Министерство образования, и науки, молодёжи и спорта Украины
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

В. А. Резуненко

ОСНОВЫ ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ. ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА
ЧАСТЬ   ВТОРАЯ

Методические указания к лекционным и практическим занятиям
для студентов первого курса химического факультета

Харьков - 2011

УДК 512.8
ББК 512.143 я73
Р18

Утверждено к печати Научно-методическим советом
Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина
(протокол № 2 от 13 .01.2011 г.)

Рецензенты: доктор физ.– мат. наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики Харьковского национального университета радиоэлектроники **Нерух А. Г.;** кандидат физ. – мат. наук, доцент кафедры математического анализа Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина **Гефтер С. Л.**

Резуненко В. А. Основы высшей математики Линейная алгебра.
Р18 Часть вторая: Методические указания к лекциям и практическим занятиям / В. А Резуненко. – Х. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2011. – 43 с.

Учебно-методическое пособие содержит краткие теоретические сведения, необходимые для овладения основами курса и практическими навыками для решения задач. В указаниях дан анализ важнейших типов задач. Приведены упражнения различной сложности для составления текущих и итоговых тестов и для самостоятельной работы студентов. В работе содержатся вопросы для самопроверки, приложения и список литературы. Часть вторая пособия может быть использована для исследовательской работы студентов естественных факультетов, в том числе иностранных студентов.

УДК 512.8
ББК 512.143 я73

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ

Методы линейной алгебры применяются в различных областях знаний, в том числе в химии. Решение многих задач приводит к необходимости составления и решения систем линейных уравнений. Эффективным средством их исследования являются матрицы и определители. Учебно–методические указания к лекционным и практическим занятиям составлены в соответствии с программой изучения курса “Высшая математика” и её раздела “Линейная алгебра” на химическом факультете. В первой части “Линейной алгебры” изложены три темы, освещающие теорию определителей n–го порядка и теорию решения систем линейных алгебраических уравнений по правилу Крамера. Во второй части предлагаемой работы даны теория и практика по четырем темам; каждой теме посвящён отдельный параграф. Темы первая и вторая посвящены методам а) точного и б) приближённого решения линейных систем: а) по методу Гаусса, б) по методу простой итерации и методу Зейделя. В третьей и четвёртой темах изложены применения алгебры и численных методов алгебры к решению прикладных химических задач, относящихся к спектрофотометрии и расчёту нитрующих смесей.

Учебно–методические указания разработаны по единой схеме, содержащей а) основные теоретические сведения, необходимые для изучения темы и для решения задач и упражнений, б) примеры решения задач и упражнений, в) упражнения для самостоятельной работы, г) вопросы для самопроверки.

В каждой теме даются ссылки на формулы из этого же занятия.

Учебно–методическое пособие предназначено для студентов химического факультета первого курса и ориентированы на развитие навыков самостоятельной работы. Указания могут быть использованы на лекционных занятиях, а также для исследовательской работы студентов естественных факультетов. При составлении пособия учтён опыт ведения занятий автором на механико–математическом, химическом, биологическом и геолого–географическом факультетах Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина. Учтены предыдущие разработки автора с коллегами [1,2], общие и специальные издания [3-16], а также литература для анализа и решения прикладных задач из параграфов 3 и 4, которая отдельно дана в конце работы.

§1. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ ГАУССА

§1.1. Основные теоретические сведения, необходимые для решения задач и упражнений

1. Рассмотрим систему из m линейных алгебраических уравнений с n неизвестными:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i , \qquad (i = 1, 2, ..., m). \tag{1}$$

В системе (1) x_j – отыскиваемые неизвестные, a_{ij} – заданные коэффициенты при неизвестных, b_i – заданные коэффициенты правой части системы.

2. Решение системы уравнений (1) может быть найдено несколькими методами. Применим <u>*метод Гаусса*</u> – точный метод, который за конечное число арифметических операций позволяет найти решение системы. Этот метод является сравнительно экономным по количеству необходимых арифметических операций и сравнительно точным по малым накапливаемым вычислительным погрешностям. Отметим, что в первой части методических указаний по “Высшей математике” (см. [2]) изучалось правило Крамера, которое применимо для случая только квадратных матриц системы, когда порядок m системы равен числу n неизвестных. При этом требуется, чтобы определитель системы был отличен от нуля. Отметим, что метод Гаусса является универсальным в том плане, что позволяет исследовать системы при любом соотношении числа уравнений и числа неизвестных.

<u>*Метод Гаусса*</u> (метод последовательного исключения неизвестных) состоит из двух этапов [1-19]. **На первом этапе** (<u>*прямой ход*</u>) система (1) приводится к одному из <u>***трёх***</u> вариантов систем следующего вида:

1) вариант:
$$\begin{cases} \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 + ... + \alpha_{1n}x_n = \beta_1 , \\ \qquad \alpha_{22}x_2 + \alpha_{23}x_3 + ... + \alpha_{2n}x_n = \beta_2 , \\ \qquad\qquad \alpha_{33}x_3 + ... + \alpha_{3n}x_n = \beta_3 , \\ \qquad\qquad . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \\ \qquad\qquad\qquad \alpha_{nn}x_n = \beta_n , \end{cases} \tag{2.1}$$

где $\alpha_{ii} \neq 0$, $(i = 1, 2, ..., n)$;

2) вариант:
$$\begin{cases} \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \ldots + \alpha_{1r}x_r + \ldots + \alpha_{in}x_n = \beta_1, \\ \qquad \alpha_{22}x_2 + \ldots + \alpha_{2r}x_r + \ldots + \alpha_{2n}x_n = \beta_2, \\ \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad \alpha_{rr}x_r + \ldots + \alpha_{rn}x_n = \beta_r, \end{cases} \tag{2.2}$$

где $\alpha_{ii} \neq 0$, $(i = 1, 2, \ldots, n)$, $r < n$;

3) вариант:
$$\begin{cases} \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \ldots + \alpha_{1n}x_n = \beta_1, \\ \qquad \alpha_{22}x_2 + \ldots + \alpha_{2n}x_n = \beta_2, \\ \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad 0 = \beta_r, \\ \qquad\qquad \cdots \\ \qquad\qquad 0 = \beta_m, \end{cases} \tag{3.3}$$

где хотя бы одно из чисел $\beta_r, \ldots, \beta_m$ отлично от нуля.

В первом варианте система (1) преобразована к системе (2.1), у которой число уравнений равно числу неизвестных $(m = n)$. Во втором варианте система (1) преобразована к системе (2.2), у которой число уравнений меньше числа неизвестных $(r < n)$. В третьем варианте получена система (3.3), у которой число уравнений больше числа неизвестных $(m > n)$.

Переход от (1) к (2.1), (2.2), (3.3) достигается применением эквивалентных *преобразований* над уравнениями системы. Преобразования системы называются эквивалентными, если полученная система и исходная система имеют одни и те же решения (системы уравнений при этом также называются эквивалентными). *Элементарные эквивалентные преобразования* систем уравнений таковы:

– перестановка любых двух уравнений системы;

– умножение обеих частей какого-либо уравнения системы на любое отличное от нуля число;

– прибавление к обеим частям одного из уравнений соответствующих частей другого уравнения, умноженных на любое число;

– перенумерация неизвестных.

На втором этапе решения системы, применяя *обратный ход,* находим значения неизвестных или устанавливаем несовместность системы.

Рассмотрим подробнее все три варианта 1), 2) и 3), полученные прямым ходом метода Гаусса.

В первом варианте система (1) приводится к *треугольному* виду (2.1), и система называется *определенной*, так как имеет единственное решение. Решение находим так (применяем обратный ход метода Гаусса): из последнего уравнения системы (2.1) находим x_n, затем из предпоследнего уравнения находим x_{n-1} и т. д., и наконец, находим x_1.

Во втором варианте система (1) приводится к *трапецеидальному* виду (2.2). В этом случае система имеет бесконечное множество решений и называется *неопределенной*. Для нахождения решений такой системы необходимо выбрать r *базисных неизвестных* $x_1, x_2, ..., x_r$ и выразить их через *свободные неизвестные* $x_{r+1}, x_{r+2}, ..., x_n$. Отметим, что базисные неизвестные можно выбрать несколькими вариантами. Количество вариантов равно количеству ненулевых (базисных) миноров порядка r матрицы коэффициентов при неизвестных. Свободным неизвестным можно придавать бесконечное множество произвольных числовых значений и в зависимости от них находить значения базисных неизвестных, и значит, находить решения $x_1, x_2, ..., x_r, x_{r+1}, x_{r+2}, ..., x_n$.

В третьем варианте система (3.3) называется *несовместной*, поскольку она содержит хотя бы одно противоречивое равенство ($0 = \beta_i$, $\beta_i \neq 0$), значит система не имеет решений.

С практической точки зрения – для упрощения контроля над правильностью процесса нахождения решений системы уравнений методом Гаусса – удобно выполнять элементарные преобразования над расширенной матрицей с коэффициенты $a_{i,j}$ при неизвестных и правой частью b_i системы, т.е. над матрицей:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ . & . & . & . & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} & b_m \end{array}\right). \qquad (2)$$

Столбец из правых частей b_i (свободных членов системы) в этой матрице отделяется от остальных столбцов основной матрицы вертикальной чертой.

3. Для проведения *текущего контроля* правильности вычисления по методу Гаусса полезно ввести *контрольный столбец* системы

$$K\Sigma = \begin{pmatrix} K\Sigma_1 \\ \ldots \\ K\Sigma_m \end{pmatrix}, \tag{3}$$

состоящий из <u>*контрольных элементов*</u> уравнений системы (1). Контрольные элементы имеют вид:

$$K\Sigma_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} + b_i, \quad (i = 1, 2, \ldots, m). \tag{4}$$

При преобразовании уравнений системы (1) над контрольными элементами (4) производятся те же операции, что и над свободными членами уравнений. В результате контрольный элемент каждого вновь получаемого уравнения должен равняться сумме коэффициентов этого уравнения.

<u>*Итоговый контроль*</u> правильности вычислений для систем, сводящихся к треугольному виду, можно осуществить, проверив выполнение равенств

$$x_i - \widetilde{x_i} = -1, \qquad (i = 1, 2, \ldots, m),$$

где x_i – значения неизвестных исходной системы, $\widetilde{x_i}$ – значения неизвестных контрольной системы, отличающейся от исходной лишь свободными членами ($K\Sigma_i$).

Контрольный столбец (3) обычно записывается в матрице (2) справа от столбца из свободных членов исходной системы и отделяется от него вертикальной чертой.

§1.2. Примеры решения задач и упражнений

1. Решить методом Гаусса три системы уравнений:

а) $\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 - 2x_4 + 4x_5 = -1, \\ 4x_1 - 2x_2 + 5x_3 + x_4 + 7x_5 = 2, \\ 2x_1 - x_2 + x_3 + 8x_4 + 2x_5 = 1; \end{cases}$ б) $\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 3, \\ x_1 + x_2 - x_3 = 1, \\ 2x_1 + x_2 - 2x_3 = 1; \end{cases}$

в) $\begin{cases} -x_1 + 3x_2 + 3x_3 + 2x_4 + 5x_5 = 2, \\ -3x_1 + 5x_2 + 2x_3 + 3x_4 + 4x_5 = 2, \\ -3x_1 + x_2 - 5x_3 + 0 \cdot x_4 - 7x_5 = -2, \\ -5x_1 + 7x_2 + x_3 + 16x_4 + x_5 = 10. \end{cases}$

<u>Решение</u>. Отметим, что рассматриваемые примеры иллюстрируют решение систем уравнений, в которых число неизвестных больше или равно числу неизвестных.

<u>Решение примера а</u>). Выпишем матрицу (расширенную матрицу), соответствующую данной системе вместе с её правым столбцом и контрольным столбцом:

$$A=\left(\begin{array}{ccccc|c|c} 2 & -1 & 3 & -2 & 4 & -1 & 5 \\ 4 & -2 & 5 & 1 & 7 & 2 & 17 \\ 2 & -1 & 1 & 8 & 2 & 1 & 13 \end{array}\right).$$

Производя элементарные преобразования над матрицей A, получаем:

$$A\sim\left(\begin{array}{ccccc|c|c} 2 & -1 & 3 & -2 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & -1 & 5 & -1 & 4 & 7 \\ 0 & 0 & -2 & 10 & -2 & 2 & 8 \end{array}\right)\overset{2\leftrightarrow 5}{\sim}\left(\begin{array}{ccccc|c|c} 2 & 4 & 3 & -2 & -1 & -1 & 5 \\ 0 & -1 & -1 & 5 & 0 & 4 & 7 \\ 0 & -2 & -2 & 10 & 0 & 2 & 8 \end{array}\right)\sim$$

$$\sim\left(\begin{array}{ccccc|c|c} 2 & 4 & 3 & -2 & -1 & -1 & 5 \\ 0 & -1 & -1 & 5 & 0 & 4 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -6 & -6 \end{array}\right),$$

где запись вида $i\leftrightarrow j$, помещенная над знаком эквивалентности $(\sim)$, означает перестановку i-го и j-го столбцов матрицы (это соответствует перенумерации неизвестных: x_i заменяется на x_j, а x_j – на x_i).

Третьей строке последней матрицы соответствует уравнение

$$0\cdot x_1+0\cdot x_2+0\cdot x_3+0\cdot x_4+0\cdot x_5=-6$$

или уравнение $0=-6$, которому не удовлетворяют никакие значения неизвестных (равенство $0=-6$ противоречиво).

Следовательно, данная система несовместна.

<u>Решение примера б</u>). Данной системе соответствует расширенная матрица, записанная вместе с её контрольным столбцом:

$$A=\left(\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 1 & 1 & 3 & 6 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & -2 & 1 & 2 \end{array}\right).$$

Ход вычисления ясен из записи:

$$A\sim\left(\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 1 & 1 & 3 & 6 \\ 0 & 0 & -2 & -2 & -4 \\ 0 & -1 & -4 & -5 & -10 \end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc|c|c} 1 & 1 & 1 & 3 & 6 \\ 0 & 1 & 4 & 5 & 10 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 \end{array}\right).$$

Последней матрице соответствует система «треугольного» вида:

$$\begin{cases} x_1+x_2+\ x_3=3, \\ \qquad x_2+4x_3=5, \\ \qquad\qquad x_3=1. \end{cases}$$

Отсюда, производя *<u>обратный ход</u>*, получаем ответ:

$$x_1=x_1=x_3=1.$$

Данная система, таким образом, является определенной.

Решением контрольной системы уравнений

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + \ x_3 = 6, \\ \quad\ \ x_2 + 4x_3 = 10, \\ \qquad\quad\ x_3 = 2 \end{cases}$$

являются числа $\widetilde{x_1} = \widetilde{x_2} = \widetilde{x_3} = 2$. Так как числа $x_i, \widetilde{x_i}$, $(i = 1, 2, 3)$, удовлетворяют условию $x_i - \widetilde{x_i} = -1$, то решение исходной системы найдено правильно.

Убедитесь в этом *непосредственной подстановкой значений* x_i в уравнения системы.

<u>Решение примера в</u>). Как и в предыдущих примерах, выпишем расширенную матрицу, соответствующую данной системе вместе, с её контрольным столбцом и выполним преобразования, ход которых ясен из записи:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c|c} -1 & 3 & 3 & 2 & 5 & 2 & 14 \\ -3 & 5 & 2 & 3 & 4 & 2 & 13 \\ -3 & 1 & -5 & 0 & -7 & -2 & -16 \\ -5 & 7 & 1 & 16 & 1 & 10 & 30 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccccc|c|c} -1 & 3 & 3 & 2 & 5 & 2 & 14 \\ 0 & -4 & -7 & -3 & -11 & -4 & -29 \\ 0 & -8 & -14 & -6 & -22 & -8 & -58 \\ 0 & -8 & -14 & 6 & -24 & 0 & -40 \end{array}\right) \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{ccccc|c|c} -1 & 3 & 3 & 2 & 5 & 2 & 14 \\ 0 & 4 & 7 & 3 & 11 & 4 & 29 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & -2 & 8 & 18 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccccc|c|c} -1 & 3 & 3 & 2 & 5 & 2 & 14 \\ 0 & 4 & 7 & 3 & 11 & 4 & 29 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & -1 & 4 & 9 \end{array}\right) \overset{3 \leftrightarrow 5}{\sim}$$

$$\sim \left(\begin{array}{ccccc|c|c} -1 & 3 & 5 & 2 & 3 & 2 & 14 \\ 0 & 4 & 11 & 3 & 7 & 4 & 29 \\ 0 & 0 & -1 & 6 & 0 & 4 & 9 \end{array}\right).$$

Последней матрице соответствует система трапецеидального вида:

$$\begin{cases} -x_1 + 3x_2 + 5x_5 + 2x_4 + 3x_3 = 2, \\ \qquad 4x_2 + 11x_5 + 3x_4 + 7x_3 = 4, \\ \qquad\qquad\qquad -x_5 + 6x_4 = 4. \end{cases}$$

Здесь свободными неизвестными являются x_3 и x_4. Через них выражаются базисные неизвестные x_1, x_2, x_5:

$$x_1 = -\frac{79}{4}x_4 - \frac{9}{4}x_3 + 14,$$
$$x_2 = -\frac{69}{4}x_4 - \frac{7}{3}x_3 + 12,$$
$$x_5 = 6x_4 - 4.$$

Значения неизвестных x_3 и x_4 можно задавать произвольно. В зависимости от них находятся x_1, x_2, x_5. Полагая, например, $x_3 = 0, x_4 = 0$, получим: $x_1 = 14, x_2 = 12, x_5 = -4$. Данная система, таким образом, имеет бесконечное множество решений, т.е. является неопределенной.

2. При решении предыдущих систем методом Гаусса мы осуществляли преобразование соответствующей матрицы систем так, чтобы её диагональные элементы (*ведущие коэффициенты*) были отличными от нуля. Если, однако, какой-либо из этих элементов достаточно мал по абсолютному значению, то при вычислениях, например, на персональных компьютерах с ограниченной разрядной сеткой, могут появиться значительные погрешности и метод Гаусса в этом случае становится неэффективным. Чтобы уменьшить вычислительную погрешность, используют несколько видоизменённый метод исключения неизвестных – так называемый *метод Гаусса с выбором главного элемента*. Он заключается в том, что среди всех уравнений системы сначала выбирается то уравнение, в котором содержится наибольший по абсолютной величине коэффициент системы (*главный элемент*) и делят уравнение на этот коэффициент. Затем обычным способом исключают из остальных уравнений то неизвестное, при котором был наибольший коэффициент в выбранном уравнении. Далее, не работая пока с уравнением, где был главный элемент, находят наибольший по абсолютной величине коэффициент в остальных уравнениях (новый главный элемент), делят не него уравнение, в котором он находится, и исключают из остальных уравнений соответствующее неизвестное и т.д. Затем выполняют обратный ход метода Гаусса.

Пример: Решить систему уравнений:

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 - x_3 - x_4 = 1, \\ 2x_1 + 4x_2 + x_3 - x_4 = 1, \\ -x_1 - x_2 + x_3 + 2x_4 = 2, \\ x_1 + x_2 - 2x_3 - x_4 = 1. \end{cases}$$

Решение: Главным элементом матрицы системы является коэффициент 4 при x_2 во втором уравнении системы. Запишем расширенную матрицу системы и её контрольный столбец; главный элемент матрицы будем заключать в прямоугольник:

$$\left(\begin{array}{cccc|c|c} 2 & 2 & -1 & -1 & 1 & 3 \\ 2 & \boxed{4} & 1 & -1 & 1 & 7 \\ -1 & -1 & 1 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & -2 & -1 & 1 & 0 \end{array}\right).$$

Делим 2-ю строку на 4 и переставляем её на первое место:

$$\left(\begin{array}{cccc|c|c} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{7}{4} \\ 2 & 2 & -1 & -1 & 1 & 3 \\ -1 & -1 & 1 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & -2 & -1 & 1 & 0 \end{array}\right).$$

Вычитая удвоенную 1-ю строку из 2-й, складывая её с 3-й и вычитая из 4-й, получим матрицу

$$\left(\begin{array}{cccc|c|c} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{7}{4} \\ 1 & 0 & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{5}{4} & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{19}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \boxed{-\frac{9}{4}} & -\frac{3}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{7}{4} \end{array}\right).$$

Новый главный элемент равен $-\frac{9}{4}$. Делим 4-ю строку на $-\frac{9}{4}$, вычитаем её, умноженную на $-\frac{3}{2}$ из 2-й строки и умноженную на $\frac{5}{4}$ из 3-й. Меняя затем местами 2-ю и 4-ю строки, получим:

$$\left(\begin{array}{cccc|c|c} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{7}{4} \\ -\frac{2}{9} & 0 & 1 & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{7}{9} \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} \\ -\frac{13}{18} & 0 & 0 & \frac{4}{3} & \frac{8}{3} & \frac{59}{18} \end{array}\right).$$

Перестановкой 3-й и 4-й строк и некоторых столбцов заканчиваем элементарные преобразования матрицы. Ей соответствует система уравнений:

$$\begin{cases} x_2 + \frac{1}{4}x_3 - \frac{1}{4}x_4 + \frac{1}{2}x_1 = \frac{1}{4}, \\ \quad x_3 + \frac{1}{3}x_4 - \frac{2}{9}x_1 = -\frac{1}{3}, \\ \quad\quad \frac{4}{3}x_4 - \frac{13}{18}x_1 = \frac{8}{3}, \\ \quad\quad\quad \frac{2}{3}x_1 = 0. \end{cases}.$$

Отсюда, выполняя обратный ход метода Гаусса, последовательно находим: $x_1 = 0$, $x_4 = 2$, $x_3 = -1$, $x_2 = 1$.

Текущий и итоговый контроль правильности выполненных вычислений проведите самостоятельно.

3. Если рассматривается несколько систем, отличающихся друг от друга только правыми частями, то нет необходимости применять метод Гаусса к каждой из них в отдельности, поскольку все преобразования, которые проводятся над левыми частями системы, не зависят от её свободных членов. Поэтому левые части всех систем будут преобразовываться одинаково, а правые части для всех систем можно находить параллельно.

Пример. Решить 2 системы уравнений, отличающихся друг от друга свободными членами, т.е. правыми частями:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 0, \\ 2x_1 - x_2 - 2x_3 = -1, \\ 3x_1 + 5x_2 - 6x_3 = 2; \end{cases} \qquad \begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 1, \\ 2x_1 - x_2 - 2x_3 = 0, \\ 3x_1 + 5x_2 - 6x_3 = 0. \end{cases}$$

Решение: Данным системам соответствует расширенная матрица:

$$A = \left(\begin{array}{ccc|cc} 1 & 2 & -3 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & -2 & -1 & 0 \\ 3 & 5 & -6 & 2 & 0 \end{array}\right),$$

в которой справа от вертикальной черты записаны 2 столбца из значений соответствующих свободных членов систем (правых частей систем). Выполняя над этой матрицей обычные элементарные преобразования (выполняя прямой ход метода Гаусса), будем иметь:

$$A \sim \left(\begin{array}{ccc|cc} 1 & 2 & -3 & 0 & 1 \\ 0 & -5 & 4 & -1 & -2 \\ 0 & -1 & 3 & 2 & -3 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|cc} 1 & 2 & -3 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -3 & -2 & 3 \\ 0 & 5 & -4 & 1 & 2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|cc} 1 & 2 & -3 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -3 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 11 & 11 & -13 \end{array}\right).$$

Отсюда, для каждого столбца свободных членов, получаем решение двух соответствующих систем уравнений:

1) $x_1 = x_2 = x_3 = 1$;

2) $x_1 = -\dfrac{16}{11},\ x_2 = -\dfrac{6}{11},\ x_3 = -\dfrac{13}{11}$.

Отметим, что для проведения контроля вычислений в данном случае можно образовать лишь один контрольный столбец. Каждый его элемент $K\sum_i$ равен сумме всех коэффициентов i–го уравнения и сумме всех правых частей этого (i–го) же уравнения.

Проведите контроль самостоятельно.

§1.3. Упражнения для самостоятельной работы

1. Решить методом Гаусса системы уравнений:

а) $\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 6x_3 = -4, \\ 2x_1 - x_2 + x_3 = 3, \\ x_1 + x_2 + x_3 = -4; \end{cases}$

б) $\begin{cases} x_1 - 2x_2 - x_3 + 3x_4 = 5, \\ 2x_1 - 4x_2 - 2x_3 + 6x_4 = 10, \\ 2x_1 + x_2 + x_4 = 20; \end{cases}$

в) $\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 - 5x_3 = 7, \\ 6x_1 + 3x_2 - 14x_3 = 17, \\ 2x_1 + 8x_2 - x_3 = 1, \\ 5x_1 + 11x_2 - 16x_3 = 21. \end{cases}$

Ответ:

а) $x_1 = 1,\ x_2 = 0,\ x_3 = 1$;

б) $x_2 = 20 - 2x_1 - x_4,\ x_3 = -45 + 5x_1 + 3x_4,\ x_1 \in \mathbb{R},\ x_4 \in \mathbb{R}$;

в) система несовместна.

2. Решить с точностью до 10^{-4} систему уравнений, полагая, что все коэффициенты заданы точно:

$$\begin{cases} 0,63x_1 + 1,00x_2 + 0,71x_3 + 0,34x_4 = 2,08\ , \\ 1,17x_1 + 0,16x_2 - 0,65x_3 + 0,71x_4 = 0,17\ , \\ 2,71x_1 - 0,75x_2 + 1,17x_3 - 2,45x_4 = 1,28\ , \\ 3,58x_1 + 0,21x_2 - 3,45x_3 - 1,18x_4 = 0,05\ . \end{cases}$$

Отметим, что для получения требуемой точности вычислений на практике обычно принято удерживать без округлений две запасные цифры (говорят, удерживать два дополнительных знака), в данном примере необходимо удерживать во всех вычислениях пятый и шестой знаки после запятой и округлять ответ. Конечно, число удерживаемых без округлений знаков зависит от количества необходимых арифметических операций: чем больше операций, тем больше необходимо удерживать дополнительных знаков.

Ответ: $x_1 = 0,4026$, $x_2 = 1,3016$, $x_3 = 0,5862$, $x_4 = -0,2678$.

3. Решить четыре системы уравнений, отличающихся друг от друга только правыми частями:

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - x_3 = 4\ ;\ \ 1;\ \ 0;\ -3\ , \\ 3x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 11;\ \ 0;\ \ 5;\ \ 5\ , \\ 3x_1 - 2x_2 + 4x_3 = 11;\ \ 0;\ \ 5;\ \ 11\ . \end{cases}$$

Ответ: 1) $x_1 = 3,\ x_2 = 1,\ x_3 = 1$; 2) $x_1 = 0.2,\ x_2 = -0.3,\ x_3 = -0.3$;

3) $x_1 = 1,\ x_2 = 1,\ x_3 = 1$; 4) $x_1 = 3,\ x_2 = 2,\ x_3 = 3$.

§1.4. Вопросы для самопроверки

1. Какие преобразования над уравнениями системы называют элементарными?
2. Покажите, что при выполнении элементарных преобразований система уравнений переходит в эквивалентную ей систему.
3. В чём заключается сущность метода Гаусса решения систем линейных уравнений?
4. В каких случаях, решая систему методом Гаусса, можно сделать заключение:
   а) система является определенной;
   б) система является неопределенной;
   в) система несовместна.
5. Расскажите о решении системы уравнений методом Гаусса по схеме с выбором главного элемента.
6. В каких случаях использование метода Гаусса приводит к значительным погрешностям?

7. Как можно проводить текущий контроль правильности вычислений по методу Гаусса?

8. Какова структура контрольного столбца системы уравнений?

9. Как можно провести итоговый контроль правильности вычислений по методу Гаусса (для систем, приводящихся к треугольному виду)?

10. Расскажите о способе решения нескольких систем линейных уравнений. отличающихся друг от друга только свободными членами.

11. Приведите примеры плохо обусловленных систем уравнений, отличающихся правыми частями, и решите их методом Гаусса.

12. Приведите пример системы уравнений трапецеидального вида с буквенными коэффициентами. Будет ли система совместна при любых буквенных коэффициентах?

13. Всякая ли система линейных уравнений имеет базисные и свободные неизвестные?

14. Если для решения системы уравнений применимо правило Крамера, то применим ли к этой системе метод Гаусса?

15. Зависит ли число уравнений, полученных в результате прямого хода метода Гаусса, от способа исключения неизвестных?

16. Пусть система m уравнений с m неизвестными имеет единственное решение. Можно ли в процессе решения системы методом Гаусса вычислить определитель данной системы?

17. Как связаны точность получения решения системы и выбор вариантов округлений при выполнении вычислений? Как можно уменьшить погрешности вычислений?

18. Дайте определение совместной системы алгебраических уравнений.

19. Что называется рангом основной матрицы системы?

20. Как зависит наличие множества решений системы алгебраических уравнений от ранга основной и расширенной матрицы?

21. Дайте определение базисного минора системы уравнений.

22. Сколькими вариантами можно выбрать базисные неизвестные?

§2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ. МЕТОД ПРОСТОЙ ИТЕРАЦИИ. МЕТОД ЗЕЙДЕЛЯ

§2.1. Основные теоретические сведения, необходимые для решения задач и упражнений

1. Приближенные методы решения систем линейных уравнений позволяют получить решение системы заданной точностью при помощи некоторого единообразного – *итерационного – процесса*. Прежде, чем применять приближенный метод к некоторой системе уравнений, нужно убедиться в его применимости к этой системе [1-19].

2. Для решения системы n уравнений с n неизвестными

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

методом простой итерации (методом последовательных приближений) следует:

1) Проверить выполнение достаточного признака сходимости итерационного процесса:

$$\sum_{j \neq i} \left| a_{ij} \right| < \left| a_{ii} \right|, \qquad (i, j = 1, 2, \ldots, n), \tag{2}$$

т.е. нужно убедиться, что для каждого уравнения системы модули диагональных коэффициентов при неизвестных больше суммы модулей всех остальных коэффициентов при неизвестных (не считая свободных членов). Условие (2) принято называть условием *диагонального преобладания* матрицы коэффициентов при неизвестных.

2) Если условие (2) выполнено, привести систему (1) к эквивалентному виду:

$$x_i = \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} x_j + \beta_i, \qquad (i, j = 1, 2, \ldots, n), \tag{3}$$

т.е.

$$\begin{cases} x_1 = \alpha_{12}x_2 + \alpha_{13}x_3 + \ldots + \alpha_{1n}\, x_n + \beta_1, \\ x_2 = \alpha_{22}x_1 + \alpha_{23}x_3 + \ldots + \alpha_{2n}\, x_n + \beta_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_n = \alpha_{n2}x_1 + \alpha_{n3}x_2 + \ldots + \alpha_{n,n-1}x_{n-1} + \beta_n. \end{cases}$$

(Для этого нужно первое уравнение системы (1) разрешить относительно x_1, второе – относительно x_2 и т.д.). Систему вида (3) называют *системой, разрешённой относительно диагональных неизвестных.*

3) Приступить к выполнению процесса итераций. Для этого в качестве *нулевого приближения* к решению системы можно взять произвольный набор чисел $x_1^{(0)}, x_2^{(0)},..., x_n^{(0)}$. Подставляя эти числа в правые части системы (3), получим новый набор чисел $x_1^{(1)}, x_2^{(1)},..., x_n^{(1)}$ – *первое приближение* к решению системы. Эти числа снова подставляем в правые части системы (3); получим *второе приближение* к решению системы: $x_1^{(2)}, x_2^{(2)},..., x_n^{(2)}$ и так далее, т.е.

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} x_j^{(k)} + \beta_i, \ (k = 0,1,2,...), (i = 1,2,...,n). \qquad (3.1)$$

В формуле (3.1) у величин $x_i^{(k+1)}$ нижний индекс i обозначает номер неизвестного, а верхний индекс $(k+1)$ обозначает номер приближения (номер итерации) к точному значению неизвестного x_i.

4) Для получения решения с заранее заданной точностью итерационный процесс продолжается до тех пор, пока с этой степенью точности не будут получены одинаковые значения соответствующих неизвестных в двух итерациях подряд. Если при этом требуется найти неизвестные с p верными десятичными знаками, то в значениях последовательных приближений следует удерживать $p+k, (k \geq 1)$ десятичных знаков. После завершения итерационного процесса результаты следует округлить до p десятичных знаков.

5) Если условие диагонального преобладания (2) не выполнено, однако определитель коэффициентов при неизвестных системы (1) отличен от нуля, то с помощью линейного комбинирования уравнений системы её всегда можно заменить такой эквивалентной системой, для которой условие сходимости уже будет выполнено. Практически поступают следующим образом:

– из заданной системы выделяют уравнения с коэффициентами, модули которых больше суммы модулей остальных коэффициентов уравнения;

– каждому выделенному уравнению присваивают такой номер в новой системе, чтобы наибольший по модулю коэффициент оказался диагональным;

– из уравнений системы (включая выделенные) составляют линейно независимые комбинации с таким расчетом, чтобы был соблюдён указанный выше принцип комплектования новой системы, имея в виду, чтобы при таком комплектовании все уравнения данной системы были учтены.

Отметим, что приведение исходной системы уравнений (с определителем отличным от нуля) к системе с диагональным преобладанием часто является нетривиальной задачей в том плане, что её решение может потребовать значительного количества вычислений. Поэтому необходимо соблюдать разумный компромисс, и, при необходимости, использовать другой метод решения исходной системы уравнений.

Отметим также, что в качестве нулевого приближения решения системы уравнений зачастую следует выбирать правые части уравнений. Это особенно оправдано, если условие диагонально преобладания (2) выполнено со значительным “запасом”:

$$\sum_{j\neq i}\left|a_{ij}\right| << \left|a_{ii}\right|, \qquad (i,j=1,2,...,n), \tag{3.2}$$

т.е. когда по модулю диагональные элементы <u>*значительно больше*</u> суммы модулей остальных коэффициентов при неизвестных каждого i – го уравнения.

Поясним сказанное на примере.

<u>Пример</u>. Систему уравнений

$$\begin{cases} 3x_1+2x_2-3x_3-10x_4=-8, \\ 2x_1-12x_2+x_3-\ x_4=-10, \\ x_1+2x_2+3x_3-\ x_4=\ 5, \\ 2x_1-x_2\ +\ x_3+2x_4=\ 4, \end{cases}$$

привести к виду, пригодному для применения метода последовательных приближений.

<u>Решение:</u> В первом уравнении коэффициент при x_4 по модулю больше суммы модулей остальных коэффициентов при неизвестных, поэтому можно принять это уравнение за четвёртое уравнение новой системы. Коэффициент при x_2 во втором уравнении также по модулю больше суммы модулей остальных коэффициентов, поэтому можно принять это уравнение за второе уравнение новой системы. Первое и третье уравнения новой системы могут быть получены различными способами. Умножив, например, первое уравнение данной системы на 5, а четвёртое на 2 и сложив полученные результаты, найдём первое уравнение новой системы:

$$63x_1-14x_2+9x_3-2x_4=56.$$

Третье уравнение новой системы можно получить, если из третьего уравнения данной системы, умноженного на 20, вычесть первое уравнение, умноженное на 3:

$$11x_1 + 34x_2 + 69x_3 + 10x_4 = 124.$$

В итоге получили систему уравнений, эквивалентную исходной и удовлетворяющую достаточным условиям (2) применимости (сходимости) процесса итерации:

$$\begin{cases} 63x_1 - 14x_2 + 9x_3 - 2x_4 = 56, \\ 2x_1 - 12x_2 + x_3 - x_4 = -10, \\ 11x_1 + 34x_2 + 69x_3 + 10x_4 = 124, \\ 3x_1 + 2x_2 - 3x_3 - 10x_4 = -8. \end{cases}$$

<u>Пусть система уравнений (1)</u> каким–либо способом приведена к эквивалентной ей системе уравнений вида:

$$x_i = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij} x_j + \beta_i, \qquad (i = 1, 2, ..., n). \tag{4}$$

В этой системе, как и требуется "диагональное неизвестное" x_i, $(i = 1, 2, ..., n)$ имеется в правой и в левой частях в каждом уравнении.

<u>Построение итерационного процесса по методу Зейделя</u> заключается в применении таких формул, в которых для построения очередного приближённого решения используется вполне конкретная информация о предыдущем приближении, а именно:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{1j} x_j^{(k)} + \beta_1, \\ x_2^{(k+1)} = \alpha_{21} x_1^{(k+1)} + \sum_{j=2}^{n} \alpha_{2j} x_j^{(k)} + \beta_2, \\ x_3^{(k+1)} = \alpha_{31} x_1^{(k+1)} + \alpha_{32} x_2^{(k+1)} + \sum_{j=3}^{n} \alpha_{3j} x_j^{(k)} + \beta_3, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ x_n^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{nj} x_j^{(k+1)} + \alpha_{nn} x_n^{(k)} + \beta_n, \end{cases} \tag{5}$$

где $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ – есть k–е приближение к решению системы. Нулевое приближение $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$ выбирается при этом произвольно.

Проверка достаточного признака сходимости и оценка точности получаемого решения в методе Зейделя производится так же, как и в методе простой итерации.

Метод Зейделя отличается от метода простой итерации только тем, что при нахождении k– го приближения значения x_i учитываются k– е приближение значений $x_1, \dots, x_{i-1}$.

§2.2. Примеры решения задач и упражнений

1. Методом простой итерации (методом последовательных приближений) решить (с точностью до 0,01) систему уравнений:

$$\begin{cases} 5x_1 - x_2 = 1, \\ -2x_1 + 4x_2 = 3\ . \end{cases}$$

<u>Решение</u>: Условие сходимости (2) итерационного процесса выполнено:
$5 > -1,\ 4 > 2$. Приведём систему уравнений к виду, разрешённому относительно диагональных неизвестных (3):

$$\begin{cases} x_1 = 0,200x_2 + 0,200, \\ x_2 = 0,500x_1 + 0,750. \end{cases}$$

Результаты итерационного процесса, применённого по формулам (3.1) к этой системе, представим таблицей (в 1–й колонке запишем порядковый номер итерации, во 2–й и 3–й запишем значения неизвестных, полученных при k – й итерации):

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$
0	0,200	0,750
1	0,350	0,850
2	0,370	0,925
3	0,385	0,935
4	0,387	0,942
5	0,388	0,943
6	0,389	0,944
7	0,389	0,944

Поскольку по условию нам нужно получить решение системы с точностью до сотых, то в значениях последовательных приближений мы удерживали три знака после запятой. Так как в двух итерациях подряд, 6–й и 7–й, значения неизвестных совпадают, то требуемая точность оказалась достигнутой. Округляя результаты до второго знака после запятой, получим приближенное решение системы:

$$x_1 = 0,39\,; \qquad x_2 = 0,94.$$

2. Методом последовательных приближений решить (с абсолютной погрешностью до 0,001) систему уравнений:

$$\begin{cases} 10x_1 - 2x_2 - 3x_3 = 2, \\ -2x_1 + 20x_2 + 5x_3 = 6, \\ -5x_1 + 2x_2 + 30x_3 = 10. \end{cases}$$

Решение: Условие сходимости (2) итерационного процесса выполнено:

$$10 > 2 + 3, \;\; 20 > 2 + 5, \quad 30 > 5 + 2.$$

Разрешим первое уравнение системы относительно x_1, второе – относительно x_2, третье – относительно x_3. Получим эквивалентную систему вида (3):

$$\begin{cases} x_1 = 0,2000x_2 + 0,3000x_3 + 0,2000, \\ x_2 = 0,1000x_2 - 0,2500x_3 + 0,3000, \\ x_3 = 0,1667x_2 - 0,0667x_3 + 0,3333. \end{cases}$$

Как и в предыдущем примере, результаты дальнейших вычислений по (3.1) сведем в таблицу, в столбцах которой будем записывать порядковые номера итераций и значения неизвестных, получаемых на k – м шаге итерации:

к	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0,2000	0,3000	0,3333
1	0,3600	0,2527	0,3466
2	0,3545	0,2494	0,3765
3	0,3628	0,2413	0,3757
4	0,3610	0,2424	0,3776
5	0,3618	0,2417	0,3772
6	0,3615	0,2419	0,3778

7	0,3617	0,2417	0,3774
8	0,3615	0,2419	0,3775
9	0,3616	0,2418	0,3774
10	0,3616	0,2418	0,3774

Так как решение системы ищется с точностью до тысячных, то в промежуточных результатах мы сохраняем четыре знака после запятой. Поскольку на 9–м и 10–м шагах итерационного процесса значения неизвестных совпали, то требуемая точность вычисления достигнута. Округляя результаты до трех знаков после запятой (до 0,001), получаем:

$$x_1 = 0,362\ ; \quad x_2 = 0,242\ ; \quad x_3 = 0,377.$$

3. Систему уравнений

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

привести к виду, пригодному для применения метода последовательных приближений и (с точностью до сотых) найти её решение.

Решение: Отметим, что система имеет (почти очевидное) решение: $x_1 = 1,\ x_2 = 0,\ x_3 = 0.$ Однако, неясно, имеет ли система другие решения. Применяемый метод даст ответ и на этот вопрос.

В каждом из уравнений данной системы не существует коэффициента, модуль которого превосходил бы сумму модулей остальных коэффициентов. Поэтому ни одно уравнение этой системы не войдет в новую систему, к которой можно будет применить метод последовательных приближений. Для получения новой системы из трёх уравнений с тремя неизвестными нужно составить подходящие линейные комбинации из уравнений данной системы. Складывая 1 – е, 2 – е и 3 – е уравнения данной системы, получим уравнение:

$$6x_1 + 4x_2 + x_3 = 6.$$

Его можно принять за первое уравнение новой системы, поскольку $6 > 4 + 1$. Вычитая из 3–го уравнения 1– е, найдем второе уравнение системы:

$$2x_1 + 5x_2 + 0 \cdot x_3 = 2.$$

Третье уравнение новой системы можно получить, сложив 1– е уравнение со 2– м, умноженным на (-8), и 3–м, умноженным на 4:

$$-3x_1 + 7x_2 + 13x_3 = -3.$$

К новой системе, эквивалентной данной, теперь можно применить метод простой итерации:

$$\begin{cases} 6x_1 + 4x_2 + x_3 = 6, \\ 2x_1 + 5x_2 + 0 \cdot x_3 = 2, \\ -3x_1 + 7x_2 + 13x_3 = -3. \end{cases}$$

Для применения метода простой итерации запишем систему в виде (3) так:

$$\begin{cases} x_1 = 0,667x_2 - 0,167x_3 + 1,000, \\ x_2 = -0,400x_1 + 0,400, \\ x_3 = 0,231x_1 - 0,538x_2 + 0,231. \end{cases}$$

Результаты итерационного процесса (3.1) представим таблицей:

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	1,000	0,400	-0,231
1	0,772	0,000	-0,215
2	0,964	0,091	-0,053
3	0,948	0,014	-0,057
4	1,000	0,021	-0,019
5	0,987	0,000	-0,011
6	0,999	0,005	-0,003
7	0,997	0,000	-0,003
8	1,000	0,000	0,000
9	1,000	0,000	0,000

Мы видим, что с абсолютной погрешностью до сотых решение системы найдено:

$$x_1 = 1,00; \quad x_2 = 0,00; \quad x_3 = 0,00.$$

Отметим, что мы получили решение системы и при этом убедились, что указанное выше решение является единственным.

4. Методом Зейделя решить систему уравнений, рассмотренную в примере 2.

Решение: Как и в методе последовательных приближений, приведем систему уравнений к виду:

$$\begin{cases} x_1 = 0,2000x_2 + 0,3000x_3 + 0,2000, \\ x_2 = 0,1000x_1 - 0,2500x_3 + 0,3000, \\ x_3 = 0,1667x_1 - 0,0667x_2 + 0,3333. \end{cases}$$

В качестве нулевого приближения возьмём не произвольные числа, а – по аналогии с методом простой итерации – числа из правого столбца системы:

$$x_1^{(0)} = 0,2000; \quad x_2^{(0)} = 0,3000; \quad x_3^{(0)} = 0,3333.$$

Применяя для построения итерационного процесса формулы (5), сведем результаты в таблицу:

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0,2000	0,3000	0,3333
1	0,3600	0,2527	0,3765
2	0,3634	0,2422	0,3778
3	0,3617	0,2418	0,3778
4	0,3617	0,2418	0,3778

Таким образом, $x_1 = 0,362; \quad x_2 = 0,242; \quad x_3 = 0,378.$

В рассмотренном примере скорость сходимости итерационного процесса Зейделя выше, чем скорость сходимости итерационного процесса последовательных приближений.

§2.3. Упражнения для самостоятельной работы

1. Решить методом последовательных приближений две системы уравнений:

а) $\begin{cases} 8x_1 + x_2 + x_3 = 26, \\ x_1 + 5x_2 - x_3 = 7, \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 7. \end{cases}$ Решение найти с точностью до 0,1.

б) $\begin{cases} 7,6x_1 + 0,5x_2 + 2,4x_3 = 1,9, \\ 2,2x_1 + 9,1x_2 + 4,4x_3 = 9,7, \\ -1,3x_1 + 0,2x_2 + 5,8x_3 = -1,4. \end{cases}$ Решение найти с точностью до 0,001.

Ответ: а) $x_1 = 3,0; \quad x_2 = 1,0; \quad x_3 = 1,0.$

б) $x_1 = 0,236$; $x_2 = 1,103$; $x_3 = -0,214$.

2. Систему уравнений $\begin{cases} 0 \cdot x_1 + x_2 - 2x_3 = 1, \\ 2x_1 + 0 \cdot x_2 + 3x_3 = 5, \\ -5x_1 + 2x_2 + 0 \cdot x_3 = 1, \end{cases}$

(с нулевыми диагональными коэффициентами) привести к виду, пригодному для применения метода последовательных приближений, и найти её решение (с точностью до 0,01).

<u>Ответ</u>: $x_1 = 1,00$; $x_2 = 3,00$; $x_3 = 1,00$.

3. Решить методом Зейделя (с точностью до 0,01) две системы уравнений:

а) $\begin{cases} 6,1x_1 + 0,7\,x_2 - 0,05x_3 = 6,97, \\ -1,3x_1 - 2,05x_2 + 0,87x_3 = 0,10, \\ 2,5x_1 - 3,12x_2 - 5,03x_3 = 2,04; \end{cases}$ **б)** $\begin{cases} 1,14x_1 - 2,15x_2 - 5,11x_3 = 2,05, \\ 0,42x_1 - 1,13x_2 + 7,05x_3 = 0,80, \\ -0,71x_1 + 0,81x_2 - 0,02x_3 = -1,07. \end{cases}$

<u>Ответ</u>: а) $x_1 = 1,22$; $x_2 = -0,67$; $x_3 = 0,35$.; б) $x_1 = 1,12$; $x_2 = -0,34$; $x_3 = -0,01$.

4. Решить двумя методами: методом последовательных приближений и методом Зейделя систему уравнений:

$$\begin{cases} 8,7x_1 - 3,1x_2 + 1,8x_3 - 2,2x_4 = -9,7, \\ 2,1x_1 + 6,7x_2 - 2,2x_3 - 0,0x_4 = 13,1, \\ 3,2x_1 - 1,8x_2 - 9,5x_3 - 1,9x_4 = 6,9, \\ 1,2x_1 + 2,8x_2 - 1,4x_3 - 9,9x_4 = 25,1. \end{cases}$$

Решение найти с точностью до 0,01.

<u>Ответ</u>: $x_1 = -0,72$; $x_2 = 1,88$; $x_3 = -0,92$; $x_4 = -1,94$.

§2.4. Вопросы для самопроверки

1. Расскажите о способе построения итерационного процесса по методу простой итерации (по методу последовательных приближений).

2. В чем заключается достаточный признак сходимости итерационного процесса?

3. Что означает выражение: «Итерационный процесс сходится»?

3. Расскажите о нахождении решения системы с заранее заданной точностью.

4. Как данную систему уравнений привести к виду, пригодному для применения метода последовательных приближений (метода Зейделя)?

5. Приведите пример решения системы уравнений методом последовательных приближений.

6. Расскажите о построении итерационного процесса по методу Зейделя.

7. Приведите пример решения системы уравнений методом Зейделя.

8. Как может измениться решение системы

$$\begin{cases} 6,1x_1 + 0,7\ x_2 - 0,05x_3 = \ 6,97, \\ -1,3x_1 - 2,05x_2 + 0,87x_3 = \ 0,10, \\ 2,5x_1 - 3,12x_2 - 5,03x_3 = \ 2,04, \end{cases}$$

если в системе в третьем уравнении все коэффициенты умножить на большое число, например, на 10^{150}?

9. Расскажите, какой метод целесообразно применять для решения системы уравнений с вырожденной основной матрицей?

10. Какой метод следует применить для нахождения решения системы уравнений

следующего вида
$$\begin{cases} 2,2x_4 = -9,7, \\ 2,2x_3 - 0,0x_4 = 13,1, \\ 1,8x_2 - 9,5x_3 - 1,9x_4 = 6,9, \\ 1,2\,x_1 + 2,8x_2 - 1,4x_3 - 9,9x_4 = 25,1, \end{cases}$$

с наименьшими погрешностями?

11. Расскажите, какой метод сходится быстрее (метод простой итерации или метод Зейделя) в примере 4 упражнений для самостоятельной работы?

12. Дайте определение системы уравнений с диагональным преобладанием.

13. Приведите пример системы уравнений, удовлетворяющей условию (3.2).

14. Применимы ли методы простой итерации и метод Зейделя для систем уравнений, у которых число неизвестных меньше числа уравнений?

15. Пусть заданы две систему из n уравнений с n неизвестными, имеющими единственные решения. Пусть первая система удовлетворяет условию (2), а вторая система удовлетворяет условию (3.2). Для какой системы уравнений итерационный процесс может оказаться более эффективным?

§3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ В СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

§3.1. Основные теоретические сведения, необходимые для расчёта концентрации веществ спектрофотометрическими методами

Колориметрический и фотометрический методы анализа веществ (растворов) основаны на учёте изменения интенсивности окраски веществ с изменением концентрации поглощающего вещества, коэффициента молярного поглощения и толщины поглощающего слоя (см. дополнительную литер. [1, 2] к §4). Интенсивность окраски вещества регистрируется по изменению интенсивности светового потока, проходящего через вещество.

Колориметрический и спектрофотометрический методы анализа веществ используют закон Бугера-Ламберта-Бера (см. дополнительную литер. [3]-[6] к §3)., который можно представить в следующем виде:

$$A = \varepsilon c l = -\log_{10}(\frac{I}{I_0}), \tag{1}$$

где A – оптическая плотность вещества, ε – коэффициент молярного поглощения вещества, c – концентрация поглощающего вещества (моль/л), l – толщина поглощающего слоя (см); I, I_0 – интенсивность светового потока до и после его прохождения через слой вещества или раствора. Закон (1) справедлив только для монохроматического светового потока, т.е. для светового потока определённой длины волны λ (нм).

Линейная зависимость A от каждого параметра ε, c, l позволяет применять методы линейной алгебры для нахождения одних величин по известным другим. Так, по известным концентрациям c поглощающего вещества можно определить коэффициент ε молярного поглощения вещества при различных длинах λ волн; по известным значениям ε можно найти концентрации c поглощающего вещества в исследуемых растворах.

Рассмотрим случай, когда требуется найти концентрации c поглощающего вещества по известным A, ε, l.

Если в системе содержится одно вещество, то (имеем одно уравнение (1)) и нахождение концентрации c – просто.

Если в системе содержится несколько веществ, то необходимо заранее обусловить, что все они по-разному поглощают избранную длину λ волны, и тогда, как это следует из отношения Фирордта (см. дополнительную литер. [6] к §3)., :

$$A_\lambda = \sum_{i=1}^{M} A_{\lambda i}, \tag{2}$$

где M – число поглощающих веществ, а величины $A_{\lambda i}$ задаются по формулам, аналогичным формуле (1); в (2) предполагается также отсутствие химического взаимодействия веществ. Обычно в ходе эксперимента толщина l поглощающего слоя остается постоянной, поэтому вместо (2) используют формулу

$$A_\lambda = l\sum_{i=1}^{M} \varepsilon_{\lambda i} c_i, \tag{3}$$

затем перенормировывают (3) и избавляются от l.

Если для поглощающих веществ в системе (3) коэффициенты молярного поглощения ε при различных длинах волн различаются, то для определения концентраций $c_1, c_2, \ldots, c_M$ M различных поглощающих веществ можно получить систему M линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} A_1 = \varepsilon_{11}c_1 + \varepsilon_{12}c_2 + \ldots + \varepsilon_{1M}c_M, \\ A_2 = \varepsilon_{21}c_1 + \varepsilon_{22}c_2 + \ldots + \varepsilon_{2M}c_M, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ A_M = \varepsilon_{M1}c_1 + \varepsilon_{M2}c_2 + \ldots + \varepsilon_{MM}c_M, \end{cases} \tag{4}$$

где индекс при A и первый индекс при ε относятся к длине волны, а индекс при c и второй индекс при ε относится к номеру поглощающего компонента.

В качестве иллюстрации рассмотрим результаты (см. дополнительную литер. [1] к §3) одновременного спектрофотометрического определения никеля, марганца и меди в виде их комплексов с 1-(2-перидилазо)-2-нафталом (ПАН) в сталях.

Исходные значения оптической плотности A_1 (и A_2 для другого эксперимента), коэффициента ε_1 молярного поглощения никеля ($Ni\,R_2$), коэффициента ε_2 – марганца ($Mn\,R_2$) и коэффициента ε_3 – меди ($Cu\,R_2$) при избранных длинах волн для анализа стали представим таблицей 1.

λ .	A_1	A_2	ε_1, NiR_2	ε_2, MnR_2	ε_3, CuR_2
520	0.697	0.908	36900	42700	37400
525	0.784	1.033	43600	44600	39400
530	0.809	1.057	46600	43300	39700
535	0.769	1.015	42500	40600	38800
540	0.735	0.966	36400	39300	38200
545	0.739	0.968	33500	40700	38400
550	0.778	1.025	34000	43600	39200

555	0.840	1.100	37000	47300	40400
560	0.904	1.188	42700	49400	41000
565	0.911	1.197	51200	47000	39300
570	0.800	1.062	54900	38200	35000
575	0.606	0.791	45300	26600	29200
580	0.397	0.521	28300	16500	22800
585	0.255	0.334	15600	10300	17300
590	0.168	0.221	8500	6800	18100
595	0.118	0.155	5400	4800	10000
600	0.087	0.115	3300	3500	7700
610	0.058	0.076	1900	2400	5400
620	0.042	0.058	1400	1900	3700

Таблица 1 позволяет для каждого значения A оптической плотности выбрать $C_{18}^3 = 969$ (C_m^n- число сочетаний из m по n) различных систем уравнений по три уравнения. Обилие систем объясняется необходимостью усреднять тем или иным способом значения c_1, c_2, c_3, так как каждая система трех уравнений позволяет найти значения c_i $(i = 1, 2, 3)$ приближенно. Погрешности в определении $A_1, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ возникают по двум причинам:

1) погрешности в измерениях величин $A_1, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$;

2) погрешности в вычислениях за счёт округлений.

Для уменьшения погрешностей вида 1) необходимо выбирать интервалы наиболее точных измерений величин, например, для величины A_1 (и A_2) таким интервалом является интервал $(0.2\,;\,1.2)$ (см. дополнительную литер. [2] к §3).

Для уменьшения погрешностей (округлений) вычислений необходимо выбирать такие системы уравнений, у которых определитель системы в определённом смысле наибольший. В частности, одно из лучших приближений к значениям c_1, c_2, c_3 получим при $\lambda_{нм} = 555, 570, 585$.

Усреднение N величин $x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots, x_N$ измерений (вычислений) производят различными способами. Наиболее часто используют среднее арифметическое $x_{ср}$

(обозначают часто $\overline{x}$), среднее геометрическое $x_{геом}$ (или $G(x_1,\ x_2,...,x_i,...,\ x_N\ )$), среднее гармоническое $x_{гарм}$ (или $A_{-1}(x_1,\ x_2,...,\ x_i,...,\ x_N\ )$), вычисляемые соответственно так:

$$x_{ср} = \overline{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + ... + x_N}{N} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \qquad (5)$$

$$x_{геом} = G(x_1,\ x_2,...,x_i,...,\ x_N\ ) = \sqrt[N]{x_1 \bullet x_2 \bullet,...,\bullet x_i \bullet,...,\bullet x_N} = (\prod_{i=1}^{N} x_i)^{\frac{1}{N}}, \qquad (6)$$

$$x_{гарм} = A_{-1}(x_1,\ x_2,...,x_i,...,\ x_N\ ) = \frac{N}{\frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2} + ... + \frac{1}{x_i} + ... + \frac{1}{x_N}} = \frac{N}{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{x_i}}. \qquad (7)$$

При вычислении средних величин необходимо учитывать значения величин x_i. Так, при вычислении среднего геометрического $x_{геом}$ (6) при N чётном видим, что в подкоренном выражении произведение должно быть числом неотрицательным; при вычислении среднего гармонического $x_{гарм}$ (7) необходимо выбирать $x_i \neq 0,\ (i = 1,...,N)$.

§3.2. Примеры решения задач и упражнений

Пример 1. Найти концентрации $c_1,\ c_2,\ c_3$ никеля, марганца и меди соответственно в виде их комплексов с ПАН в сталях по результатам трёх экспериментов для поглощения $\lambda_{нм} = 555,\ 570,\ 585$ и $A_1 = 0.840;\ 0.800;\ 0.255$.

Решение: Искомые концентрации $c_1,\ c_2,\ c_3$ удовлетворяют системе линейных уравнений:

$$\begin{cases} 37000c_1 + 473000c_2 + 40400c_3 = 0.840, \\ 54900c_1 + 382000c_2 + 35000c_3 = 0.800, \\ 15600c_1 + 103000c_2 + 17300c_3 = 0.255. \end{cases}$$

Для решения системы уравнений и отыскания $c_1,\ c_2,\ c_3$ применим формулы Крамера:

$$c_i = \frac{D_i}{D}, \qquad (i = 1,\ 2,\ 3).$$

Так как

$$D = 10^6 \cdot \begin{vmatrix} 370 & 473 & 404 \\ 549 & 382 & 350 \\ 156 & 103 & 173 \end{vmatrix} = -9211181 \cdot 10^6,$$

$$D_1 = 10^4 \cdot 10^{-3} \cdot \begin{vmatrix} 840 & 473 & 404 \\ 800 & 382 & 350 \\ 255 & 103 & 173 \end{vmatrix} = -40817500,$$

$$D_2 = 10^4 \cdot 10^{-3} \cdot \begin{vmatrix} 370 & 840 & 404 \\ 549 & 800 & 350 \\ 156 & 255 & 173 \end{vmatrix} = -95924000,$$

$$D_3 = 10^4 \cdot 10^{-3} \cdot \begin{vmatrix} 370 & 473 & 840 \\ 549 & 382 & 800 \\ 156 & 103 & 255 \end{vmatrix} = -41913350,$$

то получим:

$$c_1 = 0.443129 \cdot 10^{-5}, \quad c_2 = 1.041386 \cdot 10^{-5}, \quad c_3 = 0.455029 \cdot 10^{-5}. \tag{8}$$

Одно из наихудших приближений к значениям концентраций c_1, c_2, c_3, в частности, из-за погрешностей в измерениях A_1, получим при $\lambda_{нм} = 600,\ 610,\ 620$. Рассмотрим этот случай в следующем примере.

Пример 2. Найти концентрации c_1, c_2, c_3 никеля, марганца и меди в виде их комплексов с ПАН в сталях по трём экспериментам для $\lambda_{нм} = 600,\ 610,\ 620$ и соответствующим значениям (см. табл. 1) A_1.

Решение: Составим расширенную матрицу системы уравнений относительно искомых величин c_1, c_2, c_3:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 3300 & 3500 & 7700 & 0.087 \\ 1900 & 2400 & 5400 & 0.058 \\ 1400 & 1900 & 3700 & 0.042 \end{array}\right).$$

Решим систему по правилу Крамера. Аналогично предыдущему примеру находим:

$$D = -774 \cdot 10^6,\ D_1 = -2460,\ D_2 = -4920,\ D_3 = -4370,$$

$$c_1 = 0.317829 \cdot 10^{-5},\ c_2 = 0.635659 \cdot 10^{-5},\ c_3 = 0.564599 \cdot 10^{-5}. \tag{9}$$

Определитель системы уравнений примера 1 по абсолютному значению почти в 1000 раз превышает определитель системы примера 2. Это вносит дополнительные погрешности в значения концентраций c_1, c_2, c_3 второго примера.

При анализе численных результатов различных экспериментов полезно оценить абсолютные и относительные погрешности одних и тех же величин.

Пример 3. Найти абсолютные и относительные погрешности (вычисления с учётом экспериментов) концентраций c_1, c_2, c_3 примера 2, считая концентрации примера 1 эталонными.

Решение: Искомые абсолютные и относительные погрешности находим соответственно по формулам:

$$\Delta_i = \left| c_i^{(1)} - c_i^{(2)} \right|, \qquad \delta_i = \frac{\Delta_i}{c_i^{(1)}}, \quad (i = 1, 2, 3),$$

где верхние индексы у концентраций обозначают номер примера(эксперимента).

Получаем:

$$\Delta_1 = \left| 0.443129 \cdot 10^{-5} - 0.317829 \cdot 10^{-5} \right| = 0.1253 \cdot 10^{-5},$$

$$\Delta_2 = \left| 1.041386 \cdot 10^{-5} - 0.635659 \cdot 10^{-5} \right| = 0.4057 \cdot 10^{-5},$$

$$\Delta_3 = \left| 0.455029 \cdot 10^{-5} - 0.564599 \cdot 10^{-5} \right| = 0.1096 \cdot 10^{-5},$$

$$\delta_1 = \frac{\Delta_1}{\left| c_1^{(1)} \right|} = 0.2828 \qquad \text{(или 28.28\%)},$$

$$\delta_2 = \frac{\Delta_2}{\left| c_2^{(1)} \right|} = 0.3896 \qquad \text{(или 38.96\%)},$$

$$\delta_3 = \frac{\Delta_3}{\left| c_3^{(1)} \right|} = 0.1942 \qquad \text{(или 19.42\%)}.$$

Вычисленные абсолютные погрешности Δ_1 и Δ_3 концентраций c_1, c_3 примера 2 по сравнению с концентрациями примера 1 имеют тот же порядок, что и сами величины концентраций, а для c_2 погрешность Δ_2 меньше на порядок; относительные погрешности δ_i $(i = 1, 2, 3)$ концентраций изменяются примерно от 19% до 39%. Такие погрешности велики. Они свидетельствуют о существенном разбросе результатов наблюдений и требуют, в частности, улучшения, как методики проведения экспериментов, так и обработки результатов экспериментов.

В примерах 1, 2, 3 вычислялись и анализировались концентрации c_1, c_2, c_3 для значений оптических плотностей A_1(табл. 1). Значения оптических плотностей A_2

(табл. 1) относятся к новой серии экспериментов и так же важны, как и первая серия экспериментов с A_1.

Пример 4. Найдите среднее арифметическое (5) для значения концентраций c_1, c_2, c_3 по результатам (8), (9) первых двух примеров.

Решение.

$$c_{1,cp} = \frac{1}{2}(0.443129 \cdot 10^{-5} + 0.317829 \cdot 10^{-5}) = 0.38048 \cdot 10^{-5},$$

$$c_{2,cp} = \frac{1}{2}(1.041386 \cdot 10^{-5} + 0.635659 \cdot 10^{-5}) = 0.83852 \cdot 10^{-5},$$

$$c_{3,cp} = \frac{1}{2}(0.455029 \cdot 10^{-5} + 0.564599 \cdot 10^{-5}) = 0.509814 \cdot 10^{-5}.$$

§3.3. Упражнения для самостоятельной работы

1. В следующих трех примерах найдите и оцените концентрации c_1, c_2, c_3 для оптических плотностей A_2 при поглощении на тех же длинах волн, что и в примерах 1, 2, 3. Используйте аналогию с примерами 1, 2, 3 и таблицу 1 исходных данными для построения систем уравнений.

2. Покажите, что для поиска концентраций c_1, c_2, c_3 при $\lambda_{нм} = 555,\ 570,\ 585$ и при $A_1 = 1{,}100;\ 1{,}062;\ 0{,}334$ приходим к следующей расширенной матрице

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 37000 & 47500 & 40400 & 1.100 \\ 54900 & 38200 & 35000 & 1.062 \\ 15600 & 10300 & 17300 & 0.334 \end{array}\right).$$

3. Покажите, что для поиска концентраций c_1, c_2, c_3 при $\lambda_{нм} = 600,\ 610,\ 620$ и при $\bar{A}_1 = 1{,}100;\ 1{,}062;\ 0.334$ и $\bar{A}_1 = 0{,}115;\ 0{,}706;\ 0{,}058$ приходим к расширенной матрице

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 3300 & 3500 & 7700 & 0.115 \\ 1900 & 2400 & 5400 & 0.076 \\ 1400 & 1900 & 3700 & 0.058 \end{array}\right).$$

Покажите, что концентрации c_1, c_2, c_3 таковы:

$$c_1 = \frac{-7500}{-774 \cdot 10^6} = 0.068992 \cdot 10^{-5}\ ,\quad c_2 = \frac{-9010}{-774 \cdot 10^6} = 1{,}164083 \cdot 10^{-5}\ ,$$

$$c_3 = \frac{-4250}{-774 \cdot 10^6} = 0{,}549096 \cdot 10^{-5}\ .$$

§3.4. Вопросы для самопроверки

1. Как определяются абсолютная и относительная погрешности вычисления концентраций веществ?
2. Как могут изменяться концентрации c_1, c_2, c_3 никеля, марганца и меди в виде их комплексов с ПАН в сталях по трём экспериментам для $\lambda_{нм} = \lambda_{нм(1)}$, $\lambda_{нм(2)}$, $\lambda_{нм(3)}$ и по соответствующим значениям (см. табл. 1) A_1, A_2?
3. Как влияет изменение длины волны $\lambda_{нм}$ на точность вычисления концентраций c_1, c_2, c_3 в серии (например, из трёх) экспериментов?
4. Как изменяется C_m^3 - число сочетаний из m по 3 при возрастании m на единицу; увеличится ли число вариантов для определения концентраций c_1, c_2, c_3?
5. Какие виды матриц используются при решении систем уравнений приближенными методами?
6. Назовите несколько точных и приближённых методов нахождения решения систем алгебраических уравнений, возникающих при расчёте нитрующих смесей.
7. Как вычислить оптическую плотность вещества A, если в эксперименте заданы: ε – коэффициент молярного поглощения вещества, c – концентрация поглощающего вещества (моль/л) и l – толщина поглощающего слоя (см)?
8. Сколько нитрующих смесей можно составить по данным таблицы 1?
9. Сколько необходимо провести экспериментов для определения концентраций c_1, c_2, c_3 веществ, если для экспериментов заданы монохроматические длины волн?

§4. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ ДЛЯ РАСЧЁТА НИТРУЮЩИХ СМЕСЕЙ

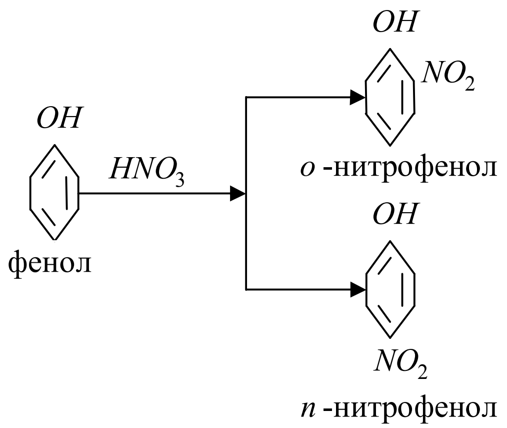
§4.1. Основные теоретические сведения, необходимые для расчёта нитрующих смесей

Реакция нитрования заключается в замещении атомов водорода в углеводородах остатками азотной кислоты – нитрогруппами (NO_2). В случае замещения атомов водорода нитрогруппами в бензольном ядре образуются ароматические нитросоединения и вода (см. дополнительную литер. [3] к §4). Для реакции применяют концентрированную азотную кислоту обычно в смеси с концентрированной серной кислотой (нитрующая смесь). Серная кислота играет роль катализатора и водоотнимающего средства. Нитрующее действие азотной кислоты используют преимущественно в производстве красителей, взрывчатых веществ и др. Большой практический интерес представляет нитрование фенолов. При действии разбавленной азотной кислоты

[первая нитрующая смесь (см. дополнительную литер. [4] к §4)]:

$$25\%\ HNO_3,\quad 60\%\ H_2SO_4,\quad 15\%\ H_2O,$$

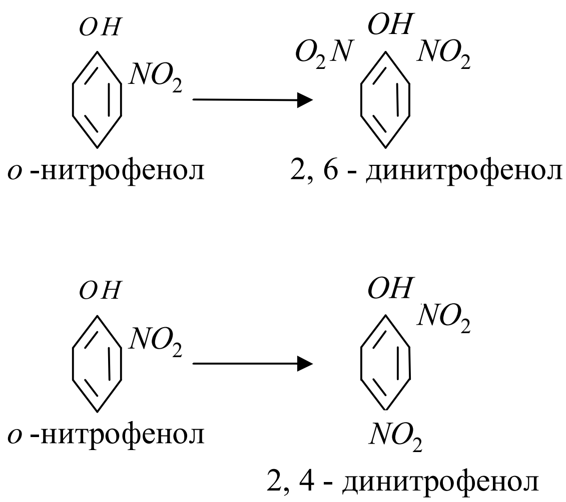
[где HNO_3 – азотная кислота, H_2SO_4 – серная кислота, H_2O – вода] на фенол образуется смесь o-(орто) и n-(пара) – нитрофенолов; это действие можно представить схемой (см. дополн. литер. [1]-[5] к §4):



Если же брать более концентрированную кислоту, например, вторую нитрующую смесь:

$$33\%\ HNO_3,\ 63\%\ H_2SO_4,\ 4\%\ H_2O,$$

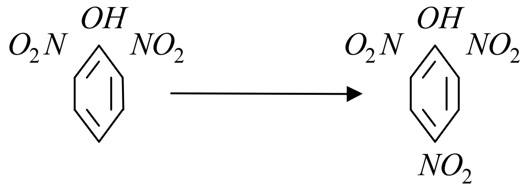
то можно получить динитрофенолы. Схема этого процесса имеет вид:



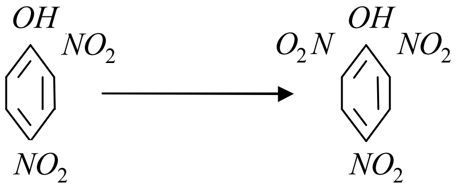
При дальнейшем нитровании получается конечный продукт реакции 2, 4, 6 - тринитрофенол пикриновая кислота, т.е. третья нитрующая смесь:

$$59\%\ HNO_3,\ 34\%\ H_2SO_4,\ 7\%\ H_2O;$$

нитрование представим схемой:



2, 6 - динитрофенол 2, 4, 6 - тринитрофенол



2, 4 - динитрофенол 2, 4, 6 - тринитрофенол

§4.2. Пример решения задачи о расчёте нитрующей смеси

Найти расход G_1 (кг) азотной кислоты, расход G_2 (кг) серной кислоты и расход G_3 (кг) воды для приготовления трех рассматриваемых нитрующих смесей соответственно в количествах $p_1 = 750$ кг, $p_2 = 820$ кг, $p_3 = 670$ кг.

Решение: Сначала построим систему уравнений. Процентное содержание α_{ij} $(i,\ j = 1,\ 2,\ 3)$ каждого компонента (кислот и воды) в 1 кг каждой из трёх приготавливаемых смесей нам задано. Расход j –го компонента для приготовления 1 кг i –той смеси равен

$$\alpha_{ij}x_j, \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ 3),$$

где x_j – неизвестная величина; расход G_j j – го компонента на приготовление трёх смесей равен сумме расходов j – той компоненты в каждой смеси:

$$(\alpha_{1j} + \alpha_{2j} + \alpha_{3j})x_j = G_j, \qquad (j = 1, 2, 3).$$

Расход всех компонент для приготовления i – той смеси должен быть равен заданному количеству p_i (кг) i – той смеси:

$$\alpha_{i1}x_1 + \alpha_{i2}x_2 + \alpha_{i3}x_3 = p_i, \qquad (i = 1, 2, 3).$$

Объединяя эти три уравнения, получаем систему 3-х уравнений с 3-мя неизвестными x_1, x_2, x_3. Решив полученную систему, затем находим расход кислот и воды.

Исходные данные для расчёта нитрующих смесей объединим в таблицу.

Номер смеси	HNO_3 (α_{i1} %)	H_2SO_4 (α_{i2} %)	H_2O (α_{i3} %)	Количество смеси (кг)
1	25	60	15	750
2	33	63	4	820
3	59	34	7	670

Расходу всех 3-х компонент для приготовления 750 кг первой нитрующей смеси соответствует уравнение

$$25x_1 + 60x_2 + 15x_3 = 750.$$

Расходу всех трёх компонент для приготовления всех трёх смесей соответствует система уравнений:

$$\begin{cases} 25x_1 + 60x_2 + 15x_3 = 750, \\ 33x_1 + 63x_2 + \ \ 4x_3 = 820, \\ 59x_1 + 34x_2 + \ \ 7x_3 = 670, \end{cases}$$

где x_1, x_2, x_3 - неизвестные. Решим полученную систему уравнений методом Гаусса. Для этого выпишем расширенную матрицу A системы вместе с контрольным столбцом:

$$A = \left(\begin{array}{ccc|c|c} 25 & 60 & 15 & 750 & 850 \\ 33 & 63 & 4 & 820 & 920 \\ 59 & 34 & 7 & 670 & 770 \end{array}\right).$$

С помощью элементарных преобразований матрицы A выполним прямой ход метода Гаусса. Сначала в матрице A поменяем местами 1 и 3 столбцы (это соответствует перенумерации неизвестных x_1 и x_3) и, опуская другие элементарные преобразования, находим, что матрица A эквивалентна следующей матрице треугольного вида:

$$A \sim \left(\begin{array}{ccc|c|c} 3 & 12 & 5 & 150 & 170 \\ 0 & 140 & 79 & 1860 & 2080 \\ 0 & 0 & 9300 & 50940 & 60240 \end{array}\right).$$

Полученной матрице соответствует система «треугольного» вида:

$$\begin{cases} 3x_3 \ + 12x_2 \ + 5x_1 \ = \ 150 \ , \qquad 170 \\ \qquad 141x_2 + 79x_1 = \ 1860 \ , \qquad 2080 \\ \qquad\qquad 9300x_1 = 40940; \qquad 60240. \end{cases}$$

Здесь справа записан контрольный столбец.

Выполним обратный ход метода Гаусса. В результате находим решение системы:

$$x_1 = 5.477419; \quad x_2 = 10.122581; \quad x_3 = 0.380644.$$

Проверку решения системы выполним 2-мя способами: 1) подстановкой величин x_i $(i = 1, 2, 3)$ в исходную систему уравнений; 2) решением новой системы уравнений с правой частью из контрольного столбца. Проверка по способу 1) показывает, что отличие левой части каждого уравнения от правой части этого уравнения (невязка, взятая по модулю) не превышает 10^{-5}. Проверка по способу 2) показывает, что отличие разности решений x_i исходной системы уравнений и решений $\tilde{x}_i$ вспомогательной системы уравнений (разность $x_i - \tilde{x}_i$ для каждого $i-$ го уравнения, $i = 1, 2, 3$) от числа -1 также меньше, чем 10^{-5}. Отметим, что по второму способу проверки решения разность должна равняться -1).

Искомый расход G_1 азотной кислоты, расход G_2 серной кислоты и расход G_3 воды составляют соответственно (кг):

$$G_1 = (25 + 33 + 59) \cdot 5,477419 = 640,858023,$$
$$G_2 = (60 + 63 + 34) \cdot 10,122581 = 1589,245217,$$
$$G_3 = (15 + 4 + 7) \cdot 0,380644 = 9,897888.$$

Отметим, что проверку вычислений желательно проводить и на завершающем этапе, после нахождения величин G_i расхода компонент. Для этого заметим, что расход (кг) всех компонент должен быть равен сумме количеств p_i (кг) всех нитрующих смесей: $G_1 + G_2 + G_3 = p_1 + p_2 + p_3$.

Подставляя в это равенство найденные значения величин G_i и заданные значения величин p_i $(i = 1, 2, 3)$, получаем: $2240,001128 \approx 2240$.

Значит абсолютная погрешность Δ в расчетах смесей не больше 0,0012 (кг), относительная погрешность δ % не больше 0,006%.

§4.3. Упражнения для самостоятельной работы

1. Найдите расход G_1 (кг) азотной кислоты, расход G_2 (кг) серной кислоты и расход G_3 (кг) воды для приготовления трех нитрующих смесей соответственно в количествах $p_1 = 740$ кг, $p_2 = 810$ кг, $p_3 = 690$ кг.

2.

Номер смеси	HNO_3 (α_{i1} %)	H_2SO_4 (α_{i2} %)	H_2O (α_{i3} %)	Количество смеси (кг)
1	22	59	19	740
2	31	61	8	810
3	55	36	9	690

3. Выполните расчёт трех нитрующих смесей соответственно в количествах $p_1 = 760$ кг, $p_2 = 840$ кг, $p_3 = 710$ кг. Исходные данные представим таблицей:

Номер смеси	HNO_3 (α_{i1} %)	H_2SO_4 (α_{i2} %)	H_2O (α_{i3} %)	Количество смеси (кг)
1	29	56	15	760
2	30	63	7	840
3	54	36	10	710

4. Проверьте, что определители систем для двух предыдущих упражнений (соответственно 1–го и 2–го) равны -27300, -19500.

5. Вычислите самостоятельно абсолютную и относительную погрешности нахождения решений для двух предыдущих упражнений.

6. Рассчитайте компоненты нитрующих смесей по данным следующей таблицы

Номер смеси	HNO_3 (α_{i1} %)	H_2SO_4 (α_{i2} %)	H_2O (α_{i3} %)	Количество смеси (кг)
1	33	55	12	770
2	31	63	6	840
3	55	35	10	750

.. Проверьте, что определитель основной матрицы системы уравнений (построенной по данным таблицы) равен -11200.

§4.4. Вопросы для самопроверки

1. Найдите процентное содержание кислот в примере 1 из **§4.1**.
2. Как определяется количество первой смеси (кг) во второй реакции примера 1?
3. Как составляется уравнение расхода всех компонент для приготовления 740 кг первой нитрующей смеси из примера 1?
4. Дайте определение абсолютной и относительной погрешностей для нахождения отдельного значения G_i, $(i = 1, 2, ..., n)$ системы.
5. В примере 1 расчёта трёх нитрующих смесей **§4.1** определитель системы уравнений равен отрицательному числу -31000. Вместе с тем, произведение диагональных элементов "треугольной" матрицы, полученной методом Гаусса, равно другому числу 11801700. Объясните, почему возникло такое отличие в значениях определителей?
6. Чему могут быть равны определители матриц систем уравнений, получаемых для расчёта нитрующих смесей?

7.А. Пусть для расчёта нитрующей смеси проведены три эксперимент и получена система трёх уравнений с тремя неизвестными в матричной форме $AX = B$, г де матрица A, столбец неизвестных X и правый столбец B таковы:

$$A = \begin{pmatrix} 30\ 39\ 72 \\ 22\ 39\ 54 \\ 14\ \ 19\ 37 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 870 \\ 580 \\ 530 \end{pmatrix}.$$

Решите систему по правилу Крамера и найдите расход компонент – кислот G_1, G_2 и воды G_1. Проверьте, что: а) определитель матрицы A $\det(A) = 1032$; в) определитель матрицы A_3 $\det(A_3) = 40080$ и матрица $A_3 = \begin{pmatrix} 30\ 39\ 870 \\ 22\ 39\ 580 \\ 14\ \ 19\ 530 \end{pmatrix}$, соответствующая x_3;

с) решение системы – столбец неизвестных X таков: $X = 10^2 \begin{pmatrix} -0.5113 \\ -0.1006 \\ 0.3884 \end{pmatrix}$.

7.В. Могут ли величины, характеризующие расход компонент в рассматриваемых трёх экспериментах, принимать отрицательные значения? Нет ли больших погрешностей в измерениях соответствующих экспериментов?

ЛИТЕРАТУРА

1. Ермакова В. Д. Методические указания по курсу "Линейная алгебра" для студентов первого курса химического факультета / В. Д. Ермакова, В. А. Резуненко, П. К. Шпилевой. – Харьков : ХГУ, 1986.
2. Резуненко В. А. Основы высшей математики. Линейная алгебра. Часть 1. – Методические указания к лекционным и практическим заданиям для студентов первого курса химического факультета / В. А Резуненко. – ХНУ имени В. Н. Каразина, 2006.
3. Бабенко К. И. Основы численного анализа / К. И. Бабенко. – М. : Наука, Главная редакция ФМЛ, 1986.
4. Батунер Л. М. Математические методы в химической технике / Л. М. Батунер, М. Е. Позин.– Л. : Химия, 1968.
5. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц / Ф. Р. Гантмахер. – М. : Наука, 1967.
6. Годунов С. К. Решение систем линейных уравнений / С. К. Годунов. – Новосибирск : Наука, Сиб. отделение, 1980.
7. Ефимов А. В. Сборник задач по математике. Линейная алгебра и основы математического анализа для вузов / А. В. Ефимов, Б. П. Демидович. – М. : Наука, 1981.
8. Жалдак М. І. Чисельні методи математики / М. І. Жалдак, Ю. С. Рамський. – Київ: Радянська школа, 1984.
9. Ильин В. А. Линейная алгебра /В .А. Ильин, Э. Г. Позняк. – М. : Наука, 1974.
10. Кострыкин А. И. Введение в алгебру / А. И. Кострыкин. – М .: Наука, 1977.
11. Крылов В. Н. Вычислительные методы. Т. 1, Т. 2 / В. Н Крылов, В. В. Бобков, П. П. Монастырский. – М. : Наука, 1976.
12. Курош А. Г. Курс высшей алгебры / А. Г. Курош. – М. : Наука, 1968.
13. Окунев Л. Я. Высшая алгебра / Л. Я. Окунев. – М. : Просвещение, 1966.
14. Проскуряков И. В. Сборник задач по линейной алгебре / И. В. Проскуряков. – М : Наука, 1984.
15. Рублёв А. И. Курс линейной алгебры и аналитической геометрии / А. И. Рублёв.– М. : Высшая школа, 1972.
16. Сикорский В. П. Математический аппарат инженера / В. П. Сикорский. – Киев: Техника, 1975.
17. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы / Л. Хейгеман, Д. Янг. – М. : Мир, 1986.

18. Фадеев Д. К. Сборник задач по высшей алгебре / Д. К. Фадеев, И. С. Соминский. – М. : Наука, 1964.
19. Шилов Г. Е. Математический анализ. Конечномерные линейные пространства / Г.Е. Шилов. – М. : Наука, 1969.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА К § 3

1. Перьков И. Г. Одновременное спектрофотометрическое определение никеля, меди и марганца в сталях 1-(2-пиридилазо)-2-нафталом / И. Г. Перьков, А. В. Дрозд. – М. : Ж. аналит. химии, 1982, т. 37, №10.
2. Бернштейн И. Я. Спектрофотометрический анализ в органической химии. / И. Я. Бернштейн, Ю. Л. Каминский. – М : Химия, 1975.
3. Комарь Н. П. Особенности и возможности колориметрического и спектрофотометрического анализа. Труды комиссии по аналитической химии. Т VII. (XI) / Н. П. Комарь. – М. : Изд. АН СССР, 1958.
4. Ландсберг Г. С. Оптика / Г. С. Ландсберг.– М. – Л. : Гостехиздат, 1947.
5. Практикум по физической химии / Под ред. Буданова В. В. и Воробьёва Н. К. – М. : Химия, 1986.
6. Vierordt K. Die Anvendung des Spectralapparates zur Photometrie der Absorptionsspectren und zur quantitative chemicshen Analyse / K. Vierordt - H. Laupp. Tubingen, 1873.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА К § 4

1. Алексеев В. Н. Количественный анализ / В. Н. Алексеев. – М. : Химия, 1972.
2. Лузанов А. В. Теоретическая химия. 1. Физические основы / А. В. Лузанов. – Харьков : ХГУ, 1991
3. Петров А. А. Органическая химия / А. А. Петров, Х. В. Бальян. – М. : Высшая школа, 1981.
4. Радионов В. М. Лабораторное руководство по химии промежуточных продуктов и красителей / В. М. Радионов, Б. М. Богословский, А. М. Фёдорова.– М. – Л. : ГНТИ химической литературы, 1948.
5. Степанова И. Ф. Методы линейной алгебры в физической химии / И. Ф. Степанова, М. Е. Ерлыкин, Г. Г. Филиппов.– М. : МГУ, 1976.

Навчальне видання

Резуненко Вячеслав Олексійович

Основи вищої математики. Лінійна алгебра
Частина друга

Навчально-методичний посібник
для студентів першого курсу хімічного факультету

(Рос. мовою)

Коректор *Л. Є. Стешенко*
Комп'ютерна верстка *В. О. Резуненко*
Макет обкладинки *І. М. Дончик*

Формат 60×84/16. Умов. друк. арк. 2,2. Наклад 50 прим.
Видавець і виготовлювач Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

61077, Харків, пл. Свободи, 4, Видавництво. Тел. 705–24–32.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.2009