

**Библиотека численных методов StudLib
для PascalABC.Net 3.2**

Ростов-на-Дону
2017

Описывается состав и даются рекомендации по использованию библиотеки численных методов StudLib, реализованной в среде программирования PascalABC.NET 3.2.

Для школьников старших классов, учащихся колледжей и студентов младших курсов вузов.

Оглавление

1. Введение.....	5
2. Система тестирования StudLibTest.....	6
3. Общая информация.....	7
3.1. Точность представления чисел типа real	7
4. Описание программ.....	9
4.1. Нахождение корней нелинейных уравнений	9
4.1.1. Изоляция корней уравнения $y(x)=0$ на заданном интервале табличным методом (RootsIsolation).....	10
4.1.2. Нахождение действительного нуля функции на интервале изоляции (ZeroIn).....	12
4.2. Статистическая обработка данных, заданных в табличном виде	13
4.3. Интерполяция, дифференцирование и аппроксимация данных, заданных в табличном виде	14
4.3.1. Интерполяция табличной функции кубическим сплайном (класс Spline)	14
4.4. Полиномы с действительными коэффициентами.....	16
4.4.1. Описание класса <i>Polynom</i>	16
4.4.2. Полиномиальная арифметика	18
4.4.3. Корни полиномов. Операции с полиномами. Полиномиальная аппроксимация.....	19
4.4.3.1. Нахождение всех корней полинома с действительными коэффициентами методом Ньютона – Рафсона(<i>PolRt</i>)	19
4.4.3.2. Разложение полинома на рациональные линейные множители (<i>Factors</i>)	20
4.4.4. Специальные полиномы	21
4.5. Линейная алгебра (операции с векторами и матрицами, решение систем линейных уравнений)	22
4.6. Решение систем дифференциальных уравнений	23
4.7. Вычисление определенных интегралов	24
4.7.1. Адаптивная квадратурная программа <i>Quanc8</i>	25
4.8. Поиск минимума функций	28
4.9. Задачи оптимизации	29
Литература.....	30

1. Введение

StudLib – свободно распространяемая библиотека (далее – пакет) программ, реализованная в системе программирования PascalABC.NET 3.2 и поставляющаяся вместе с ней в исходном коде (файл StudLib.pas). Для работы с пакетом модуль StudLib.pas следует загрузить и откомпилировать.

В пакете находятся программы, реализующие различные численные методы, а также вспомогательные программы, сопутствующие типы данных и отдельные классы.

С помощью пакета StudLib можно решать задачи из следующих областей:

- нахождение корней нелинейных уравнений;
- статистическая обработка данных, заданных в табличном виде;
- интерполяция, дифференцирование и аппроксимация данных, заданных в табличном виде;
- операции с полиномами;
- линейная алгебра (операции с векторами и матрицами, решение систем линейных уравнений);
- решение систем дифференциальных уравнений;
- вычисление определенных интегралов;
- поиск минимума функций одного и многих переменных;
- задачи оптимизации.

Часть программ переведена в паскаль на уровне исходного текста из существующих пакетов прикладных программ, таких как SSPLIB (на языке Фортран) или опубликованных в литературе. В этом случае подробная ссылка на источник приведена в тексте программы. Другая часть написана автором на основе алгоритмов, приведенных в различных источниках и в этом случае ссылка на источник также дается в тексте программы.

2. Система тестирования StudLibTest

После установки или обновления PascalABC.NET 3.2 рекомендуется выполнить тестирование пакета при помощи модуля StudLibTest.pas.

Тестирование заключается в решении ряда контрольных заданий и сличении полученных результатов с эталонами. Проведение тестирования является хорошим подтверждением работоспособности установленной версии.

Каждый модуль пакета тестируется на наборе тестовых примеров и при непрохождении теста с помощью Assert выдается сообщение с указанием полученных и ожидаемых результатов, позволяющее локализовать место ошибки. Несмотря на то, что весь пакет тщательно тестируется, допускается возможность непрохождения тестов в программах, использующих случайные числа. В таких случаях полезно попытаться выполнить тестирование несколько раз, чтобы убедиться в наличии четкой ошибки.

В ходе тестирования по мере прохождения тестов программных единиц на монитор выводится протокол.

Набор тестовых заданий содержит достаточное количество примеров, ознакомление с которыми может оказаться полезным для лучшего понимания работы с пакетом.

3. Общая информация

3.1. Точность представления чисел типа real

В PascalABC.NET тип `real` базируется на представлении данных `System.Double` платформы Microsoft .NET. Данное типа `real` занимает 8 байт при длине мантиссы 52 разряда, что обеспечивает точность не более 17 десятичных знаков.

PascalABC.NET предоставляет несколько констант платформы .NET, связанных с типом `real`:

- `real.MinValue` - минимальное значение, примерно равное `-1.7976931348623157E+308`;
- `real.MaxValue` - максимальное значение, примерно равное `1.7976931348623157E+308`;
- `real.Epsilon` - минимальное положительное число, отличное от нуля («машинная точность»), которое выводится с несколько странным значением `4.94065645841247E-324` (к этому мы еще вернемся ниже);
- `NaN` – «*Not a Number*» («не число»), возникает при делении `0/0`, вычислении функций с недопустимыми аргументами и т.п. Возникнув, имеет тенденцию распространяться на всю правую часть оператора присваивания, в связи с чем при программировании рекомендуется принимать меры к изоляции `NaN` при помощи проверки `IsNaN(x)`, возвращающей `true` для `x=NaN`;
- `real.NegativeInfinity` – «отрицательная бесконечность», возникающая при делении отрицательной величины на ноль. Проверяется при помощи `IsNegativeInfinity(x)`;
- `real.PositiveInfinity` - «положительная бесконечность», возникающая при делении положительной величины на ноль. Проверяется при помощи `IsPositiveInfinity(x)`.

Когда знак бесконечности не имеет значения, можно воспользоваться проверкой `IsInfinity(x)`.

Вернемся к рассмотрению машинной точности. Практическое использование константы `real.Epsilon` приводит к «удивительным» (в нехорошем смысле этого слова) результатам, чем и объясняется решение отказаться использования этой константы при написании пакета `StudLib`.

В [1] предлагается считать точностью (машинным эпсилоном) такую минимальную величину ε , для которой $1 + \varepsilon > 1$

При попытке воспользоваться `real.Epsilon` были получены совершенно неудовлетворительные результаты, в частности,

$$1.0 + \text{real.Epsilon} = 1.0 + \text{real.Epsilon} * 1e100$$

Понятно, что это делает невозможными сравнения точности с величинами $\varepsilon, 2\varepsilon, \dots, 1000\varepsilon$ и т.д, поэтому в программах машинная точность определяется следующим образом:

```
var eps:=1.0;  
while eps+1.0>1.0 do eps *=0.5;
```

В этом случае найденная машинная точность оказалась равной $1.11022302462516\text{e-}16$ ($7\text{FFFFFFFFFFFFF}_{16}$), что и ожидалось.

4. Описание программ

4.1. Нахождение корней нелинейных уравнений

Пусть задана некоторая функция $y=F(x)$. Требуется отыскать одно или более значений x , для которых $F(x)=0$. В этом случае все такие x будут называться корнями уравнения $F(x)=0$.

Теория утверждает, что если $x \in [a;b]$ и функция $F(x)$ на интервале $[a;b]$ меняет знак ровно один раз, то внутри этого интервала найдется отрезок $[\alpha;\beta]$ длины, не превышающей некоторого значения, на котором $F(x)$ также меняет знак и с точностью этот интервал можно считать корнем уравнения $F(x)=0$. Отрезок $[a;b]$ называется интервалом изоляции корня и далее предполагается, что $F(a)$ и $F(b)$ имеют разные знаки, либо $F(a) = 0, F(b) \neq 0$, либо $F(a) \neq 0, F(b) = 0$.

Почему вместо точного значения корня уравнения мы говорим о некотором интервале $[\alpha;\beta]$ с длиной, не превышающей заданную точность ε ? Все дело в дискретности (и вытекающей из этого точности) представления чисел типа `real`.

Решение задачи на практике состоит из нескольких шагов. На первом шаге определяются интервалы изоляции корней уравнения, а на последующих для каждого интервала изоляции с заданной точностью вычисляется очередной корень.

Одним из самых простых и надежных приемов отделения корня является табличный метод. Для совокупности равноотстоящих точек на оси x вычисляются значения $y(x)$ до тех пор, пока не будет выявлен интервал изоляции.

Другой способ отделения корней основан на методе Монте-Карло. На некотором «разумном» интервале случайным образом заданных значений x вычисляются значения функции $y(x)$ и запоминаются те точки x_0 , в которых значение $y(x_0)$ наиболее близко к нулю. Затем делается шаг, например, в сторону уменьшения x , т.е.

полагаем $x_1 = x_0 - h$, и если значение функции $y(x_1)$ также уменьшается, делается следующий шаг в этом же направлении, пока функция не изменит знак. Если при первоначальном шаге функция увеличila значение, то делаем шаг удвоенной длины в обратном направлении, приходя в точку $x_1 = x_0 + h$ и ведем поиск в новом направлении. Это способ, несмотря на большую, чем предыдущий сложность, в некоторых случаях может быстрее приводить к нужному результату.

4.1.1. Изоляция корней уравнения $y(x)=0$ на заданном интервале табличным методом (RootsIsolation)

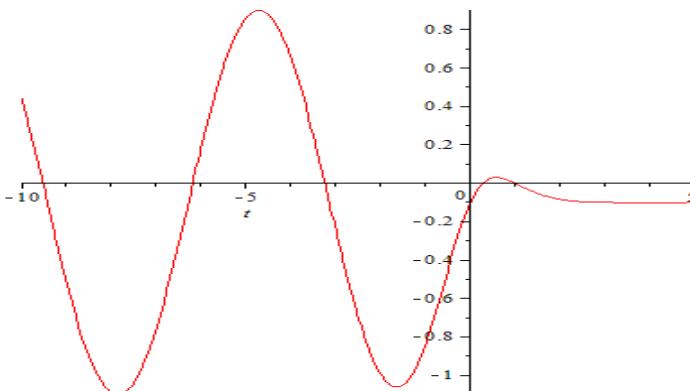
Может применяться для получения интервалов изоляции произвольного количества корней произвольной функции одной переменной. Заданный интервал просмотра $[a;b]$ последовательно просматривается с шагом h . Если корень уравнения попадает на границу интервала b , интервал изоляции выбирается равным $[b-h/2;b+h/2]$. Правильный выбор шага h имеет важное значение.

Рассмотрим пример нахождения интервалов изоляции уравнения, график которого представлен далее.

$$\frac{\sin(t)}{1 + (e^t)^2} - 1 = 0$$

Конечно, если имеется график, интервалы изоляции можно оценить по нему. Но в данном случае график представлен чтобы показать, как выбор слишком большого шага h приводит к ошибкам в решении.

Как видно из графика, при отрицательных значениях аргумента корни отстоят друг от друга примерно на 3, а при положительных - меньше чем на 1. Следовательно, разумно будет выбрать шаг $h < 1$, например, 0.5.



Пусть интервал поиска корней составит $[-10; 5]$.

```
var f:real->real:=t->sin(t)/(1+Sqr(Exp(t)))-0.1;
var (a,b,h):=(-10,5,0.5);
Writeln(RootsIsolation(f,a,b,h));
```

Получаем решение:

$[-10, -9.5], [-6.5, -6], [-3.5, -3], [0, 0.5], [1, 1.5]$

Это правильный результат, потому что корни уравнения приблизительно равны $-9.52495, -6.18307, -3.24191, 0.27789, 1.00272$.

Попробуем задать шаг, который будет в данных условиях неприемлемым, например $h=2$.

Получаем решение:

$[-10, -8], [-8, -6], [-4, -2]$ и мы потеряли два интервала изоляции.

Наконец, совсем большой шаг $h=6$ приводит к еще более катастрофическим результатам: $[-4, 2]$ – мы теряем четыре из пяти интервалов изоляции.

4.1.2. Нахождение действительного нуля функции на интервале изоляции (Zeroin)

Zeroin – один из лучших имеющихся машинных алгоритмов, сочетающих безотказность бисекции с асимптотической скоростью метода секущих для случая гладких функций [1]. В пакет включена функция Zeroin, переведенная с форTRANа в систему программирования PascalABC.NET 3.2.

Предполагается без проверки, что интервал изоляции корня определен, в противном случае пользоваться Zeroin некорректно.

Типичное обращение имеет вид:

```
var root:=Zeroin(a,b,f,tol);
```

Здесь a, b – интервал изоляции корня [a;b] функции f(x), a tol – величина интервала неопределенности решения.

Рассмотрим пример решения уравнения

$$f(x) = x^3 - 2x - 5 = 0$$

x	-1	0	1	2	3	4
f(x)	-4	-5	-6	-1	16	51

Интервал изоляции корня находится на отрезке [2;3]. Значение tol положим равным 10^{-12} .

```
var f:real->real:=x->x*(x*x-2)-5;
```

```
var root:=Zeroin(2,3,f,1e-12);
```

Полная программа решения этого уравнения может выглядеть так:

```
uses StudLib;
```

```
begin
```

```
Writeln(Zeroin(2,3,x->x*(x*x-2)-5,1e-12));
```

```
end.
```

4.2. Статистическая обработка данных, заданных в табличном виде

4.3. Интерполяция, дифференцирование и аппроксимация данных, заданных в табличном виде

4.3.1. Интерполяция табличной функции кубическим сплайном (класс Spline)

Задача одномерной интерполяции набора n точек $P(x,y)$ с вещественными координатами сводится к построению некоторой функции $F(x)$, для которой $F(x_i) = y_i$ для всех n точек и при этом в промежутках между точками функция принимает некие «разумные значения» [1].

Считается, что если функция $F(x)$ гладкая и вычисленные по ней значения не превышают допустимой ошибки, задача имеет удовлетворительное решение.

Если набор точек $P(x,y)$ не зашумлен ошибками, то интерполяция гладкой функцией уместна. В противном случае используются приёмы, нейтрализующие шум.

Конечно, можно попытаться провести через n точек полином степени $n-1$, но теория доказывает, что практически это оказывается очень плохим решением для $n>10$.

Математики обожают, когда функция может быть дважды дифференцируема и при этом не выродится в ноль или иную константу, поэтому минимальная степень интерполяционного полинома равна трем и он будет проходить через четыре исходные точки. Кубический полином – это самая гладкая функция, обладающая необходимыми для интерполяции свойствами. Но точек-то обычно куда больше, чем четыре...

С другой стороны, с древних времен известен чертежный инструмент, называемый лекало. Он позволяет гладко соединить множество точек, нанесенных на плоскость. Суть используемого приема в том, чтобы соединять точки линией по две-три, постепенно перемещая лекало вдоль заданных точек. Немецкие чертежники в

особо важных случаях вместо лекал использовали тонкие металлические рейки, называемые «сплайн».

«Скользящие» кубические полиномы также получили название кубических сплайн-функций или просто сплайнов.

Поскольку сплайн – это кубический полином, т.е.

$$y = F(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d,$$

$$y' = F'(x) = 3ax^2 + 2bx + c, \quad y'' = F''(x) = 6ax + 2b,$$

то можно легко найти первую и вторую производную от таблично заданной функции.

В пакете имеется класс *Spline*, позволяющий выполнить интерполяцию кубическим сплайном. Он является результатом переработки фортран-программ SPLINE и SEVAL [1].

Вспомогательный класс *Point* реализует точку с координатами x,y типа real. Класс *Spline* в своем свойстве P хранит вектор координат исходных точек (узлов интерполяции) класса *Point*.

Можно рекомендовать следующий порядок проведения интерполяции

- создать вектор исходных точек, например, следующим образом:

```
var f:=x->(3*x-8)/(8*x-4.1);
```

```
var pt:=Partition(1.0,10.0,18).Select(x->new Point(x,f(x))).ToArray;
```

- создать объект класса *Spline*, при этом конструктор автоматически вызовет метод MakeSpline, вычисляющий коэффициенты сплайна:

```
var Sp:=new Spline(pt);
```

- для получения значения сплайна в нужной точке x использовать метод Value:

```
var r:=Sp.Value(x);
```

Метод Diff возвращает кортеж из первой и второй производных в указанной точке:

```
var (d1,d2):=Sp.Diff(x);
```

4.4. Полиномы с действительными кэффициентами

4.4.1. Описание класса *Polynom*

Обычно полином $u(x)$ принято записывать в порядке убывания степеней, т.е. в виде $u(x) = u_nx^n + \dots + u_1x + u_0$

В то же время, большинство алгоритмов для работы с полиномами используют обратный порядок записи – в порядке возрастания степеней: $u(x) = u_0 + u_1x + \dots + u_nx^n$

Именно такой порядок следования коэффициентов полинома используется, например, в пакетах программ SSPLIB фирмы IBM [2] и IMSL фирмы Rogue Software [3]. Исходя из изложенного выше, было принято использовать такой же порядок следования и в пакете StudLib.

Полиномы реализованы в виде класса *Polynom*, имеющего два свойства:

a – динамический массив типа *real* с коэффициентами полинома, расположенными в порядке возрастания степени;
n – количество членов полинома.

Для создания полинома используются две формы вызова конструктора класса.

Вызов вида *new Polynom(k)* создает полином с *k* членами (т.е. степени *k*-1) и все коэффициенты полинома устанавливает в значение 0.0.

Вызов *new Polynom(a₀, a₁, … a_m)* создаст полином с указанными значениями коэффициентов. Вместо списка коэффициентов можно указать динамический массив типа *real* (примеры в 4.4.2).

Перечислим методы класса *Polynom*:

Value(x) – возвращает значение полинома для аргумента *x*;

Copy – создает копию объекта класса *Polynom*;

PDif – возвращает коэффициенты полинома, полученного дифференцированием исходного;

PInt – возвращает коэффициенты полинома, полученного при взятии неопределенного интеграла от исходного;

Print, Println – выводят на монитор коэффициенты полинома в строку через пробел. Println затем обеспечивает перевод вывода на новую строку;

Print(c), Println(c) – вместо пробела используется разделитель с.

Примеры работы с классом *Polynom*

$$1. p(x) = 4x^3 + 6.5x^2 - 18$$

```
var p:=new Polynom(-18, 0, 6.5, 4);
```

$$2. \text{Вычислить для } x=-7.16 \text{ значение } u(x) = x^5 + 3.8x^2 - 6x + 2$$

```
var u:=(new Polynom(2, -6, 0, 3.8, 0, 1)).Value(-7.16);
```

$$3. \text{Поместить в } p(x) \text{ полином } q(x)$$

```
var p:=q.Copy;
```

$$4. \text{Для } t(x) = -2x^4 - 3x^3 + 12x^2 - 7x + 1 \text{ получить}$$

$$p(x) = \int t(x) dx, \quad q(x) = t'(x)$$

```
var t:=new Polynom(1, -7, 12, -3, -2);
```

```
var (p,q):=(t.PInt, t.PDif);
```

```
p.Println; q.Println;
```

Будет получен результат

0 1 -3.5 4 -0.75 -0.4

-7 24 -9 -8

Представим результаты в виде полиномов:

$$p(x) = -0.4x^5 - 0.75x^4 + 4x^3 - 3.5x^2 + x + C,$$

$$q(x) = -8x^3 - 9x^2 + 24x - 7$$

4.4.2. Полиномиальная арифметика

К полиномиальной арифметике отнесены операции сложения, вычитания, умножения и деления полиномов.

Для сложения, вычитания и умножения полиномов, а также для случая, когда один из операндов является константой, соответствующие арифметические операции для класса *Polynom* перегружены, что позволяет записывать арифметические выражения в привычном виде. Перегружены также унарный минус и операция «==».

Пример:

```
var a:=new Polynom(6.5,-4,2.12,1);
var b:=new Polynom(3,0,-3.8);
var c:=new Polynom(ArrGen(5,i->i*i+1.0));
(-c +(a-2*b)*a+11.5*(1-b)).Println;
```

Деление полиномов выполняется посредством расширения *DivMod*, возвращающего кортеж из двух полиномов – частного и остатка. Вычислим следующее выражение:

$$\frac{2x^6 - x^5 + 12x^3 - 72x^2 + 3}{x^3 + 2x^2 - 1}$$

```
var p:=new Polynom(3,0,-72,12,0,-1,2);
var q:=new Polynom(-1,0,2,1);
var (a,b):=p.DivMod(q);
a.Println; b.Println;
```

Будет получен ответ

-6 10 -5 2 – частное (полином a)

-3 10 -65 – остаток (полином b)

Решение выглядит следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{2x^6 - x^5 + 12x^3 - 72x^2 + 3}{x^3 + 2x^2 - 1} &= \\ 2x^3 - 5x^2 + 10x - 6 + \frac{-65x^2 + 10x - 3}{x^3 + 2x^2 - 1} & \end{aligned}$$

4.4.3. Корни полиномов. Операции с полиномами. Полиномиальная аппроксимация.

Из основной теоремы алгебры следует, что если полином $u(x)$ имеет степень n , то уравнение $u(x)=0$ имеет ровно n корней, среди которых могут быть как действительные корни, так и пары комплексно-сопряженных. Существует достаточно обширное количество алгоритмов нахождения корней полиномов. Одним из реализаций таких алгоритмов служим метод Ньютона-Рафсона.

4.4.3.1. Нахождение всех корней полинома с действительными коэффициентами методом Ньютона – Рафсона (PolRt)

Функция PolRt является переработкой кода фортрановской подпрограммы DPOLRT [2]. Не рекомендуется использовать её при степени полинома $n > 36$ из-за ошибок округления, возникающих в машинной арифметике с плавающей точкой. Метод Ньютона-Рафсона – это другое название итерационного метода, который хорошо известен, как «метод касательных».

Типовой вызов функции

```
var ierr:integer;  
var p:=new Polynom(коэффициенты по возрастанию степени)  
var roots:=PolRt(p,ierr);
```

Функция возвращает динамический массив типа complex. Значение флага ierr служит для оценки результатов решения:

- 0 – ошибок не найдено;
- 1 – недостаточно элементов для построения полинома;
- 2 – степень полинома превышает 36;
- 3 – не удалось достигнуть приемлемой точности за 500 шагов;
- 4 – коэффициент при старшей степени полинома нулевой.

Пример

$$x^5 - 5x^4 - 38x^3 + 294x^2 - 283x - 609 = 0$$

```
var ier:integer;
var p:=new Polynom(-609,-283,294,-38,-5,1);
var r:=PolRt(p,ier);
r.Println;
```

Получен результат $(-1,0) (3,0) (-7,0) (5,-2) (5,2)$, найдены все пять корней уравнения: $-1, 3, -7, 5-2i, 5+2i$.

Функцию PolRt можно использовать для разложения полинома на множители, приравняв его нулю. В данном случае полином может быть представлен в виде

$$(x + 1)(x - 3)(x + 7)(x - 5 - 2i)(x - 5 + 2i)$$

Если комплексные числа в представлении недопустимы, достаточно попарно перемножить элементы, содержащие комплексно-сопряженные корни и помня, что $i^2 = -1$:

$$(x + 1)(x - 3)(x + 7)(x^2 - 10x + 29)$$

4.4.3.2. Разложение полинома на рациональные линейные множители (Factors)

4.4.4. Специальные полиномы

4.5. Линейная алгебра (операции с векторами и матрицами, решение систем линейных уравнений)

4.6. Решение систем дифференциальных уравнений

4.7. Вычисление определенных интегралов

Известно большое количество машинных алгоритмов, реализующих численное вычисление определенных интегралов. Выбор алгоритма существенно зависит от того, как представлены исходные данные.

Пусть требуется найти численное значение некоторого интеграла, определенного на заданном отрезке, т.е.

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Далее предполагается, что либо значения $f(x)$ заданы на интервале $[a;b]$ множеством точек $y_i=f(x_i)$, либо имеется некоторое аналитическое выражение $f(x)$, позволяющее вычислять значения для $x \in [a;b]$.

Можно представить значение интеграла I суммой интегралов на каждом из подинтервалов, образованных парой соседних точек x

$$I = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

«Интегральчик», вычисляемый на отрезке $[x_i; x_{i+1}]$, называется квадратурой. Когда-то его предлагалось считать, как площадь прямоугольника со сторонами длиной $x_{i+1}-x_i$ и $y_i=(f(x_{i+1})+f(x_i))/2$ – это и есть основа квадратурной формулы прямоугольников. Затем появились квадратурные формулы трапеций, криволинейных трапеций (формула Симпсона), её развитие – формула Ромберга и т.д.

Имеется также метод, при котором значения функции интерполируются сплайнами, а поскольку сплайн – это кубический полином, аналитическое выражение интеграла от такой функции хорошо известно. К сожалению, сплайн-интерполяция не всегда позволяет получить результаты с нужной точностью.

Сочетание высокой точности и большой скорости вычисления квадратуры дают аддитивные программы, подбирающие комби-

нацию величины интервалов разбиения исходного отрезка и варианта квадратурной формулы так, чтобы обеспечивать необходимую точность.

4.7.1. Адаптивная квадратурная программа Quanc8

В пакет входит функция Quanc8, полученная переработкой для PascalABC.NET 3.2 форTRANовской подпрограммы QUANC8 [1].

Функция использует следующий набор переменных:

f – интегрируемая функция;

a, b - границы интервала интегрирования;

$abserr$ - заданная предельная абсолютная ошибка;

$relerr$ - заданная предельная относительная ошибка;

Quanc8 возвращает кортеж из четырех элементов:

[0] - результат интегрирования (res)

[1] - оценка абсолютной ошибки результата (errest)

[2] - индикатор надежности (flag)

[3] - число точек, в которых вычислялась функция (nofun)

Если flag ненулевой, но мал, результат еще можно принять, если велик, то программа непригодна для вычисления данной функции.

Значение flag имеет вид XXX.YYY, где XXX - количество подинтервалов длины $(b-a)/2^{30}$ с недопустимо большой ошибкой вычисления, 0,YYY - часть необработанного основного интервала.

В качестве иллюстрации работы с Quanc8 найдем значение интегрального синуса на $[0;2]$

$$Si(2) = \int_0^2 \frac{\sin x}{x} dx$$

```
var f:real->real:=x->x=0?1.0:sin(x)/x;
```

```
var r:=Quanc8(f,0,2,1e-7,0);
```

```
Writeln(r);
```

Результат: (1.60541297680269,1.13735457459156E-16,0,33)

Прежде всего проверяем flag – его значение равно нулю, следовательно требуемая точность достигнута. Мы запрашивали точность 10^{-7} , но получили оценку порядка 1.137×10^{-16} , т.е. в пределах машинной точности. Это отлично. Значение 1.60541297680269 – результат, в котором, по-видимому, все цифры верны. И для такой точности понадобилось всего 33 итерации. Отметим, что в данном случае указание точности роли не играет: можно задать даже `abserr=relerr=1.0`, а результат будет тот же!

Так Quanc8 ведет себя потому, что функция «хорошая» для взятого алгоритма. Если заменить $\sin x$ на $\operatorname{tg} x$, функция $f(x)$ будет иметь особенность в окрестности точки $x=\pi/2 \approx 1.5708$ и это создаст проблему. Величина flag станет недопустимо большой для того, чтобы принять результат. Справедливости ради следует отметить, что такую квадратуру не смогли вычислить и другие машинные программы.

```
var f:real->real:=x->x=0?1.0:tan(x)/x;
```

Интересно, что в [1] рассматривается поведение Quanc8 при вычислении квадратуры функции $y=\operatorname{tg}(x)/x$ на интервале $[0;2]$ и приводится решение, в котором $\text{flag}=91.2$ с последующей оценкой участка интервала, где выявлена особенность. Но получить это значение в PascalABC.NET не удается. Более того, если приведенную в [1] программу перевести на работу с двойной точностью (`REAL*8`), она выдает такой же результат, как и программа в Паскале ($\text{flag}=30$). Причина оказалась в точности представления коэффициентов формулы Ньютона-Котеса восьмого порядка, которая заложена в основу Quanc8. Достаточно их вычислить с использованием 32-битной арифметики и получается решение, совпадающее с приведенным в [1].

PascalABC.NET 3.2 использует единственный вещественный тип `real`, которому в классах платформы .NET соответствует `System.Double`, реализующий 64-битную арифметику. Для работы с

32-битной арифметикой в PascalABC.NET можно использовать класс `System.Single`.

В Quance8 используются следующие константы формул Ньютона-Котеса

$$\frac{3956}{14175}, \frac{23552}{14175}, -\frac{3712}{14175}, \frac{41984}{14175}, -\frac{18160}{14175}$$

При желании вычислить их с 32-битной точностью (аналог `REAL*4` в Fortran) можно использовать следующую запись
`var w0:=System.single(3956.0)/System.single(14175.0);`

4.8. Поиск минимума функций

4.9. Задачи оптимизации

Литература

1. Дж.Форсайт, М.Мальколм, К.Моулер. Машины методы математических вычислений. Пер. с англ. – М.: Мир, 1980.
2. System/360 Scientific Subroutine Package (360A-CM-03X) Programmer's Manual: IBM, Technical Publication Department, 112 East Post Road, White Plains, , N.Y. 10601
3. IMSL® Fortran Math Library. Version 7.1.0. Rogue Wave Software, Inc. 5500:Flatiron Parkway, Boulder, CO 80301 USA
4. Мудров А.Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль. – Томск: МП «РАСКО», 1991.
5. Шуп Т. Решение инженерных задач на ЭВМ: Практическое руководство. Пер. с англ. – М.: Мир, 1982.