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-r/2a_0} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a_0}\right)$	$R_{20}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 e^{-2r/2a_0} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a_0}\right)^2$
$n=3$ $l=0$	$R_{30} = \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{2}{3\sqrt{3}} e^{-r/3a_0} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a_0} + \frac{2}{27} \frac{r^2}{a_0^2}\right)$	$R_{30}^2 = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \cdot \frac{4}{27} \cdot e^{-2r/3a_0} \cdot \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a_0} + \frac{2}{27} \frac{r^2}{a_0^2}\right)^2$

$n=3$ $l=1$	$R_{31} = \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{8}{27\sqrt{6}} \cdot e^{-r/3a_0} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right)$	$R_{31}^2 = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \frac{64}{27^2 \cdot 6} \cdot e^{-2r/9a_0} \frac{r^2}{a_0^2} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right)^2$
$n=3$ $l=2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \cdot e^{-r/3a_0} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot \left(\frac{r}{a_0}\right)^2$	$R_{32}^2 = \left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \frac{16}{81^2 30} \cdot e^{-2r/3a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^4$

где $a_0 = \frac{\hbar}{me^2}$ – боровский радиус.

Рассмотрим алгоритм определения наиболее вероятного расстояния электрона от ядра на примере состояния $n = 2, l = 1$. Функция плотности вероятности для этого состояния имеет вид

$$\omega_r = r^2 \cdot R_{21}^2 \approx r^4 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Из условия экстремума

$$\frac{d\omega_r}{dr} = 0$$

получаем уравнение

$$4r^3 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} - \frac{r^4}{a_0} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} = 0$$

из которого следует

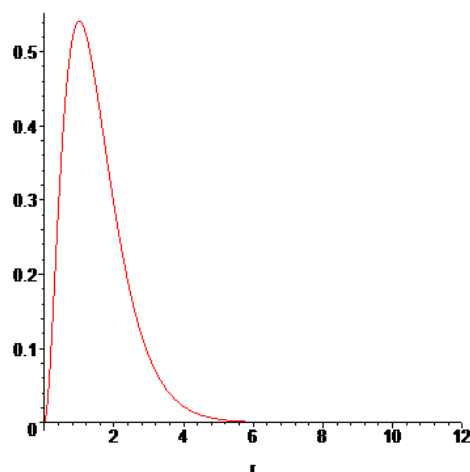
$$r_{н.в.} = 4a_0.$$

Построим график плотностей вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра для состояния **$n=1, l=0$** . Будем опускать общий для всех функций множитель $\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2}$ и будем выражать r в единицах a_0 , для этого

достаточно сделать замену $\frac{r}{a_0} \rightarrow r$.

> **restart;**

> **plot([4*r^2*exp(-2*r)], r=0..12, color=[red], style=[line]);**



Задание 1 для самостоятельного решения:

Запрограммировать процедуру для получения аналитического вида сферической функций нужного порядка и построить график плотности вероятности углового распределения электронов в полярной и сферической системах координат

- 1.1 $l=1, m=0$
- 1.2 $l=1, m=1$
- 1.3 $l=1, m=-1$
- 1.4 $l=2, m=0$
- 1.5 $l=2, m=1$
- 1.6 $l=2, m=-1$
- 1.7 $l=2, m=2$
- 1.8 $l=2, m=-2$
- 1.9 $l=3, m=0$
- 1.10 $l=3, m=1$
- 1.11 $l=3, m=-1$

Построить график плотности вероятности нахождения электрона на расстоянии r от ядра

- 1.1 $n=2, l=1$
- 1.2 $n=2, l=0$
- 1.3 $n=3, l=0$
- 1.4 $n=3, l=1$
- 1.5 $n=3, l=2$
- 1.6 $n=2, l=1$
- 1.7 $n=2, l=0$
- 1.8 $n=3, l=0$
- 1.9 $n=3, l=1$
- 1.10 $n=3, l=2$
- 1.11 $n=2, l=1$

Задание 2. «Системы линейных уравнений»

Теория. Методы решения систем линейных уравнений делятся на две группы-прямые и итерационные.

Прямые методы используют конечные соотношения (формулы) для вычисления неизвестных. Они дают решение после выполнения заранее известного числа операций. Эти методы сравнительно просты и наиболее универсальны, т.е. пригодны для решения широкого класса линейных систем.

Самыми распространенными методами решения систем с квадратной невырожденной основной матрицей системы являются:

- 1) метод решения систем по формулам Крамера;
- 2) матричный метод.

Формулы Крамера имеют вид: $x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta}$, где Δ – определитель основной матрицы, а Δ_i – определитель, у которого i -ый столбец заменен столбцом свободных членов.

По матричному методу решение системы $A \cdot X = B$ находят по формуле $X = A^{-1} \cdot B$, где A^{-1} - обратная матрица.

Итерационные методы - это методы последовательных приближений. В них необходимо задать некоторое приближенное решение – начальное приближение. После этого с помощью некоторого алгоритма проводится один цикл вычислений, называемый **итерацией**. В результате итерации находят новое приближение. Итерации проводятся до получения решения с требуемой точностью.

Алгоритмы решения линейных систем с использованием итерационных методов обычно более сложные по сравнению с прямыми методами. Объем вычислений заранее определить трудно. Однако погрешности окончательных результатов при использовании итерационных методов не накапливаются, поскольку точность вычислений в каждой итерации определяется лишь результатами предыдущей итерации и практически не зависит от ранее выполненных вычислений.

Рассмотрим систему

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases} \quad (2.1)$$

Наиболее надежно использовать схему с выбором главного элемента. Она состоит в том, что требование неравенства нулю диагональных элементов a_{kk} , заменяется более жестким: **из всех элементов нужно выбрать наибольший по модулю и переставить уравнения так, чтобы этот элемент оказался на месте элемента a_{kk} .**

После перестановки уравнений, выразим неизвестные x_1, x_2, x_3

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3), \quad (2.2)$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3), \quad (2.3)$$

$$x_3 = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2). \quad (2.4)$$

Зададим некоторые начальные (нулевые) приближения значений неизвестных: $x_1 = x_1^0$, $x_2 = x_2^0$, $x_3 = x_3^0$. Подставим эти значения в правую часть выражения (2.1), получаем первое приближение для x_1 :

$$x_1^1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^0 - a_{13}x_3^0).$$

Используя это значение для x_1 и приближение x_3^0 для x_3 , находим из (2.3) первое приближение для x_2 :

$$x_2^1 = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^1 - a_{23}x_3^0).$$

И, наконец, используя вычисленные значения $x_1 = x_1^1$, $x_2 = x_2^1$, находим с помощью выражения (2.4) первое приближение для x_3 :

$$x_3^1 = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^1 - a_{32}x_2^1).$$

На этом заканчивается первая итерация решения системы (2.2)-(2.4). Используя теперь значения x_1^1, x_2^1, x_3^1 , можно таким же способом провести вторую итерацию, в результате которой , будут найдены вторые приближения к решению: $x_1 = x_1^2$, $x_2 = x_2^2$, $x_3 = x_3^2$ и т. д.

Приближение с номером k можно представить в виде

$$x_1^k = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{k-1} - a_{13}x_3^{k-1}),$$

$$x_2^k = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^k - a_{23}x_3^{k-1}),$$

$$x_3^k = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^k - a_{32}x_2^k).$$

Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока значения x_1^k, x_2^k, x_3^k не станут близкими с заданной погрешностью к значениям $x_1^{k-1}, x_2^{k-1}, x_3^{k-1}$. Близость этих значений можно характеризовать максимальной абсолютной величиной их разности δ . Тогда при заданной допустимой погрешности $\varepsilon > 0$ критерий окончания итерационного процесса можно записать в виде

$$\delta = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i^k - x_i^{k-1}| < \varepsilon. \quad (2.5)$$

Это критерий по абсолютным отклонениям. Можно заменить его критерием по относительным разностям, т.е. условие окончания итерационного процесса записать в виде (при $x_i \gg 1$)

$$\max_{1 \leq i \leq n} \left| \frac{x_i^k - x_i^{k-1}}{x_i^k} \right| < \varepsilon. \quad (2.6)$$

При выполнении условия (2.5) и (2.6) итерационный процесс **Гаусса-Зейделя** называется *сходящимся*.

Пример. Решить систему уравнений $\begin{cases} x_1 + 3x_3 = 5 \\ 3x_1 + x_2 + 7x_3 = 11 \\ 3x_1 + 5x_2 + 4x_3 = 14 \end{cases}$, где матрица

$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 3 & 1 & 7 \\ 3 & 5 & 4 \end{bmatrix}$, а $d = \begin{pmatrix} 5 \\ 11 \\ 14 \end{pmatrix}$: а) по формулам Крамера, б) с помощью обратной матрицы.

Решение.

Основная часть команд для решения задач линейной алгебры содержится в библиотеке **linalg**. Поэтому перед решением задач с матрицами и векторами следует загрузить эту библиотеку командой **with(linalg)**.

> with(linalg):

а) по формулам Крамера

```
A:=matrix([[1,0,3],[3,1,7],[3,5,4]]);
```

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 3 & 1 & 7 \\ 3 & 5 & 4 \end{bmatrix}$$

Зададим вектор свободных членов:

```
> d:=Matrix([[5],[11],[14]]);
```

$$d := \begin{bmatrix} 5 \\ 11 \\ 14 \end{bmatrix}$$

Вычислим определитель основной матрицы:

```
> Delta(A):=det(A);
```

$$\Delta(A) := 4$$

Скопируем матрицу A в новую матрицу и подставим в первый столбец матрицы d :

```
> M1:=copy(A):copyinto(d,M1,1,1);
```

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 3 \\ 11 & 1 & 7 \\ 14 & 1 & 8 \end{bmatrix}$$

Найдем определитель полученной матрицы:

```
> Delta1:=det(M1);
```

$$\Delta_1 := -4$$

Аналогично проделаем для двух оставшихся столбцов:

```
> M2:=copy(A):copyinto(d,M2,1,2);
```

$$\begin{bmatrix} 1 & 5 & 3 \\ 3 & 11 & 7 \\ 2 & 14 & 8 \end{bmatrix}$$

```
> Delta2:=det(M2);
```

$$\Delta_2 := 0$$

```
> M3:=copy(A):copyinto(d,M3,1,3);
```

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 5 \\ 3 & 1 & 11 \\ 2 & 1 & 14 \end{bmatrix}$$

```
> Delta3:=det(M3);
```

$\Delta_3 := 8$

Применим формулы Крамера:

```
> x1:=Delta1/Delta(A);x2:=Delta2/Delta(A);x3:=Delta3/Delta(A);
```

$x_1 := -1$

$x_2 := 0$

$x_3 := 2$

б). Решим с помощью обратной матрицы по формуле $X = A^{-1} \cdot d$:

```
> A1:=inverse(A);
```

$$A1 := \begin{bmatrix} -\frac{31}{5} & 3 & \frac{-3}{5} \\ \frac{9}{5} & -1 & \frac{2}{5} \\ \frac{12}{5} & -1 & \frac{1}{5} \end{bmatrix}$$

```
> X:=evalm(A1*d);
```

$$X := \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Пример. Решить систему $\begin{cases} x_1 - 4x_2 + 3x_3 = -22 \\ 2x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 12 \\ 3x_1 - x_2 - 2x_3 = 0 \end{cases}$ итерационным способом

и с помощью встроенной команды.

Решение.

Запишем итерационную формулу, используя оператор цикла **while ...**

do

```
> restart;
```

```
x10:=1;x20:=1;x30:=1;
```

```
delta:= 1;
```

```
while delta >0.01 do
```

```
x1:=evalf((x20+2*x30)/3);
```

```
eps1:=abs(x10-x1);
```

```
x10:=x1;
```

```
x2:=evalf((22+x10+3*x30)/4);
```

```

eps2:=abs(x20-x2);
x20:=x2;
x3:=evalf((12-2*x10-3*x20)/5);
eps3:=abs(x30-x3);
x30:=x3;
delta:=eps1+eps2+eps3;
end do;
x1:=x1;x2:=x2;x3:=x3;

```

После нажатие на ввод будут проведены соответствующие вычисления и на экран выведутся все итерации. Из-за экономии места приведем конечный фрагмент вывода:

```

x10 := 0.9996073763
x2 := 4.998318033
eps2 := 0.004727591
x20 := 4.998318033
x3 := -0.998833770
eps3 := 0.003277978
x30 := -0.998833770
δ := 0.0091091287
x1 := 0.9996073763
x2 := 4.998318033
x3 := -0.998833770

```

Систему также можно решить и с помощью команды solve

```

> restart;
eq:={x1-4*x2+3*x3=-22, 2*x1+3*x2+5*x3=12, 3*x1-x2-2*x3=0};
solve(eq);
eq := { x1 - 4 x2 + 3 x3 = -22, 2 x1 + 3 x2 + 5 x3 = 12, 3 x1 - x2 - 2 x3 = 0 }
{ x1 = 1, x2 = 5, x3 = -1 }

```

Задание 2 для самостоятельного решения:

Решить систему уравнений а) по формулам Крамера, б) с помощью обратной матрицы, в) методом Гаусса-Зейделя, г) с помощью команды solve:

$$2.1 \begin{cases} 3x_1 - 2x_2 + 4x_3 = 21 \\ 3x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 9 \\ 2x_1 - x_2 - x_3 = 10 \end{cases}$$

$$2.2 \begin{cases} 3x_1 - 2x_2 - 5x_3 = 5 \\ 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 = 12 \\ x_1 - 2x_2 + 3x_3 = -1 \end{cases}$$

$$2.3 \begin{cases} 4x_1 + x_2 + 4x_3 = 19 \\ 2x_1 - x_2 + 2x_3 = 11 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 8 \end{cases}$$

$$2.4 \begin{cases} 2x_1 - x_2 + 2x_3 = 0 \\ 4x_1 + x_2 + 4x_3 = 6 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 4 \end{cases}$$

$$2.5 \begin{cases} 2x_1 - x_2 + 2x_3 = 8 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 11 \\ 4x_1 + x_2 + 4x_3 = 22 \end{cases}$$

$$2.6 \begin{cases} 2x_1 - x_2 - 3x_3 = -9 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = 20 \\ 3x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 15 \end{cases}$$

$$2.7 \begin{cases} 2x_1 - x_2 - 3x_3 = 0 \\ 3x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 1 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = -3 \end{cases}$$

$$2.8 \begin{cases} -3x_1 + 5x_2 + 6x_3 = -8 \\ 3x_1 + x_2 + x_3 = -4 \\ x_1 - 4x_2 - 2x_3 = -9 \end{cases}$$

$$2.9 \begin{cases} 3x_1 + x_2 + x_3 = -4 \\ -3x_1 + 5x_2 + 6x_3 = 36 \\ x_1 - 4x_2 - 2x_3 = -19 \end{cases}$$

$$2.10 \begin{cases} 3x_1 - x_2 + x_3 = -11 \\ 5x_1 + x_2 + 2x_3 = 8 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 16 \end{cases}$$

$$2.11 \begin{cases} 3x_1 - x_2 + x_3 = 9 \\ 5x_1 + x_2 + 2x_3 = 11 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 19 \end{cases}$$

Задание 3. «Метод деления отрезка пополам (метод бисекции)» для самостоятельного решения.

Решить уравнения методом половинного деления (смотреть занятие 1):

$$3.1 \quad x - e^{-x} = 0;$$

$$3.2 \quad x - \sin x = 0;$$

$$3.3 \quad 4 - e^x - 2x^2 = 0;$$

$$3.4 \quad e^x + x = 0;$$

$$3.5 \lg x = \frac{1}{x};$$

$$3.6 x^4 + 2x^3 - x = 1;$$

$$3.7 x^3 - 0,2x^2 - 0,2x - 1,2 = 0;$$

$$3.8 e^{2x} + 3x = 4;$$

$$3.9 x^2 - 20\sin x = 0;$$

$$3.10 63x^5 - 70x^3 + 15x^2 - 8x = 0;$$

$$3.11 \lg x = \frac{1}{x^2}.$$