

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

С. П. Дударов, П. Л. Папаев

**Использование численных методов
в табличном процессоре Microsoft Excel**

Лабораторный практикум

Утверждено Редакционным
советом университета
в качестве учебного пособия

Москва

2013

УДК 519.6:004.42
ББК 32.81:22.18
Д81

Рецензенты:

Кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой
Московского городского педагогического университета
В. Л. Симонов

Кандидат технических наук, доцент
Российского химико-технологического университета
имени Д. И. Менделеева
А. В. Кознов

Дударов С. П.

Д81 Использование численных методов в табличном процессоре
Microsoft Excel. Лабораторный практикум: учеб. пособие/ С. П. Дударов,
П. Л. Папаев. – М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2013. – 116 с.
ISBN 978-5-7237-1083-2

Представлены теоретические и практические материалы по численным методам для лабораторных работ, выполняемых с использованием вычислительных и графических возможностей табличного процессора Microsoft Excel. Рассматривается реализация алгоритмов решения нелинейных алгебраических уравнений, систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений, дифференциальных уравнений, численного расчета определенных интегралов, оптимизации функций одной и нескольких переменных, интерполирования и аппроксимации. Приведены примеры оформления хода решения задач вычислительной математики в табличной форме и графической интерпретации получаемых результатов.

Рекомендуется студентам, обучающимся по направлениям подготовки бакалавров «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профилю «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика») и «Информационные системы и технологии».

УДК 519.6:004.42
ББК 32.81:22.18

ISBN 978-5-7237-1083-2

© Российский химико-технологический
университет имени Д. И. Менделеева, 2013
© Дударов С. П., Папаев П. Л., 2013

Оглавление

Введение	5
1. Использование табличного процессора Microsoft Excel для выполнения лабораторных работ	6
1.1. Общие сведения о табличном процессоре Microsoft Excel.....	6
1.2. Интерфейс и настройка программы Microsoft Excel 2010	7
1.3. Основные приемы работы с листами и таблицей	10
1.4. Стандартные процедуры и функции Microsoft Excel	12
1.5. Построение диаграмм и графиков	14
2. Основные понятия и классификация численных методов.....	16
3. Работа 1. Численное решение нелинейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel	18
3.1. Численные методы и алгоритмы решения нелинейных алгебраических уравнений	18
3.2. Общие положения. Варианты задания	23
3.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	26
4. Работа 2. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel	30
4.1. Численные методы и алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений	30
4.2. Общие положения. Варианты задания	34
4.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	37
5. Работа 3. Численное решение систем нелинейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel	41
5.1. Численные методы и алгоритмы решения систем нелинейных алгебраических уравнений	41
5.2. Общие положения. Варианты задания	43
5.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	46
6. Работа 4. Интерполирование экспериментальных зависимостей в Microsoft Excel	47
6.1. Основные понятия и расчетные соотношения для интерполирования экспериментальных зависимостей	47
6.2. Общие положения. Варианты задания	52
6.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	55

7. Работа 5. Аппроксимация экспериментальных зависимостей в Microsoft Excel	59
7.1. Основные теоретические положения полиномиальной аппроксимации экспериментальных зависимостей.....	59
7.2. Общие положения. Варианты задания.....	62
7.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	65
8. Работа 6. Расчет значения определенного интеграла численными методами в Microsoft Excel.....	68
8.1. Численные методы расчета определенных интегралов	68
8.2. Общие положения. Варианты задания.....	73
8.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	76
9. Работа 7. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений в Microsoft Excel	80
9.1. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений	80
9.2. Общие положения. Варианты задания.....	83
9.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	87
10. Работа 8. Численная оптимизация в задачах с одномерным критерием в Microsoft Excel	90
10.1. Численные методы оптимизации функций с одним неизвестным	90
10.2. Общие положения. Варианты задания.....	95
10.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	98
11. Работа 9. Численная оптимизация в задачах с многомерным критерием в Microsoft Excel	100
11.1. Численные методы многомерной оптимизации	100
11.2. Общие положения. Варианты задания.....	106
11.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel	110
Заключение.....	114
Библиографический список.....	115

Введение

Решение большинства инженерных задач связано с необходимостью применения в расчетах методов вычислительной математики, иначе называемых численными методами.

Современный уровень развития информационных компьютерных технологий позволяет выполнять все вычисления с использованием готовых пакетов прикладных программ. В основном их пользователю необходимо ввести минимально необходимый набор исходных данных, чтобы получить результаты расчетов. Зачастую речь даже не идет о выборе того или иного метода решения, а тем более, о настройке его параметров.

В то же время, при создании собственного программного обеспечения специалисту-разработчику требуется реализовать алгоритмы определенных методов в виде программного кода и определить параметры настройки этих методов. Таким образом, он должен иметь хорошее представление не только о данных, с которыми работает, и о получаемых результатах, но также понимать работу каждого этапа алгоритма численного метода и, соответственно, уметь реализовать алгоритм в виде программы. Фактически это и есть главная учебная цель любой дисциплины по вычислительной математике.

Один из наиболее эффективных способов достижения этой цели – уменьшить объем рутинных вычислений с использованием элементарных арифметических операций и при этом шаг за шагом проследить работу изучаемого численного метода с помощью стандартного программного средства – табличного процессора Microsoft Excel.

Данное учебное пособие представляет собой лабораторный практикум, позволяющий на конкретных примерах освоить различные численные методы с помощью данного инструментального средства.

1. Использование табличного процессора Microsoft Excel для выполнения лабораторных работ

1.1. Общие сведения о табличном процессоре Microsoft Excel

Microsoft Excel (MS Excel) – это приложение пакета Microsoft Office, предназначенное для работы с электронными таблицами. С его помощью можно создавать и форматировать книги (наборы электронных таблиц) для анализа и интерпретации данных с последующим принятием решений на основе сделанных выводов. Например, с помощью электронных таблиц можно отслеживать характер изменения данных, создавать формулы для выполнения вычислений на основе данных, строить модели для их анализа, обрабатывать данные различными способами и представлять их в виде профессионально оформленных диаграмм [1].

MS Excel наиболее часто используется:

- для создания документов без каких-либо расчетов, имеющих табличное представление содержимого, так как лист MS Excel представляет собой табличную форму, готовую к заполнению (например, расписание учебных занятий, прайс-лист в магазинах и т. п.);
- создания различных видов графиков и диаграмм, использующих данные для построения из ячеек таблиц (например, график экспериментальных данных);
- расчетов вычислительного эксперимента;
- выполнения типовых расчетов, так как MS Excel содержит большое количество математических, статистических и других функций;
- оформления отчетной документации, содержащей иллюстрации в виде графиков и диаграмм в большей степени, чем текстовую составляющую;
- работы с книгами и отдельными листами как с базой данных [2].

Первая версия MS Excel для Windows, названная Excel 2, появилась в ноябре 1987 года (Excel 1 была разработана для Macintosh). С того момента выпущено 12 основных версий программы, из которых на сегодняшний день наиболее часто используются:

- Excel 2003 – в пакете Microsoft Office 2003;
- Excel 2007 – в пакете Microsoft Office 2007;
- Excel 2010 – в пакете Microsoft Office 2010.

Версия 2003 года, официально известная как Microsoft Office Excel 2003, по сравнению с более ранними версиями, обеспечивает новые возможности ранжирования списков, улучшенную поддержку расширяемого языка разметки XML (eXtensible Markup Language) и содержит откорректированные статистические функции.

В Microsoft Office Excel 2007 появляются принципиально новый пользовательский интерфейс и форматы рабочих файлов, обеспечиваются поддержка больших листов, возможность удобного макетирования страниц. Кроме того, в данную версию внесены улучшения, связанные с оформлением диаграмм, условным форматированием, добавлены новые функции таблиц и рабочего листа.

Версия табличного процессора, выпущенная в 2010 году (Microsoft Office Excel 2010) включает в себя значительное количество новых функций, таких как Backstage – новое представление относящихся к документам операций, создание срезов для сводных таблиц, возможность пользовательской настройки ленты с меню и инструментами. Версия также содержит новый редактор формул и различные усовершенствования для редактирования изображений.

Далее в учебном пособии описание работы с программой и все примеры проиллюстрированы с использованием Microsoft Office Excel 2010.

1.2. Интерфейс и настройка программы Microsoft Excel 2010

Интерфейс MS Excel 2010 можно считать дальнейшим развитием пользовательского интерфейса, который был впервые использован в табличном процессоре предыдущей версии.

Включительно до версии 2003 года пользователям предоставлялся интерфейс, состоящий из меню, панелей инструментов и диалоговых окон. Однако, с появлением в программе множества новых функций, со старой системой их поиск стал бы затруднителен. В связи с этим дизайн пользовательского интерфейса был переработан. Интерфейс пользователя табличного процессора MS Excel 2010 показан на рис. 1.1.

Рабочее окно, представленное на рисунке, состоит из следующих элементов: вкладка (меню) «Файл» (1), панель быстрого доступа (2), элементы управления (3), вкладки (4), лента (5), строка формул (6), рабочее поле (7).

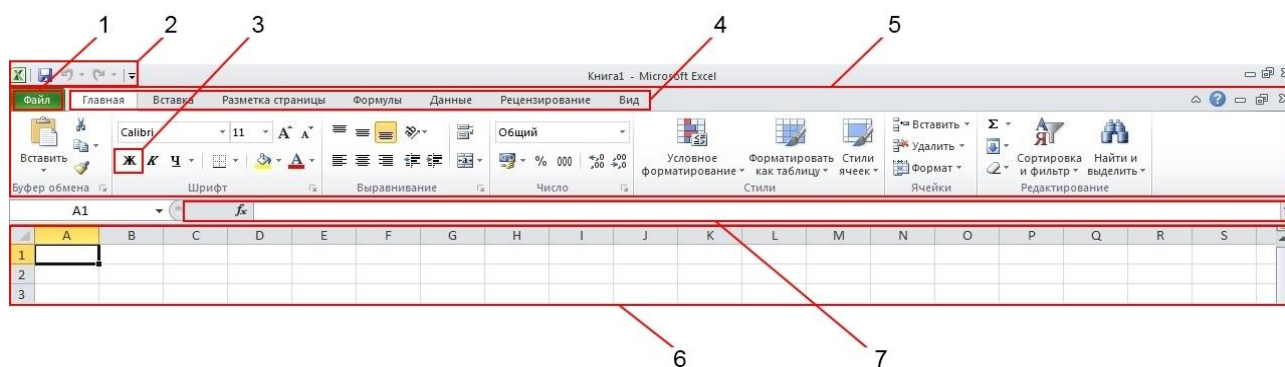


Рис. 1.1. Интерфейс пользователя табличного процессора Microsoft Excel 2010

Главный элемент пользовательского интерфейса MS Excel представляет собой **ленту**, которая идет вдоль верхней части рабочего окна вместо традиционных разделов меню и панелей инструментов. С помощью ленты можно легко и быстро находить нужные **элементы управления**: кнопки, раскрывающиеся списки, опции и другие. Все они упорядочены в логические группы, которые собраны на **вкладках**.

Панель быстрого доступа, расположенная в верхней части MS Excel, предназначена для быстрого доступа к наиболее часто используемым функциям. Ее можно настроить, добавив необходимые или удалив не используемые элементы.

Рабочее поле MS Excel разделено вертикальными и горизонтальными линиями на прямоугольные ячейки. Каждая ячейка имеет свое имя, состоящее из обозначений строки и столбца (например, ячейка с именем A1 соответствует ячейке, расположенной в столбце A и в строке 1). Для просмотра и редактирования содержимого ячеек имеется **строка формул**, расположенная под лентой.

При необходимости доступа к командам для работы с файлами, текущим документом или настройки MS Excel необходимо перейти на **вкладку «Файл»**, которая расположена в ленте первой слева. Здесь собраны элементы управления, которые аналогичны элементам главного меню прошлых версий (рис. 1.2).

Для индивидуальных настроек интерфейса пользователя необходимо перейти в подраздел **«Параметры»** вкладки «Файл». При этом откроется окно, представленное на рис. 1.3. Например, для выбора абсолютного или относительного формата ссылок на ячейки в формулах MS Excel необходимо выполнить следующую последовательность действий: «Файл» → «Параметры» → «Формулы» → «Работа с формулами» → отметить или снять опцию «Стиль ссылок R1C1».

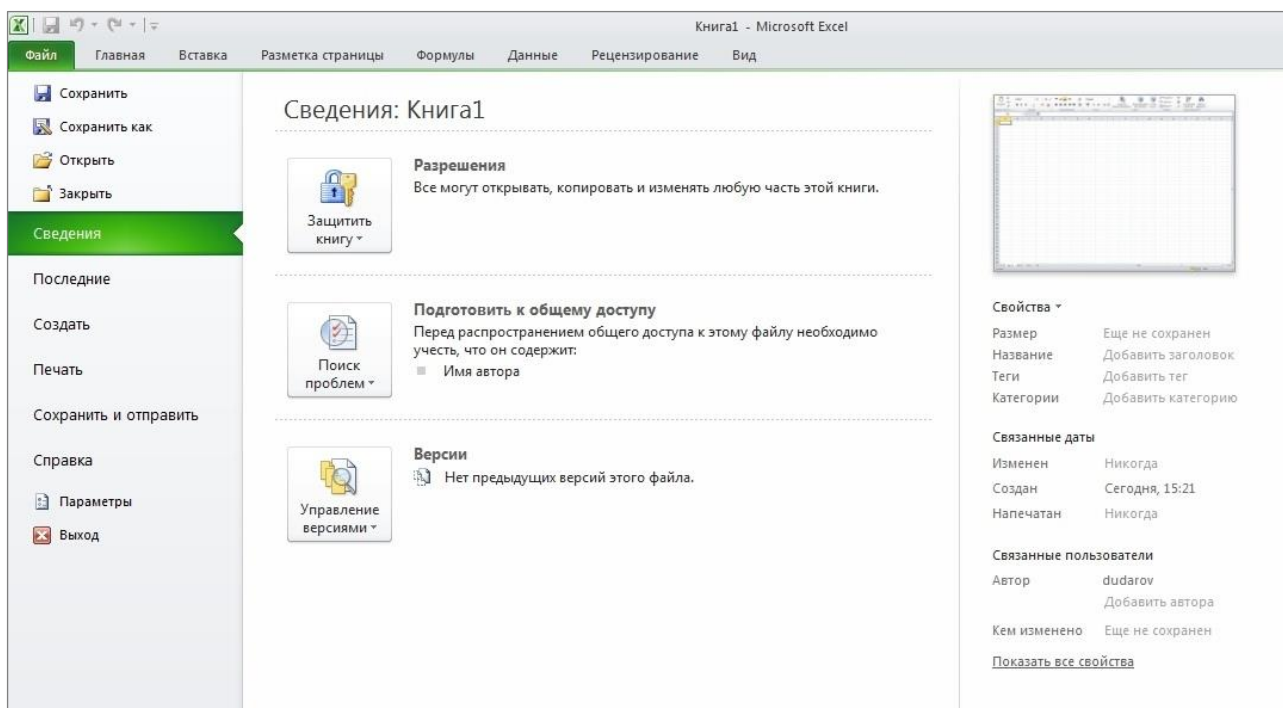


Рис. 1.2. Вкладка (меню) «Файл»

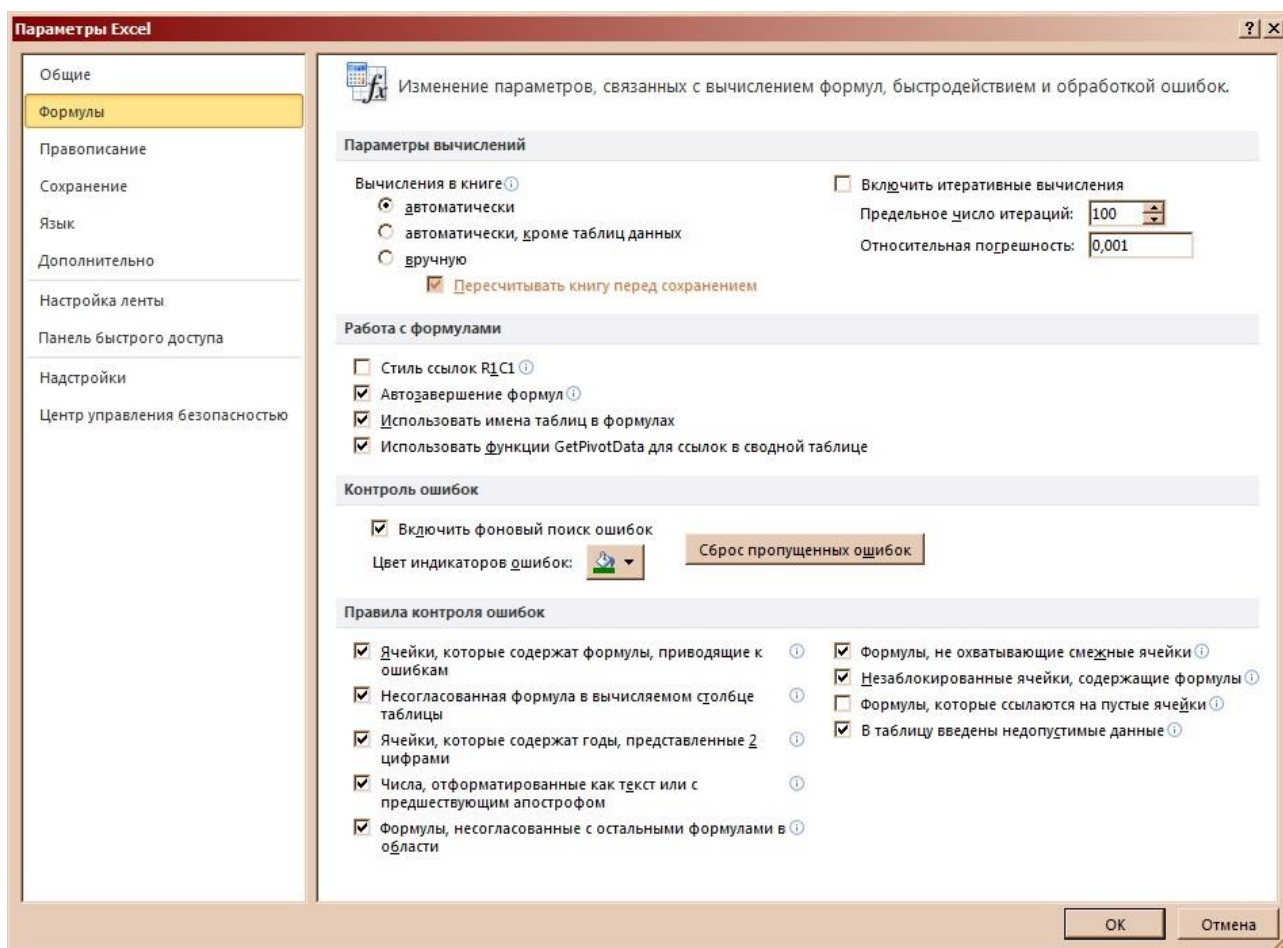


Рис. 1.3. Окно настроек «Параметры Excel»

Для закрепления на экране части листа при прокрутке другой его части необходимо перейти на вкладку «Вид» и в разделе «Окно» нажать на элемент управления (список) «Закрепить область». Далее из трех предложенных пользователю команд выбрать нужный вариант.

Если требуется разделить окно на несколько областей произвольного размера, в которых отображаются различные фрагменты одного листа, на вкладке «Вид» в разделе «Окно» найдите элемент управления «Разделить», при нажатии на который произойдет разбиение рабочей области на 4 части.

1.3. Основные приемы работы с листами и таблицей

Каждый файл MS Excel представляет собой книгу, которая состоит из листов (любая книга должна содержать хотя бы 1 лист). При запуске программы по умолчанию создается книга, включающая 3 листа. Листы в MS Excel 2010 представлены в виде вкладок, ярлыки которых находятся в нижнем левом углу рабочего окна программы (рис. 1.4).



Рис. 1.4. Панель управления листами

Чтобы **создать** новый лист, необходимо нажать кнопку «Вставить лист» или сочетание клавиш Shift+F11. Если требуется **удалить, переименовать** или **переместить** лист, созданный ранее, нажмите по нужному листу правой кнопкой мыши и в появившемся списке выберите соответствующую команду. Еще один способ изменения порядка следования листов – зажать левую кнопку мыши на ярлыке листа и перенести его в требуемую позицию.

Часто при работе с MS Excel требуется создавать **сводные листы**, на которых содержится информация с других листов. Это делается с помощью ссылок. Ссылка, как и формула, начинается со знака равенства. После этого знака пишется имя ячейки, на которую производится ссылка. Если нужная ячейка находится на другом листе, то перед ее адресом необходимо записать в одинарных кавычках имя листа, на котором она находится, и поставить восклицатель-

ный знак (например, так: ='Лист 1'!A1).

Для **копирования** содержимого ячейки (группы ячеек) следует выполнить следующие действия:

- выделить ячейку (группу ячеек);
- на вкладке «Главная» в разделе «Буфер обмена» нажать кнопку «Копировать» или воспользоваться сочетанием клавиш Ctrl+C;
- выделить ячейку, в которую необходимо вставить данные;
- в разделе «Буфер обмена» нажать кнопку «Вставить» или воспользоваться сочетанием клавиш Ctrl+V.

Если какая-либо ячейка содержала ссылки на другие ячейки и ее содержимое было скопировано в новую ячейку, то ссылки будут автоматически изменены на соответствующие новой позиции. Например, B1 ссылалась на A1. Тогда при копировании B1 в D2 последняя будет ссылаться на содержимое ячейки C2. Чтобы избежать автоматического изменения ссылок при копировании, требуется **зафиксировать** строку и столбец, с помощью специального символа \$ (например, запись =\$A\$1 позволяет постоянно ссылаться на значение в ячейке A1 из всех ячеек, в которые была произведена вставка). Для фиксации только столбца или строки нужно использовать данный символ только перед буквой или цифрой соответственно.

В MS Excel существует множество **форматов данных** (текстовый, числовой, денежный и др.), которые предназначены для выполнения различных задач. Например, **текстовый** формат используется, когда значение в ячейке должно отображаться точно так же, как вводится (обрабатывается как строки в независимости от содержания). По умолчанию в MS Excel применяется **общий** формат, который предназначен для отображения как текстовых, так и числовых значений произвольного типа.

Чтобы изменить формат данных ячейки (группы ячеек), нужно выполнить следующие действия:

- выделить ячейку (группу ячеек);
- на вкладке «Главная» в разделе «Число» открыть список и выбрать необходимый формат данных или перейти в диалоговое окно «Формат ячеек» (вкладка «Число»), нажатием левой кнопки мыши на правый нижний угол раздела «Число».

Практически у каждого формата есть индивидуальные настройки. Так, например, при выборе **числового** формата в этом же диалоговом окне можно

указать число десятичных знаков и установить опцию «Разделитель групп разрядов».

Часто требуется **объединить** группу из нескольких ячеек в одну. Для этого необходимо выделить все ячейки группы и на вкладке «Главная» в разделе «Выравнивание» нажать кнопку «Объединить и поместить в центр».

1.4. Стандартные процедуры и функции Microsoft Excel

Все расчеты в MS Excel ведутся с помощью формул и функций, которые записываются в строке формул (рис. 1.1, поз. 7) начиная со знака равенства. Рассмотрим основные функции, которые будут использоваться в ходе лабораторного практикума.

Для ввода данных, которые подчиняются определенному закону (например, арифметической прогрессии $1, 2, 3 \dots n, n+1$), можно воспользоваться встроенной функцией (рис. 1.5). Для этого необходимо ввести первые два числа прогрессии в соответствующие им ячейки, выделить их и, нажав левой кнопкой мыши на маленький черный квадрат в нижнем правом углу выделенного диапазона, растянуть область до нужного количества значений (ячеек).

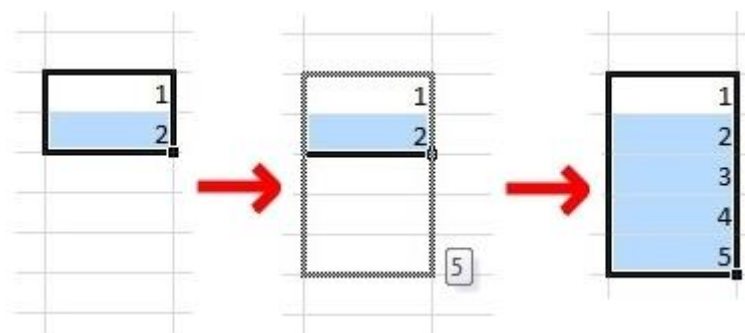


Рис. 1.5. Пример ввода арифметической прогрессии

Для расчета значения в ячейке существует множество стандартных функций, которые упрощают запись формулы. Основные функции, используемые при выполнении лабораторных работ, представлены ниже [1].

Логические функции:

– ЕСЛИ (логическое выражение или значение; возвращаемое значение, если логическое выражение истинно; возвращаемое значение, если логическое выражение ложно) – выполняет проверку условия и возвращает одно из двух

возможных значений в зависимости от его истинности;

- И (логическое значение 1; логическое значение 2; ...) – возвращает значение ИСТИНА, если все аргументы имеют значение ИСТИНА;

- ИЛИ (логическое значение 1; логическое значение 2; ...) – возвращает значение ИСТИНА, если хотя бы один аргумент имеет значение ИСТИНА;

- НЕ (логическое выражение или значение) – возвращает логическое значение, противоположное своему аргументу.

Математические функции:

- ABS (число) – возвращает модуль (абсолютную величину) числа;

- ACOS (число) – возвращает арккосинус числа;

- ASIN (число) – возвращает арксинус числа;

- ATAN (число) – возвращает арктангенс числа;

- COS (число) – возвращает косинус числа;

- EXP (число) – возвращает экспоненту, возведенную в указанную степень;

- LN (число) – возвращает натуральный логарифм числа;

- LOG (число; основание) – возвращает логарифм числа по заданному основанию;

- LOG10 (число) – возвращает десятичный логарифм числа;

- SIN (число) – возвращает синус числа;

- TAN (число) – возвращает тангенс числа;

- КОРЕНЬ (число) – возвращает положительное значение квадратного корня;

- ОКРУГЛ (число; количество разрядов) – округляет число до указанного количества десятичных разрядов;

- ПРОИЗВЕД (число1; число2; ...) – возвращает произведение аргументов;

- СТЕПЕНЬ (число; степень) – возвращает результат возведения числа в степень;

- СУММ (число1; число2; ...) – возвращает сумму аргументов.

- СУММКВ (число1; число2; ...) – возвращает сумму квадратов аргументов;

- СУММРАЗНКВ (массив 1; массив 2) – возвращает сумму разностей квадратов соответствующих значений в двух массивах;

- СУММКВРАЗН (массив 1; массив 2) – возвращает сумму квадратов

разностей соответствующих значений в двух массивах.

Матричные функции:

- ИНДЕКС (массив; номер строки; номер столбца) – использует индекс для выбора значений из ссылки или массива;
- МОБР (массив) – возвращает обратную матрицу массива;
- МОПРЕД (массив) – возвращает определитель матрицы;
- МУМНОЖ (массив 1; массив 2) – возвращает произведение двух матриц.

Статистические функции:

- МАКС (число1; число2; ...) – возвращает наибольшее значение в списке аргументов;
- МИН (число1; число2; ...) – возвращает наименьшее значение в списке аргументов;
- СРЗНАЧ (число1; число2; ...) – возвращает среднее арифметическое значение аргументов.

При использовании функций МОБР и МУМНОЖ, необходимо выполнить следующие действия:

- выделить группу ячеек под результат вычислений;
- в строке формул записать функцию с необходимыми аргументами;
- в режиме редактирования нажать комбинацию клавиш Ctrl+Shift+Enter.

1.5. Построение диаграмм и графиков

Диаграммы и графики используются для представления рядов числовых данных в графическом виде. Они призваны облегчить восприятие больших объемов данных и взаимосвязей между различными рядами данных.

Чтобы создать диаграмму в приложении MS Excel, сначала выделите данные, которые будут использоваться для ее построения, затем постройте любую диаграмму, тип которой можно выбрать на ленте на вкладке «Вставка» в разделе «Диаграммы».

Приложение MS Excel поддерживает различные типы диаграмм, позволяя представить данные в наиболее понятном для целевой аудитории виде. При создании новой диаграммы или изменении существующей можно выбрать любой тип (например, гистограмму или точечный график). Кроме того, можно создать

смешанную диаграмму, используя несколько типов диаграмм.

Диаграмма состоит из множества элементов (рис. 1.6). Некоторые из них отображаются по умолчанию, а другие можно добавить при необходимости. При необходимости ненужные элементы можно удалить. Все необходимые кнопки управления для настройки элементов диаграммы находятся на вкладках «Конструктор», «Макет» и «Формат» (появляются при нажатии на любую область диаграммы).

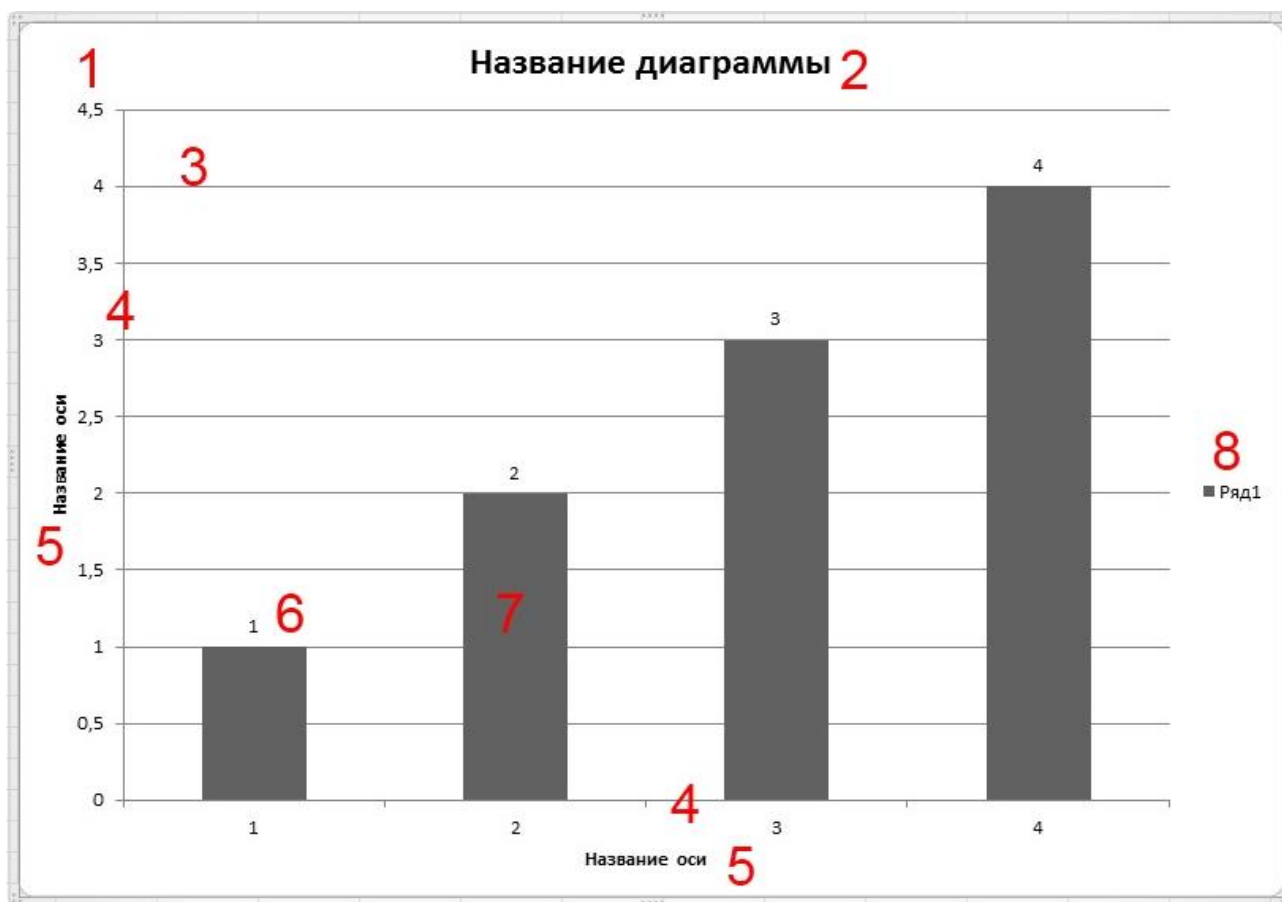


Рис. 1.6. Структура диаграммы

На рисунке представлены основные элементы диаграммы: область диаграммы (1); название диаграммы (2); область построения диаграммы (3); горизонтальная и вертикальная оси (4); названия осей (5); метки данных (6); элементы данных (7); легенда диаграммы (8) [1].

Для изменения, добавления или удаления источника данных необходимо вызвать окно «Выбор источника данных». Это можно сделать двумя способами:

1. Нажать правой кнопкой мыши на любую область диаграммы и в появившемся контекстном меню нажать на «Выбрать данные...»;

2. Выделить диаграмму, перейти на вкладку «Конструктор» и в разделе «Данные» нажать «Выбрать данные».

Если необходимо изменить масштаб оси значений на логарифмический, выполните следующие действия:

1. Выделите диаграмму;

2. Перейдите на вкладку «Макет»;

3. В разделе «Оси» нажмите на элемент управления (список) «Оси» → «Основная вертикальная ось» → «Логарифмическая шкала».

После выполнения этих действий значения на оси будут показываться в логарифмическом масштабе по основанию 10.

Таким образом, очевидно, что табличный процессор Microsoft Excel может служить удобным средством решения большого количества расчетных задач, сопровождая результаты решения всеми необходимыми для их анализа графиками и диаграммами.

2. Основные понятия и классификация численных методов

Численные методы – это множество методов решения типовых математических задач, в ходе которых все исходные, промежуточные и результирующие значения переменных представляются в числовой форме. К этим задачам относятся:

- решение нелинейных алгебраических уравнений;
- решение систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений;
- интерполирование и аппроксимация экспериментальных зависимостей;
- вычисление определенных интегралов;
- решение дифференциальных уравнений и их систем;
- оптимизация функций.

Кроме численных методов решения математических задач выделяют еще графические и аналитические. Тем не менее, с использованием средств вычислительной техники математические задачи могут быть решены только численно. В то же время возможно сочетание численных методов с графическими и аналитическими. Так **графические методы** могут быть использованы для нахождения начальных приближений при вычислении корней уравнений или оптимизации функций. В свою очередь, **аналитические методы** могут приме-

няться для проверки работоспособности реализованных численных методов на простых примерах, не вызывающих затруднений при аналитических расчетах.

Среди численных методов решения любых математических задач можно выделить прямые (точные) и итерационные. **Прямые методы** позволяют получить решение по определенному алгоритму и расчетным соотношениям без ошибки. **Итерационные методы** предполагают некоторую последовательность действий в соответствии с выбранным алгоритмом, с выполнением которых промежуточное решение постепенно уточняется. В ряду итерационных методов отдельно можно выделить **рекуррентные** – методы, требующие для расчета текущего приближения к решению подстановки в расчетное рекуррентное соотношение одного или нескольких предыдущих приближений.

Приближением называется промежуточное значение решения математической задачи, изменяющееся в ходе повторяющейся вычислительной процедуры. **Начальное приближение** – приближение в момент начала серии повторений вычислительной процедуры.

В итерационных методах всегда используется понятие **итерации** – многократно повторяющейся операции или последовательности операций, позволяющей приблизить промежуточное решение задачи к истинному решению.

Получение решения любым итерационным методом происходит до достижения требуемого значения **вычислительной точности**. По сути, она представляет собой максимально допустимую абсолютную погрешность (абсолютную ошибку), заложенную в решение используемым численным методом.

Абсолютная погрешность (ошибка) – отклонение полученной экспериментальным или вычислительным путем величины от ее истинного выражения, взятое по абсолютному значению.

Решение математической задачи численным итерационным методом может быть записано в виде:

$$x = X \pm \varepsilon,$$

где X – величина, собственно найденная с использованием метода; ε – заданная вычислительная точность. Соответственно, истинное значение решения должно принадлежать интервалу $[X - \varepsilon; X + \varepsilon]$.

Шаг расчета – расстояние между двумя соседними значениями независимой переменной, изменяемой в ходе циклической вычислительной процедуры для получения нового приближения к решению задачи.

Условие окончания – критерий, по которому в ходе работы алгоритма

принимается решение об окончании итерационной вычислительной процедуры. В качестве такого условия обычно используется достижение требуемой точности полученного решения. В отдельных случаях может быть задано предельное количество итераций или предельный уровень ошибки расчета.

Далее по тексту учебного пособия общие понятия вычислительной математики используются в трактовке, приведенной в данной главе.

3. Работа 1. Численное решение нелинейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel

3.1. Численные методы и алгоритмы решения нелинейных алгебраических уравнений

Уравнение вида $f(x) = 0$ называется **алгебраическим уравнением с одним неизвестным**. Если функция $y = f(x)$ – нелинейная, то соответствующее ей уравнение называется **нелинейным алгебраическим уравнением**.

Всякое значение C , обращающее алгебраическое уравнение в тождество при $x = C$, называется **корнем уравнения**.

Решить уравнение – найти все его корни или доказать, что корней нет.

В вычислительной математике процесс решения уравнения состоит из двух основных этапов:

1. Отделение корней – нахождение интервалов локализации всех корней. С одной стороны, каждому корню должен соответствовать непрерывный интервал его локализации, границы которого определяются на основе визуального (графического) или математического (численного) анализа функции $y = f(x)$. С другой стороны, на интервале обязательно должен быть единственный корень. Интервалы локализации соседних корней могут частично пересекаться.

2. Уточнение корней – определение корней уравнения на каждом интервале локализации с заданной точностью с использованием одного из численных методов.

Наиболее часто задача отделения корней решается с использованием **графических методов**, позволяющих приближенно найти корень уравнения или интервал его локализации по внешнему виду графика функции $y = f(x)$. К графическим методам относятся:

- метод нулей функции;
- метод точек пересечения графиков функций.

Метод нулей функции заключается в приближенном определении корней уравнения как точек пересечения графика функции с осью абсцисс.

Метод точек пересечения графиков функций предусматривает преобразование уравнения $f(x) = 0$ к виду $f_1(x) = f_2(x)$. Результатом приближенного определения корней данным методом являются точки пересечения графиков функций $y = f_1(x)$ и $y = f_2(x)$.

Для уточнения корней используются **численные методы**. Если в ходе итерационного процесса осуществляется постепенное сужение интервала локализации корня уравнения, такой численный метод относится к группе **интервальных методов**. В этом случае значения функции $y = f(x)$ на концах интервала должны иметь разный знак. Если же в процессе итераций производится непосредственный пересчет нового приближения по итерационной формуле, соответствующий численный метод относится к группе **методов уточнения корня**.

Для выполнения лабораторной работы используются интервальные методы – половинного деления и пропорциональных частей – и методы уточнения корня – простых итераций и касательных.

Алгоритм решения **методом половинного деления** следующий:

1. Задаются точность поиска ε и начальный интервал локализации корня $[a, b]$; определяются значения функции $y = f(x)$ на его концах: $f(a), f(b)$ (рис. 3.1);

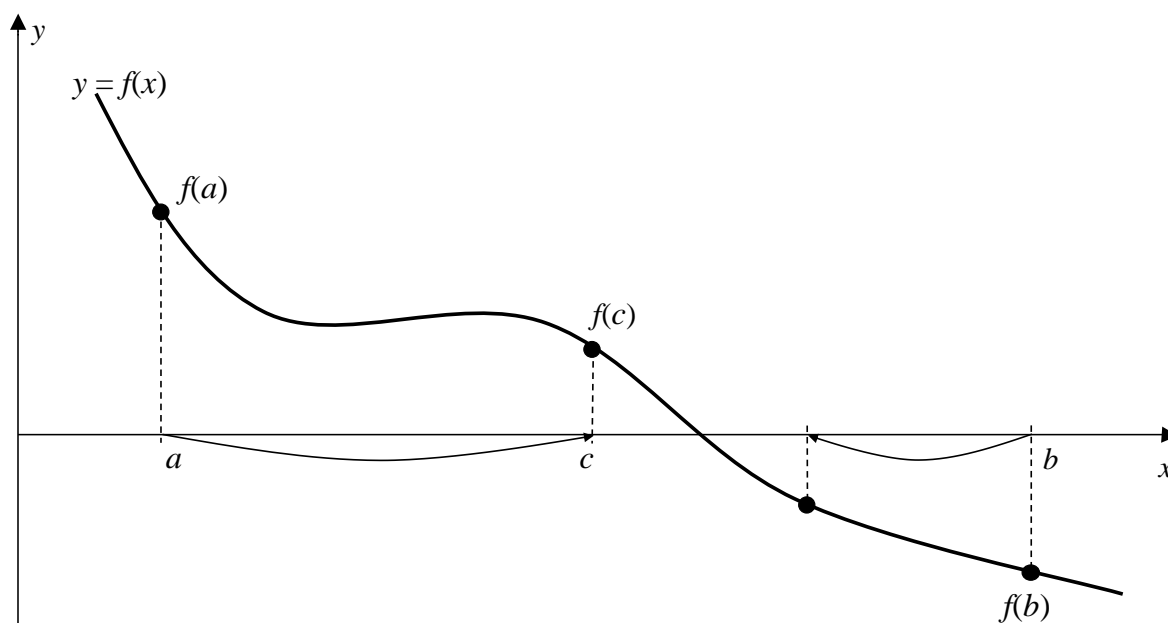


Рис. 3.1. Графическая интерпретация метода половинного деления

2. Текущий интервал локализации $[a, b]$ делится пополам точкой $c = (a+b)/2$ и находится значение $f(c)$;

3. Проверяются условия:

$$\frac{b-a}{2} \leq \varepsilon; \quad (3.1)$$

$$f(c) = 0. \quad (3.2)$$

Если хотя бы одно из условий (3.1, 3.2) выполняется, вычислительный процесс останавливается, а число c является корнем уравнения на заданном интервале;

4. Проверяется условие: $f(a) \cdot f(c) > 0$. Если оно выполняется, левая граница интервала локализации переносится в точку c ($a = c$), в противном случае в точку c переносится правая граница ($b = c$). Интервал локализации на данном этапе алгоритма уменьшается вдвое;

5. Процедура повторяется с п. 2.

Метод пропорциональных частей в целом похож на метод половинного деления. Существенное отличие заключается в том, что текущий интервал локализации корня делится не пополам, а пропорционально значениям функции $y = f(x)$ на его концах (рис. 3.2) точкой c в соответствии с соотношением:

$$c = \frac{b \cdot f(a) - a \cdot f(b)}{f(a) - f(b)},$$

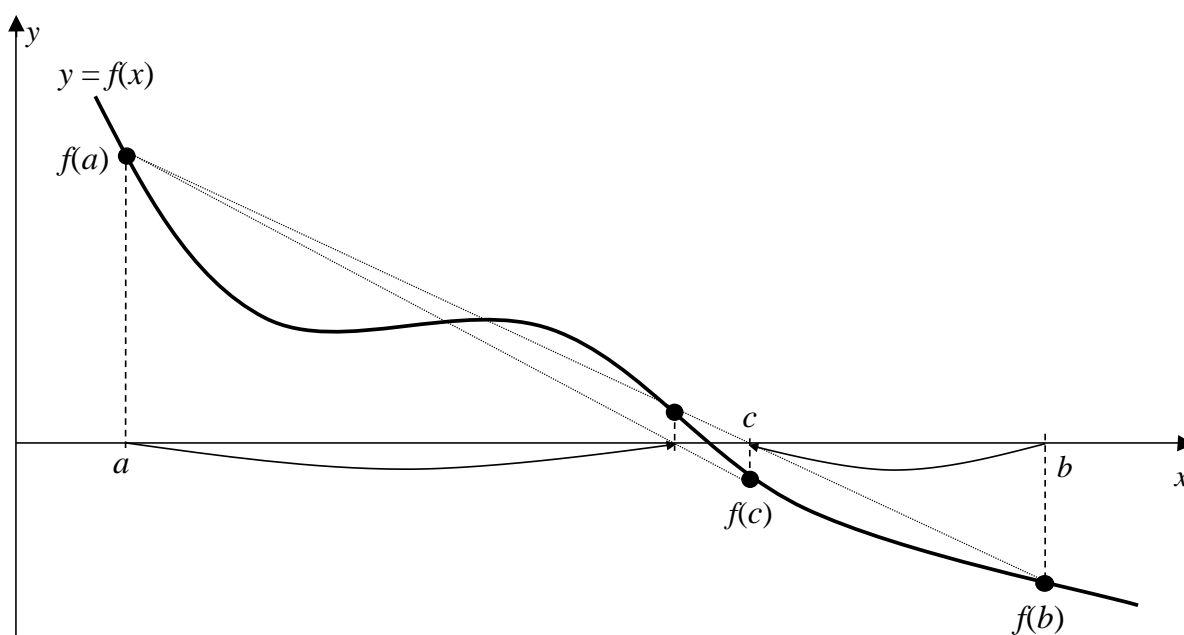


Рис. 3.2. Графическая интерпретация метода пропорциональных частей

К проверяемым условиям окончания вычислительной процедуры (3.1, 3.2) добавляется третье:

$$\min\{b - c, c - a\} \leq \varepsilon,$$

при этом для окончания достаточно выполнения одного из трех условий, обычно последнего.

В остальном алгоритм аналогичен предыдущему. Однако за счет использования пропорционального деления при одной и той же заданной точности количество итераций будет меньше, чем в методе половинного деления.

Решение нелинейного алгебраического уравнения **методом простых итераций** требует преобразования исходного уравнения $f(x) = 0$ к виду $x = \varphi(x)$.

Достаточным условием сходимости метода является $|\varphi'(x)| < 1$, выполняющееся на всем интервале локализации корня. Причем чем меньше по величине абсолютное значение производной, тем быстрее будет получено решение.

Последовательность приближений строится с использованием итерационного соотношения:

$$x^{(k)} = \varphi(x^{(k-1)}), \quad (3.3)$$

до тех пор, пока не будет выполнено условие окончания:

$$|x^{(k)} - x^{(k-1)}| \leq \varepsilon. \quad (3.4)$$

Во многих случаях представляется сложным получить итерационную форму уравнения (3.3), тогда можно воспользоваться другой формой:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \lambda \cdot f(x^{(k-1)}),$$

получающейся из уравнения вида $\lambda \cdot f(x) = 0$, равносильного исходному.

При выборе параметра λ необходимо контролировать выполнение достаточного условия сходимости метода простых итераций. В качестве формулы для его расчета можно использовать следующую:

$$\lambda = -\frac{\operatorname{sgn}(f'(x^{(0)})) \cdot \nu}{1 + |f'(x^{(0)})|},$$

где ν – коэффициент, влияющий на скорость сходимости метода, выбираемый, как правило, в пределах от 0,3 до 0,7; $\operatorname{sgn}()$ – функция знака, возвращающая значения: 1, если аргумент – положительное число, или -1 , если аргумент – отрицательное число. Производная в начальной точке не должна равняться нулю.

Итерационная формула **метода касательных (Ньютона)** позволяет рас-

считать новое приближение по значениям функции и ее производной в точке последнего приближения:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \frac{f(x^{(k-1)})}{f'(x^{(k-1)})}.$$

Из рис. 3.3 видно, что на любом шаге итерационной процедуры поправка нового приближения представляет собой взятое с обратным знаком отношение катета прямоугольного треугольника, противолежащего острому углу (он же – угол наклона касательной к графику функции в точке предыдущего приближения), к тангенсу этого угла, то есть значению производной в этой точке.

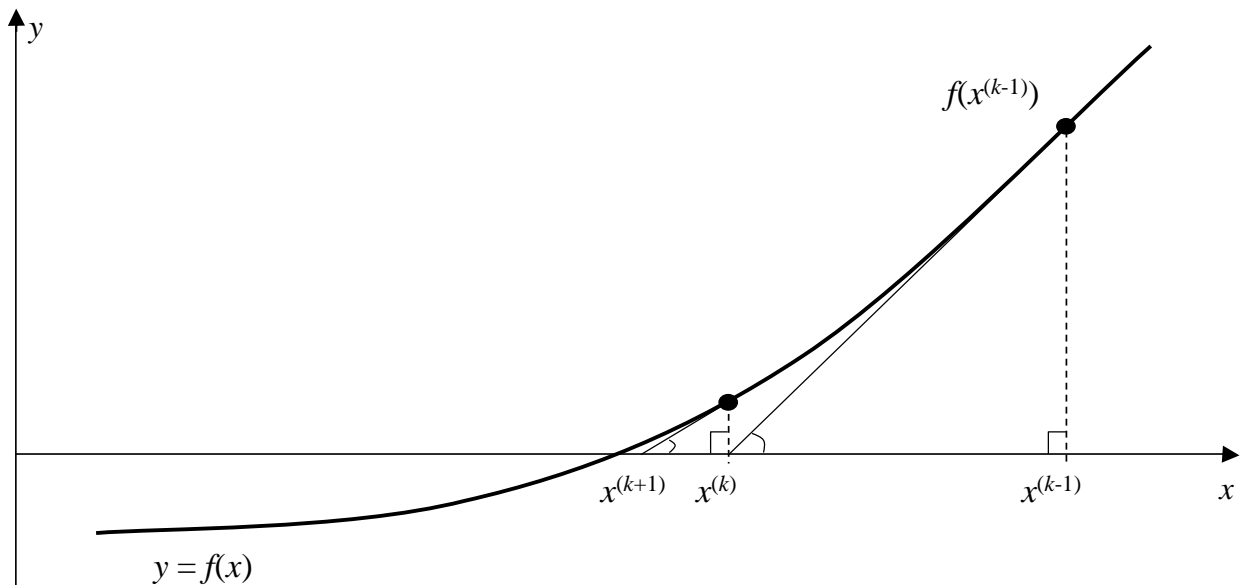


Рис. 3.3. Графическая интерпретация метода касательных

Достаточное условие сходимости метода:

$$\frac{|f(x) \cdot f''(x)|}{[f'(x)]^2} < 1.$$

Необходимость прямого расчета производной функции на каждой итерации исключена в модификации метода касательных, где сделано допущение о расчете производной в точке последнего приближения по значениям функций в ней и точке предпоследнего приближения:

$$f'(x^{(k-1)}) \approx \frac{f(x^{(k-1)}) - f(x^{(k-2)})}{x^{(k-1)} - x^{(k-2)}}.$$

В этом случае итерационная формула метода преобразуется к виду:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \frac{f(x^{(k-1)}) \cdot (x^{(k-1)} - x^{(k-2)})}{f(x^{(k-1)}) - f(x^{(k-2)})}.$$

При использовании последнего соотношения необходимо задавать два начальных приближения, близко расположенных друг к другу, таким образом, чтобы выполнялось условие:

$$|f(x^{(1)})| < |f(x^{(0)})|.$$

Условие окончания вычислительной процедуры (3.4) справедливо как для самого метода касательных, так и для его модификации.

При необходимости численно определить значение **производной функции** в итерационных методах решения нелинейных алгебраических уравнений можно воспользоваться ее определением, в соответствии с которым она рассматривается как предел отношения приращения функции к соответствующему ему бесконечно малому приращению аргумента.

Таким образом, задавшись некоторым бесконечно малым приращением, сопоставимым по величине с точностью решаемой задачи (ε), получаем:

$$f'(x) \approx \frac{f\left(x + \frac{\varepsilon}{2}\right) - f\left(x - \frac{\varepsilon}{2}\right)}{\varepsilon}.$$

Аналогичным образом при необходимости могут быть рассчитаны производные второго и более высоких порядков.

3.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах решения нелинейных алгебраических уравнений; получение навыков численного решения нелинейных алгебраических уравнений с использованием табличного процессора MS Excel.

Задача. С использованием одного из численных методов найти корни нелинейного алгебраического уравнения в табличном процессоре MS Excel. Оформить результаты расчетов в табличной форме. Провести исследование и сделать выводы о влиянии заданной точности на скорость решения уравнения. Сравнить между собой численные методы по скорости решения.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и особенностям численных методов решения нелинейных алгебраиче-

ских уравнений.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (таблица) с коэффициентами нелинейного алгебраического уравнения вида:

$$a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3\sin(x) = 0,$$

интервалом локализации его корней и численных методов решения.

Варианты задания для работы 1

№ варианта	a_0	a_1	a_2	a_3	Графический метод для п. 3	Численные методы для п. 4, 5
1	-0,33	1,77	-0,95	6,51	НФ	ПД, ПЧ
2	-0,50	-2,15	-0,87	-5,72	ТП	МК, ПИ
3	-0,21	2,02	0,70	3,56	НФ	ПД, МК
4	0,36	-2,66	-0,88	-6,94	ТП	ПЧ, ПИ
5	0,44	-0,27	0,97	7,32	НФ	ПД, ПИ
6	-0,05	0,41	-0,73	5,74	ТП	МК, ПЧ
7	-0,06	-2,99	-0,89	-5,04	НФ	МК, ПИ
8	0,12	2,79	0,84	4,35	ТП	ПД, ПЧ
9	0,46	-1,83	-0,80	-3,94	НФ	ПЧ, ПИ
10	0,00	-2,56	0,77	-5,39	ТП	ПД, МК
11	0,16	-1,29	-0,80	-7,00	НФ	МК, ПЧ
12	0,28	1,11	-0,67	4,59	ТП	ПД, ПИ
13	-0,01	-1,96	-0,81	-4,48	НФ	ПД, ПЧ
14	0,05	-2,15	-0,67	-4,84	ТП	МК, ПИ
15	0,08	3,43	-0,92	5,04	НФ	ПД, МК
16	0,37	0,61	0,77	5,52	ТП	ПЧ, ПИ
17	-0,11	-2,85	0,73	-6,42	НФ	ПД, ПИ
18	-0,25	1,33	0,70	6,30	ТП	МК, ПЧ
19	0,14	1,24	-0,60	4,68	НФ	МК, ПИ
20	-0,32	3,91	0,93	7,35	ТП	ПД, ПЧ
21	-0,40	3,79	0,87	7,58	НФ	ПЧ, ПИ
22	-0,36	0,62	0,99	3,03	ТП	ПД, МК
23	-0,15	2,00	-0,65	3,98	НФ	МК, ПЧ
24	0,29	0,87	-0,93	5,80	ТП	ПД, ПИ

3. На Листе 1 рабочего файла MS Excel представить исходные данные для решения нелинейного алгебраического уравнения, указанные в выданном варианте задания.

4. На Листе 2 составить таблицу для построения функциональных зави-

симостей с целью графического решения уравнения на заданном интервале одним из методов:

- нулей функции (НФ);
- точек пересечения графиков функций (ТП).

Определить графически количество корней, их приближенные значения и интервалы локализации каждого корня, записать соответствующие значения корней и границы интервалов на Листе 2.

5. В таблицах на Листах 3 и 4 представить решение уравнения для всех возможных корней двумя численными методами (каждый метод на отдельном листе), указанными в варианте задания:

- половинного деления (ПД);
- пропорциональных частей (ПЧ);
- простых итераций (ПИ);
- касательных (МК)

при следующих значениях точности: 0,1, 0,01, 0,001, 0,0001, 0,00001.

6. На Листе 5 в логарифмической шкале построить графики зависимости количества шагов решения уравнения обоими методами от заданной точности. Выполнить сравнительный анализ и сделать выводы о влиянии выбранного метода и точности на скорость решения нелинейного алгебраического уравнения.

7. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Что называется нелинейным алгебраическим уравнением? Что называется корнем уравнения?

2. Какова основная цель использования графических методов решения уравнений с одним неизвестным?

3. Какие вы знаете графические методы решения уравнений с одним неизвестным, в чем они заключаются?

4. Назовите интервальные методы решения уравнений с одним неизвестным.

5. Чем отличаются интервальные методы и методы уточнения корня?

6. Какое условие обязательно должно выполняться для решения уравнения одним из интервальных методов?

7. Кратко опишите алгоритм работы метода половинного деления.
8. Кратко опишите алгоритм работы метода пропорциональных частей.
9. Какие вы знаете условия окончания итерационной процедуры в интервальных методах решения нелинейных алгебраических уравнений?
10. От каких факторов зависит количество шагов поиска корня методом половинного деления?
11. От каких факторов зависит количество шагов поиска корня методом пропорциональных частей?
12. Кратко опишите алгоритм работы метода простых итераций.
13. Каково достаточное условие сходимости метода простых итераций?
14. Кратко опишите алгоритм работы метода касательных.
15. Графически продемонстрируйте возможные вычислительные проблемы метода касательных.
16. Для каких численных методов необходимо осуществлять расчет производной функции?
17. Каким образом численно рассчитывается значение производной?
18. Что означает запись решения уравнения в виде: $x = C \pm \varepsilon$?

3.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 1 на следующем примере. Требуется решить уравнение вида $-8,3 + 3,9x - 0,3x^2 + 3,1\sin(x) = 0$ на интервале $(0; 12)$ методами половинного деления и пропорциональных частей.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные, как показано на рис. 3.4.

Таблица и график для функциональной зависимости $y = -8,3 + 3,9x - 0,3x^2 + 3,1\sin(x)$, а также приближенные значения корней и интервалы локализации каждого корня оформляются на Листе 2, как показано на рис. 3.5. Из приведенного примера видно, что вышеуказанная функция на интервале от 0 до 12 имеет два пересечения с осью абсцисс, и, следовательно, заданное уравнение на том же интервале имеет два решения, приближенные значения и интервалы локализации которых записаны в таблице, расположенной под графиком на рис. 3.4.

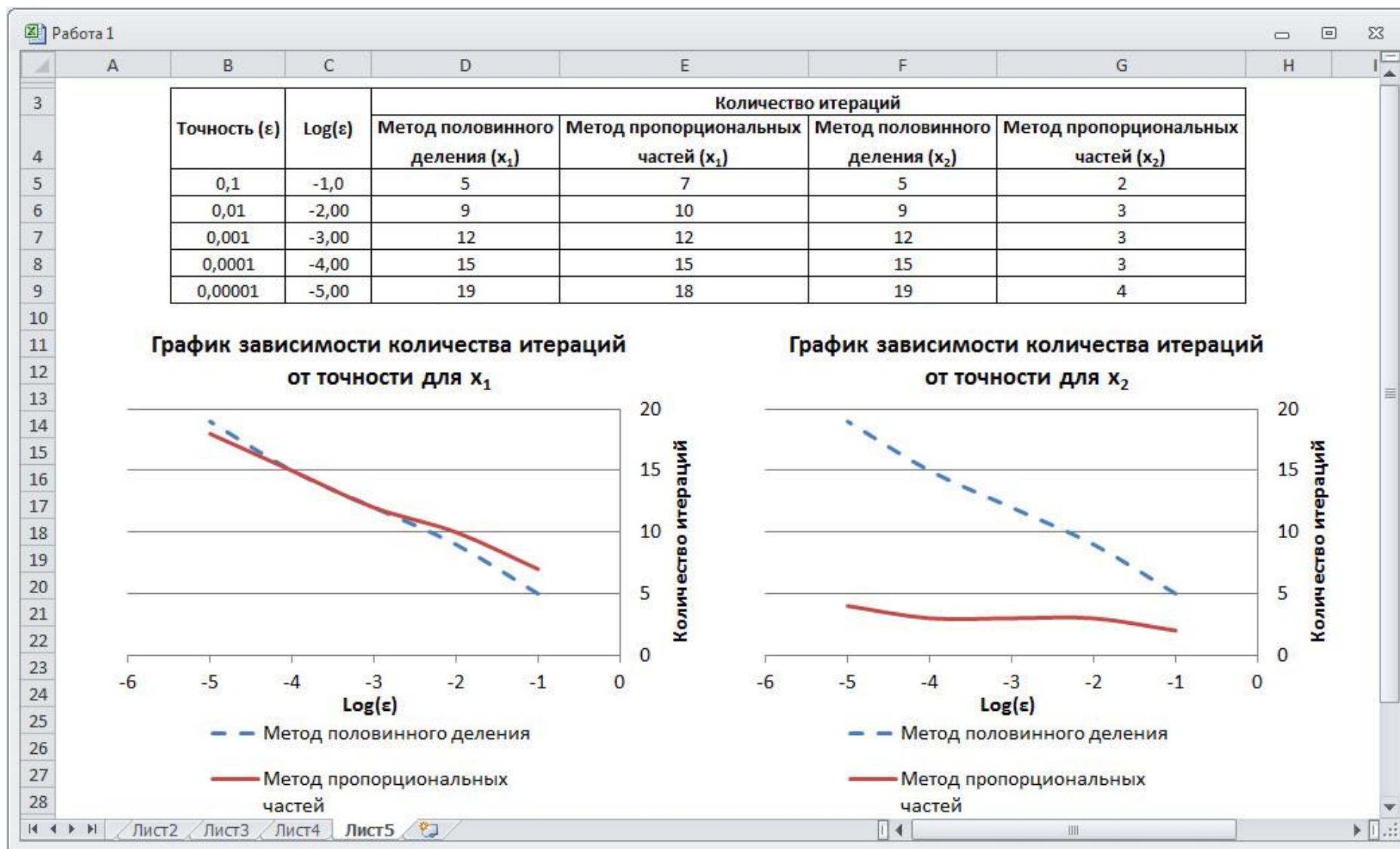


Рис. 3.7. Оформление графиков зависимости количества сделанных итераций от требуемой точности

Поэтапный процесс решения на Листе 3 рабочего файла MS Excel представляется в табличной форме. Цветом выделены строки решения, полученные с указанными в задании значениями точности. Аналогично оформляется Лист 4 для второго метода, указанного в варианте задания (метод пропорциональных частей).

Сравнительный анализ объема вычислений в зависимости от точности и выбранного метода проводится по графикам, которые оформляются на Листе 5 (рис. 3.7). Делаются выводы о влиянии выбранного метода решения и заданной точности на объем вычислений.

4. Работа 2. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel

4.1. Численные методы и алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений

Выполнение данной лабораторной работы требует решения системы линейных алгебраических уравнение в матричной форме. Необходимый минимум основных сведений о матричных операциях приведен в пособии [4]. В матричной записи система из n линейных уравнений может быть представлена следующим образом:

$$\overline{\overline{A}} \cdot \vec{x} = \vec{b}, \quad (4.1)$$

или развернуто:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix},$$

где $\overline{\overline{A}}$ – матрица коэффициентов системы размера $n \times n$; \vec{b} – вектор свободных членов размера n ; \vec{x} – вектор независимых переменных размера n .

Методы решения таких систем можно разделить на две группы: прямые (точные) и итерационные. **Прямые** методы позволяют получить точное решение за конечное число вычислений. **Итерационные** методы дают бесконечный ряд последовательных приближений к решению, а вычислительный процесс

останавливается в соответствии с ограничениями на точность, наложенными пользователем.

Варианты заданий к лабораторным работам предусматривают реализацию методов Крамера, обратной матрицы и Жордана–Гаусса, относящихся к классу прямых методов, и методов простых итераций и его модификации Гаусса–Зейделя, являющихся итерационными методами. Рассмотрим эти методы далее. В рамках каждого из методов для выполнения матричных операций (расчета определителей, нахождения обратной матрицы, умножения матриц и других) применяются специальные встроенные функции MS Excel, описанные в главе 1.

Метод Крамера заключается в расчете элементов вектора решения как отношений определителей модифицированных матриц $\overline{A_i}$ к определителю исходной матрицы коэффициентов. Модифицированные матрицы составляют при помощи замены столбца исходной матрицы коэффициентов, имеющего индекс, равный индексу рассчитываемого элемента вектора решения, на столбец свободных членов:

$$x_i = \frac{\overline{A_i}}{\overline{A}} = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1\ i-1} & b_1 & a_{1\ i+1} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2\ i-1} & b_2 & a_{2\ i+1} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{n\ i-1} & b_n & a_{n\ i+1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}}, \quad \forall i = \overline{1, n},$$

Решение системы **методом обратной матрицы** получают в результате умножения матрицы коэффициентов, обратной исходной, на вектор свободных членов:

$$\vec{x} = \overline{A}^{-1} \cdot \vec{b}.$$

Метод Жордана–Гаусса позволяет решить систему с использованием следующего алгоритма:

1. Составляют расширенную прямоугольную матрицу за счет добавления к исходной матрице коэффициентов столбца свободных членов:

$$\overline{\overline{A}}^P = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix};$$

2. С использованием элементарных алгебраических преобразований (умножение матрицы на константу, сложение строк) расширенную матрицу приводят к виду:

$$\overline{\overline{A}}^P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & x_1 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & x_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & x_n \end{bmatrix},$$

вследствие чего ее последний столбец представляет собой вектор решения системы.

Решение системы линейных алгебраических уравнений итерационными методами, в отличие от вышеприведенных, требует оценки точности полученного на каждой следующей итерации приближения к решению. В выполняемой работе данная оценка осуществляется с использованием евклидовой нормы.

Норма – величина, которая характеризует удаленность данного вектора (матрицы) от нулевого вектора (матрицы) такого же размера. Евклидова норма некоторой произвольно взятой матрицы $\overline{\overline{A}}$ размера $m \times n$ определяется по соотношению (4.2):

$$\|\overline{\overline{A}}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2}, \quad (4.2)$$

Метод простых итераций заключается в преобразовании исходной системы (4.1) к итерационной форме:

$$\vec{x} = \overline{\overline{C}} \cdot \vec{x} + \vec{d}, \quad (4.3)$$

где в матрице $\overline{\overline{C}}$ и векторе \vec{d} :

$$c_{ij} = \begin{cases} 0, i = j; \\ -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, i \neq j; \end{cases} \quad d_i = \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad \forall i = \overline{1, n}; j = \overline{1, n},$$

и нахождении последовательности приближений векторов независимой переменной к решению на каждом шаге по аналогичным значениям, полученным на предыдущем шаге итераций:

$$\begin{cases} x_1^{(k)} = c_{11}x_1^{(k-1)} + c_{12}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{1n}x_n^{(k-1)} + d_1; \\ x_2^{(k)} = c_{21}x_1^{(k-1)} + c_{22}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{2n}x_n^{(k-1)} + d_2; \\ \dots \\ x_n^{(k)} = c_{n1}x_1^{(k-1)} + c_{n2}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{nn}x_n^{(k-1)} + d_n. \end{cases} \quad (4.4)$$

Достаточным условием сходимости данного метода является выполнение следующего условия:

$$\|\overline{\overline{C}}\| < 1.$$

С целью выполнения данного условия необходимо предварительно преобразовать (переставить местами, умножить на константу, сложить) уравнения исходной системы (4.1) таким образом, чтобы на главной диагонали матрицы коэффициентов находились максимальные по абсолютному значению величины.

Фактически же при решении системы методом простых итераций необходимо, чтобы на каждом шаге итерации k соблюдалось условие:

$$\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{(k-1)}\| < \|\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^{(k-2)}\|. \quad (4.5)$$

Цикл итераций повторяют до выполнения условия окончания:

$$\|\vec{b} - \overline{\overline{A}} \cdot \vec{x}^{(k)}\| \leq \varepsilon, \quad (4.6)$$

где ε – заданная точность решения системы.

Сходимость решения не зависит от выбранного начального приближения, однако чем точнее начальное приближение, тем быстрее будет получено решение.

Следует отметить, несмотря на то, что метод не является точным, точностью получаемого решения можно управлять, задавая ее изначально.

Реализация метода простых итераций в MS Excel может быть осуществлена непосредственно в матричной форме с использованием выражения (4.3).

Отличие **метода Гаусса–Зейделя** от предыдущего заключается в том, что при расчете вектора приближений независимой переменной к решению на каждом шаге итерации, кроме полученных на предыдущем шаге ($x_i^{(k-1)}$), используют также уже известные значения переменных, найденные на текущем шаге итерации ($x_i^{(k)}$). Таким образом, система (4.4) преобразуется к виду:

$$\begin{cases} x_1^{(k)} = c_{11}x_1^{(k-1)} + c_{12}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{1n}x_n^{(k-1)} + d_1; \\ x_2^{(k)} = c_{21}x_1^{(k-1)} + c_{22}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{2n}x_n^{(k-1)} + d_2; \\ \dots \\ x_n^{(k)} = c_{n1}x_1^{(k-1)} + c_{n2}x_2^{(k-1)} + \dots + c_{nn}x_n^{(k-1)} + d_n. \end{cases} \quad (4.7)$$

Необходимое и достаточное условия сходимости, а также условие окончания вычислительной процедуры такие же, как в методе простых итераций, однако благодаря использованной модификации количество итераций, требуемых для достижения заданной точности, уменьшается.

Реализация метода Гаусса–Зейделя в MS Excel непосредственно в матричной форме с использованием выражения (4.3) затруднена ввиду использования на каждом шаге смешанного вектора приближения независимых переменных к решению. В этой связи целесообразно проводить поэлементный расчет вектора $\vec{x}^{(k)}$.

4.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах решения систем линейных алгебраических уравнений, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного решения систем линейных алгебраических уравнений.

Задача. Решить различными численными методами систему линейных алгебраических уравнений с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты в табличной и графической формах, провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на скорость решения системы уравнений.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и численным методам решения систем линейных алгебраических уравнений.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (таблица) с матрицей коэффициентов и вектором свободных членов системы.

Варианты задания для работы 2

№ варианта	Коэффициенты системы	Свободные члены	Вариант метода для п. 4	Вариант метода для п. 5	Начальное приближение для итерационного метода
1	-4,5 0,0 13,0 -2,7 -6,5 -11,3 1,5 19,2 2,4 20,2 7,0 10,6 13,8 -2,1 -1,7 -5,3	26,36 126,80 -9,92 -19,42	К	ПИ	-0,8 -1,4 2,0 -0,8
2	-1,6 5,8 12,6 6,9 14,9 8,7 -0,1 -7,9 -1,1 -2,1 -3,5 7,4 11,1 17,0 1,0 -10,4	-19,78 83,08 9,02 100,67	ОМ	ГЗ	2,2 -1,8 -1,3 -1,6
3	-0,7 12,0 -6,4 -6,9 13,2 10,9 -4,4 -10,0 -3,3 10,1 11,6 19,3 -2,2 -9,0 13,5 9,7	-39,46 7,08 -91,50 31,64	ЖГ	ПИ	-1,7 0,3 -0,9 -0,6
4	6,5 10,3 8,5 -4,4 19,7 19,1 -11,3 3,5 -12,5 13,0 -12,7 2,2 12,6 25,1 -5,4 -2,9 10,7 3,5 -7,4 -0,8 0,3 1,7 11,7 7,2 -8,1	20,92 75,47 -47,08 -62,19 -62,34	К	ГЗ	-1,5 -0,9 2,5 2,2 0,1
5	1,4 19,2 7,6 -9,4 17,6 -10,2 1,5 -9,6 12,4 -0,6 17,2 -8,0 2,2 -8,9 -0,7 14,8	-97,96 125,67 -3,56 23,77	ОМ	ПИ	-0,1 0,9 -1,9 0,4
6	-1,2 6,6 2,5 6,0 -1,0 2,3 -2,6 0,5 7,1 -1,8 8,2 -4,1 -5,0 2,1 -0,6 -8,9 -9,7 14,0 5,8 -2,3 -8,3 0,2 -7,9 11,3 15,3	8,61 4,72 22,28 -50,02 -49,55	ЖГ	ГЗ	1,4 -0,4 -2,5 -1,8 1,0

3. На Листе 1 привести исходную систему линейных алгебраических уравнений в соответствии с данными, указанными в выданном варианте задания. Привести исходные матрицу коэффициентов и вектор свободных членов. Преобразовать их для решения одним из итерационных методов: получить максимальные диагональные элементы в каждой строке и значения элементов итерационной формы (4.3).

4. На Листе 2 представить решение системы линейных алгебраических уравнений одним из точных методов в соответствии с полученным вариантом задания:

- Крамера (К);
- обратной матрицы (ОМ);
- Жордана–Гаусса (ЖГ).

5. На Листе 3 со значениями точности 0,1, 0,02, 0,005, 0,001 получить решения системы линейных алгебраических уравнений одним из итерационных методов в соответствии с полученным вариантом задания:

- простых итераций (ПИ);
- Гаусса–Зейделя (ГЗ).

6. На Листе 4 построить столбчатую диаграмму, иллюстрирующую зависимость количества итераций, требуемых для достижения заданной точности, от самой точности. Сделать вывод по рисунку.

7. На Листе 5 построить график изменения всех элементов вектора решения системы от номера итерации при значении точности 0,1.

8. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Запишите систему линейных алгебраических уравнений в матричной форме.

2. Какие вы знаете группы методов решения систем линейных алгебраических уравнений? Какие методы входят в эти группы?

3. Перечислите этапы алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений одним из прямых (точных) методов:

- Крамера;
- обратной матрицы;

– Жордана–Гаусса.

4. Какова может быть погрешность решения системы линейных алгебраических уравнений прямыми методами?

5. Как рассчитываются определители квадратных матриц 2×2 , 3×3 ?

6. Какие элементарные алгебраические преобразования используются для приведения исходной системы уравнений к требуемому виду в методах Жордана–Гаусса, простых итераций и Гаусса–Зейделя?

7. Перечислите этапы алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений методом простых итераций.

8. В чем заключается модификация Гаусса–Зейделя метода простых итераций?

9. Каковы достаточное и необходимое условия сходимости решения системы линейных алгебраических уравнений методами простых итераций и Гаусса–Зейделя?

10. Как обеспечивается достаточное условие сходимости методов простых итераций и Гаусса–Зейделя?

11. Как рассчитывается евклидова норма вектора?

4.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 2. В приведенном примере требуется решить систему линейных алгебраических уравнений с использованием табличного процессора MS Excel методами обратной матрицы и простых итераций. Система линейных алгебраических уравнений с заданными коэффициентами представлена на Листе 1 (рис. 4.1).

Кроме того, на Листе 1 представлены матрица коэффициентов и вектор свободных членов, их вид в результате преобразования и приведения к итерационной форме.

Основные этапы поиска решения системы линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы оформляются на Листе 2, как показано на рис. 4.2.

На Листе 3 (рис. 4.3) показаны основные этапы поиска решения системы методом простых итераций. Проверка достижения требуемой точности ведется по последней строке таблицы (№ 17).

Работа 2

$$\begin{cases} 2,5x_1 + 12,1x_2 + 8,6x_3 - 5,3x_4 + 9x_5 = 25,31 \\ 8,7x_1 - 1,4x_2 + 0,9x_3 + 3,6x_4 + 5,1x_5 = 65,4 \\ -0,5x_1 - 2,2x_2 + 11,9x_3 - 1,7x_4 - 5,8x_5 = 14,45 \\ -3x_1 + 10,6x_2 - 1,7x_3 + 1,2x_4 + 16x_5 = 35,88 \\ 14,8x_1 + 13x_2 + 0,6x_3 + 22,9x_4 + 4,5x_5 = 100,43 \end{cases}$$

$\bar{A} =$	2,5	12,1	8,6	-5,3	9,0	$\vec{b} =$	25,31
	8,7	-1,4	0,9	3,6	5,1		65,40
	-0,5	-2,2	11,9	-1,7	-5,8		14,45
	-3,0	10,6	-1,7	1,2	16,0		35,88
	14,8	13,0	0,6	22,9	4,5		100,43
$\overline{A}_{пр} =$	8,7	-1,4	0,9	3,6	5,1	$\vec{b}_{пр} =$	65,40
	2,5	12,1	8,6	-5,3	9,0		25,31
	-0,5	-2,2	11,9	-1,7	-5,8		14,45
	14,8	13,0	0,6	22,9	4,5		100,43
	-3,0	10,6	-1,7	1,2	16,0		35,88
$\bar{C} =$	0,000	0,161	-0,103	-0,414	-0,586	$\vec{d} =$	7,517
	-0,207	0,000	-0,711	0,438	-0,744		2,092
	0,042	0,185	0,000	0,143	0,487		1,214
	-0,646	-0,568	-0,026	0,000	-0,197		4,386
	0,188	-0,663	0,106	-0,075	0,000		2,243

Лист1 Лист2 Лист3 Лист4 Лист5

Рис. 4.1. Пример представления исходной системы уравнений и результатов ее преобразования для дальнейшего использования в численных методах

Работа 2

Метод обратной матрицы

$\bar{A} =$	2,5	12,1	8,6	-5,3	9,0	$\vec{b} =$	25,31
	8,7	-1,4	0,9	3,6	5,1		65,40
	-0,5	-2,2	11,9	-1,7	-5,8		14,45
	-3,0	10,6	-1,7	1,2	16,0		35,88
	14,8	13,0	0,6	22,9	4,5		100,43
$\overline{A^{-1}} =$	0,0590	0,0629	-0,0583	-0,0753	0,0034	$\vec{x} =$	2,4
	0,0686	-0,0818	-0,0502	-0,0383	0,0270		-3,0
	-0,0096	0,0198	0,0943	0,0333	-0,0001		3,6
	-0,0709	-0,0082	0,0583	0,0552	0,0300		3,5
	-0,0301	0,0687	0,0280	0,0732	-0,0195		4,8

Лист1 Лист2 Лист3 Лист4 Лист5

Рис. 4.2. Табличное отображение основных этапов решения системы линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы

Метод простых итераций											
$\vec{C} =$	0,000	0,161	-0,103	-0,414	-0,586	$\vec{d} =$	7,517	$\vec{x}^0 =$	-1,1		
	-0,207	0,000	-0,711	0,438	-0,744		2,092		-1,4		
	0,042	0,185	0,000	0,143	0,487		1,214		-0,8		
	-0,646	-0,568	-0,026	0,000	-0,197		4,386		1,0		
	0,188	-0,663	0,106	-0,075	0,000		2,243		-2,0		
№ итерации (k)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_1	-1,1000	8,1333	4,0311	8,8488	4,5003	2,9007	2,7520	0,6977	1,5762	1,6652	1,8871
x_2	-1,4000	4,8132	1,0327	-3,9963	-2,3397	-5,3959	-4,5050	-3,5670	-3,7842	-2,6051	-2,7004
x_3	-0,8000	0,0773	4,7131	1,0364	2,5209	4,2202	2,9247	4,4066	3,9088	3,6542	3,9265
x_4	1,0000	6,3052	-4,1563	1,0482	0,2938	1,4461	4,5041	3,7710	4,7209	4,4456	3,6891
x_5	-2,0000	2,8038	0,1141	3,1267	6,5807	4,8822	6,7011	5,7160	4,9218	5,1063	4,3355
$\ \vec{x}^k - \vec{x}^{k-1}\ $		13,2608	13,0111	9,9087	6,0297	4,3589	3,8929	2,9671	1,6124	1,2541	1,1397
$\ \vec{b} - \vec{A}\vec{x}^k\ $	181,3318	256,2316	154,6012	74,1472	58,3524	78,1451	35,9093	27,1122	16,1799	21,6277	9,1947

Рис. 4.3. Табличное отображение основных этапов решения системы линейных алгебраических уравнений методом простых итераций

Примеры графического представления результатов решения системы линейных уравнений приведены на рис. 4.4 и 4.5.

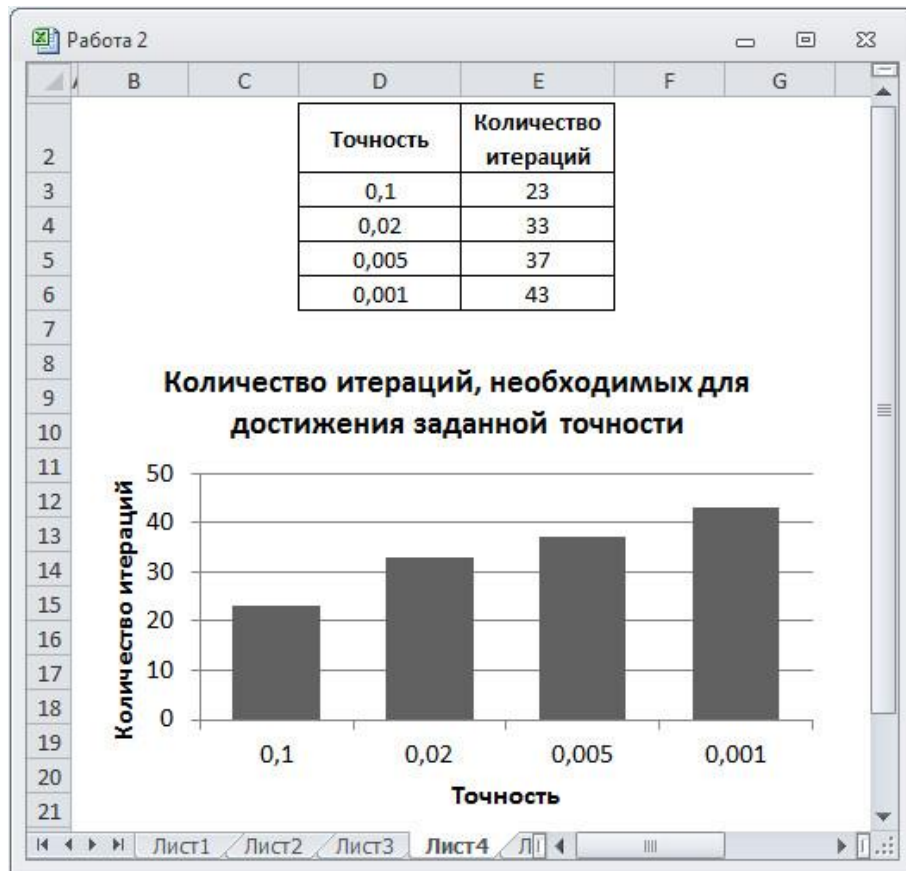


Рис 4.4. Иллюстрация зависимости количества итераций от точности

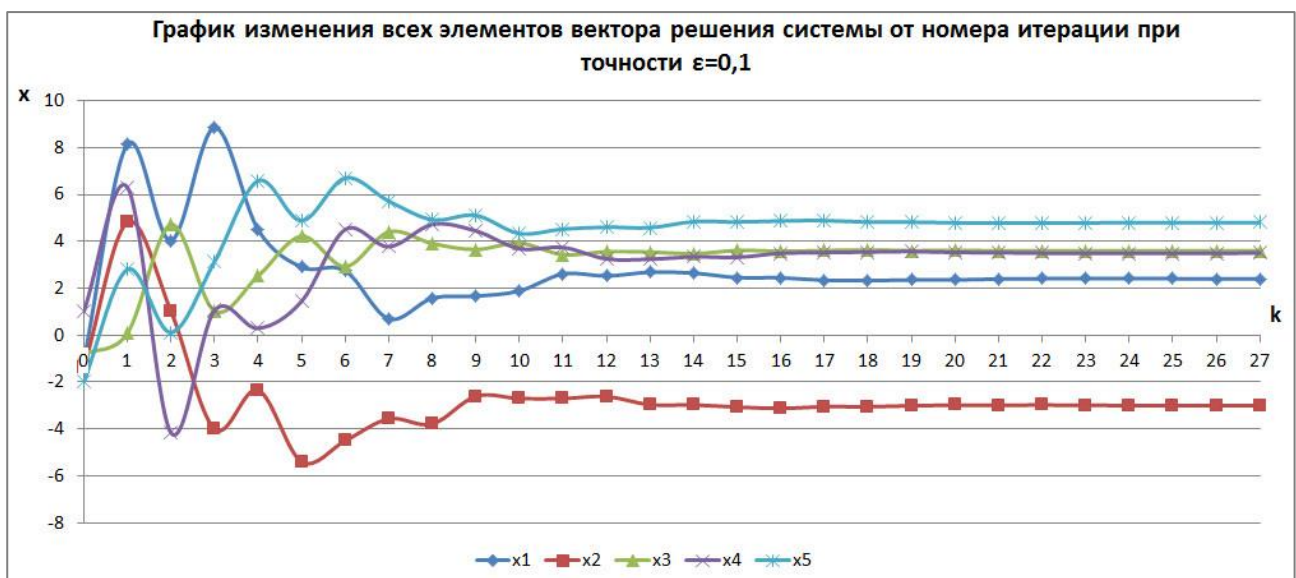


Рис 4.5. Пример графика изменения элементов вектора решения в процессе итераций

На рис. 4.4 показан пример оформления Листа 4 со столбчатой диаграм-

мой, иллюстрирующей зависимость количества итераций, требуемых для достижения заданной точности, от самой точности. По данному рисунку делается вывод о влиянии требуемой точности решения на объем вычислений.

На Листе 5 формируется график изменения всех элементов вектора решения системы в зависимости от номера итерации при использовании точности 0,1 (рис. 4.5). По графику делаются выводы о взаимном влиянии значений независимых переменных в ходе итерационной процедуры.

5. Работа 3. Численное решение систем нелинейных алгебраических уравнений в Microsoft Excel

5.1. Численные методы и алгоритмы решения систем нелинейных алгебраических уравнений

Система нелинейных алгебраических уравнений может быть записана в виде:

$$\vec{f}(\vec{x}) = 0, \quad (5.1)$$

где $\vec{f}(\vec{x})$ – множество нелинейных функциональных зависимостей размера n от вектора независимых переменных \vec{x} такого же размера.

При выполнении лабораторной работы 3 средствами табличного процессора MS Excel для решения системы нелинейных алгебраических уравнений используются методы простых итераций, Гаусса–Зейделя и Ньютона–Рафсона (простой и модифицированный).

При решении **методом простых итераций** исходная система (5.1) преобразуется к итерационной форме:

$$\vec{x} = \vec{\varphi}(\vec{x}). \quad (5.2)$$

Таким образом, на каждом шаге итерации k ведется пересчет приближения элементов вектора независимых переменных к решению системы по схеме:

$$x_i^{(k)} = \varphi(x_i^{(k-1)}) \forall i = \overline{1, n}.$$

Для сходимости метода необходимо выполнение условия (4.5), аналогичного используемому при решении систем линейных алгебраических уравнений.

В качестве условия окончания итерационной процедуры можно использовать:

$$\|\vec{f}(\vec{x})\| \leq \varepsilon,$$

где ε – заданная точность решения системы.

Как и при решении систем линейных алгебраических уравнений, в нелинейных системах можно использовать **модификацию Гаусса–Зейделя**, заключающуюся в подстановке в итерационную формулу (5.2) части элементов вектора независимых переменных, найденных на текущем шаге итераций, в дополнение к элементам, известным после последней полной итерации. Благодаря данной модификации сходимость метода ускоряется.

В отличие от систем линейных алгебраических уравнений, в этом случае выбор начального приближения может повлиять на полученное решение, поскольку таких решений у системы нелинейных уравнений может быть несколько.

В основе **метода Ньютона–Рафсона** лежит расчет матрицы, обратной матрице частных производных (матрице Якоби). Итерационная формула данного метода следующая:

$$\vec{x}^{(k)} = \vec{x}^{(k-1)} - \lambda \left[\frac{\partial \vec{f}(\vec{x}^{(0)})}{\partial \vec{x}} \right]^{-1} \cdot \vec{f}(\vec{x}^{(k-1)}),$$

где λ – параметр, влияющий на скорость сходимости итерационной процедуры. Его значение принимается равным числу из интервала $(0, 1)$ и, как правило, подбирается экспериментально для комбинации конкретной системы уравнений и начального приближения.

Необходимое условие сходимости метода и условие окончания вычислительного процесса те же, что и в предыдущих методах.

Модификация метода Ньютона–Рафсона предусматривает расчет матрицы Якоби $[\partial \vec{f}(\vec{x}^{(k)}) / \partial \vec{x}]$ и обратной ей на каждом шаге итераций k для вновь полученного приближения вектора независимых переменных к решению. Это значительно увеличивает объем производимых вычислений, однако количество самих итераций заметно уменьшается.

По сути методы Ньютона–Рафсона аналогичны методу Ньютона, описанному в главе 3, с той разницей, что вместо одного уравнения решается их система, а вместо производной используется матрица частных производных. Отсюда и аналогичные вычислительные проблемы, которые могут быть решены как выбором другого начального приближения, так и варьированием параметра λ .

5.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах решения систем нелинейных алгебраических уравнений, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений.

Задача. Решить одним из численных методов систему нелинейных алгебраических уравнений с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты в табличной и графической формах, провести исследование и сделать выводы о влиянии выбора начального приближения и требуемой точности на скорость решения системы.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса преподавателя по общей теории и численным методам решения систем нелинейных алгебраических уравнений.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (таблица) с коэффициентами системы уравнений вида:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_1 + x_2 \sin(a_2 x_3) = 0, \\ b_0 + b_1 x_2 + x_3 \sin(b_2 x_1) = 0, \\ c_0 + c_1 x_3 + x_1 \sin(c_2 x_2) = 0, \end{cases}$$

начальным приближением и требуемым методом ее решения.

3. На Листе 1 привести исходные данные для решения системы нелинейных алгебраических уравнений в соответствии с полученным вариантом задания. При необходимости задать и указать значение используемого параметра численного метода.

4. На Листе 2 представить решение системы нелинейных алгебраических уравнений со значениями точности 0,1, 0,02, 0,005, 0,001 методом, указанным в варианте задания, из следующего списка:

- простых итераций (ПИ);
- Гаусса–Зейделя (ГЗ);
- Ньютона–Рафсона (НР);
- Ньютона–Рафсона модифицированный (НРМ).

5. На Листе 3 построить график зависимости количества итераций, сделанных заданным методом, от выбранной точности решения, взятой в логарифмической шкале. Сделать выводы по графику.

Варианты задания для работы 3

№ варианта	a_0	a_1	a_2	b_0	b_1	b_2	c_0	c_1	c_2	\vec{x}_0	Метод решения
1	0,52	0,27	−0,33	1,37	−2,04	−0,33	2,21	2,95	−0,16	−0,3, 2,8, −3,5	ПИ
2	0,27	−2,29	0,32	0,53	1,80	0,26	0,20	−0,49	0,06	−3,4, −3,2, 3,5	ГЗ
3	5,56	2,45	−0,09	4,94	−1,54	−0,27	−1,12	0,21	−0,23	0,7, −1,2, −5,0	НР
4	−0,14	−0,18	0,15	1,47	1,60	−0,30	4,10	−2,06	−0,16	−1,0, 2,3, −1,2	НРМ
5	4,65	−2,80	0,32	−0,19	0,22	−0,19	5,09	2,27	0,08	4,8, −0,3, −4,2	ПИ
6	8,25	2,83	−0,11	1,98	−2,20	0,16	−0,09	−0,19	−0,08	0,2, 2,4, 2,1	ГЗ
7	−6,21	−2,69	−0,12	1,73	2,05	−0,27	0,59	0,30	−0,32	−0,4, −3,4, 3,2	НР
8	0,34	−0,31	−0,28	1,39	−1,98	−0,10	−4,63	2,57	−0,33	−2,7, −0,9, 4,3	НРМ
9	4,04	2,81	0,17	5,33	−2,14	−0,32	0,83	0,42	0,14	1,4, 3,8, −3,0	ПИ
10	−4,66	1,51	0,14	−0,63	0,18	−0,13	−4,66	−2,38	−0,09	−0,1, −2,2, −3,9	ГЗ
11	−1,16	0,43	0,31	4,37	−2,24	0,25	0,91	1,62	−0,27	5,8, 5,4, −3,0	НР
12	−2,29	−1,75	−0,06	1,91	1,95	−0,10	−0,38	0,42	0,20	2,3, −2,6, −2,5	НРМ
13	2,28	−2,94	0,26	−0,95	0,35	0,07	5,97	2,42	0,15	−1,4, 0,7, −4,3	ПИ
14	0,36	1,63	−0,32	2,50	−2,73	−0,08	0,95	−0,34	−0,17	−2,4, −3,1, 4,9	ГЗ
15	7,99	−2,95	−0,23	1,14	−0,28	−0,31	−0,08	1,59	−0,10	0,3, 5,4, 4,0	НР
16	−1,24	−2,21	−0,14	0,34	0,42	0,17	5,07	2,83	−0,29	−2,7, 1,2, −4,7	НРМ
17	2,36	−2,29	0,27	−2,05	1,94	−0,31	−0,29	−0,12	0,28	3,4, 3,3, 3,2	ПИ
18	0,74	0,24	−0,15	6,65	−2,77	−0,12	−6,09	2,90	0,08	−3,6, 0,3, −0,7	ГЗ
19	2,45	2,23	0,14	−0,36	−2,35	−0,11	−0,39	0,13	−0,21	0,6, 1,6, 6,7	НР
20	−3,07	2,66	−0,24	2,41	−2,11	−0,23	0,33	0,35	−0,12	4,4, −1,7, −2,8	НРМ
21	−0,43	1,51	−0,25	−1,72	−0,23	−0,30	−4,70	−1,88	0,10	−1,2, −0,8, −4,3	ПИ
22	−5,42	−2,54	0,20	−0,36	0,48	−0,25	2,03	1,79	0,32	−5,6, −0,7, 2,4	ГЗ
23	−2,17	2,83	−0,11	5,01	−2,47	−0,31	−0,66	−0,40	0,24	−1,8, 3,8, −4,5	НР
24	3,15	0,48	−0,32	−4,97	−1,99	−0,14	3,17	1,74	0,06	0,3, 0,3, 0,9	НРМ

6. На Листе 4 построить график изменения всех элементов вектора решения системы от номера итерации при значении точности 0,1.

7. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Что называется системой нелинейных алгебраических уравнений?
2. Какие вы знаете методы решения систем нелинейных алгебраических уравнений?
3. Перечислите этапы алгоритма решения системы нелинейных алгебраических уравнений одним из методов:
 - простых итераций;
 - Ньютона–Рафсона.
4. В чем заключается отличие метода Гаусса–Зейделя от метода простых итераций при решении системы нелинейных алгебраических уравнений?
5. В чем заключается отличие методов Ньютона–Рафсона и его модификации при решении системы нелинейных алгебраических уравнений?
6. Что представляет собой матрица Якоби?
7. Каково необходимое условие сходимости численных методов решения систем нелинейных алгебраических уравнений?
8. Проведите аналогию и укажите разницу между методом Ньютона–Рафсона для решения систем уравнений и методом Ньютона для решения одних уравнений.
9. Каким образом можно регулировать сходимость решения системы нелинейных уравнений методом Ньютона–Рафсона?
10. Может ли выбор начального приближения повлиять:
 - на вариант полученного решения;
 - на сходимость выбранного метода?
11. Как влияет выбор начального приближения на скорость сходимости используемого численного метода решения системы нелинейных уравнений?

5.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

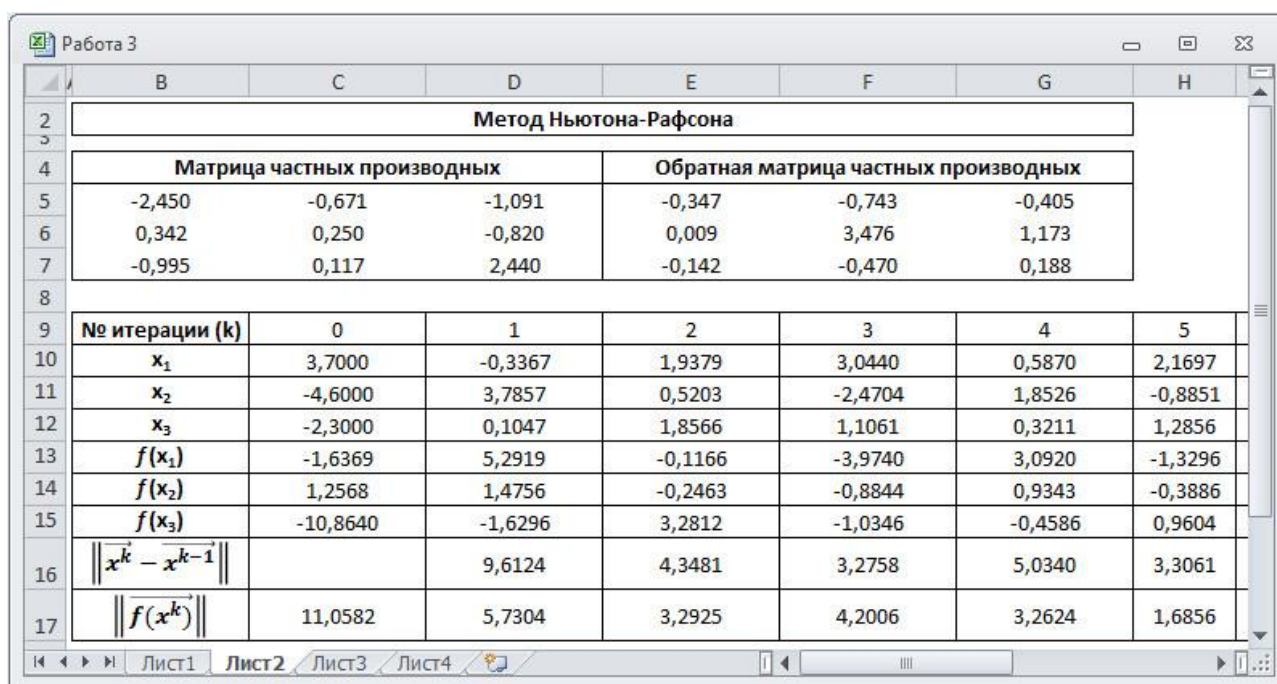
Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 3 на следующем примере. Требуется найти решение системы нелинейных алгебраических уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} 4,34 - 2,45x_1 + x_2 \sin(0,32x_3) = 0, \\ 0,52 + 0,25x_2 + x_3 \sin(-0,26x_1) = 0, \\ -1,57 + 2,44x_3 + x_1 \sin(0,32x_2) = 0 \end{cases}$$

методом Ньютона–Рафсона.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные по образцу, представленному на рис. 3.4 для лабораторной работы 1.

Основные этапы поиска решения системы нелинейных алгебраических уравнений методом Ньютона–Рафсона представляются на Листе 2 в табличной форме, как показано на рис. 5.1. Проверка достижения требуемой точности ведется по последней строке таблицы (№ 17).



Метод Ньютона-Рафсона							
Матрица частных производных				Обратная матрица частных производных			
	-2,450	-0,671	-1,091	-0,347	-0,743	-0,405	
	0,342	0,250	-0,820	0,009	3,476	1,173	
	-0,995	0,117	2,440	-0,142	-0,470	0,188	
№ итерации (k)	0	1	2	3	4	5	
x ₁	3,7000	-0,3367	1,9379	3,0440	0,5870	2,1697	
x ₂	-4,6000	3,7857	0,5203	-2,4704	1,8526	-0,8851	
x ₃	-2,3000	0,1047	1,8566	1,1061	0,3211	1,2856	
f(x ₁)	-1,6369	5,2919	-0,1166	-3,9740	3,0920	-1,3296	
f(x ₂)	1,2568	1,4756	-0,2463	-0,8844	0,9343	-0,3886	
f(x ₃)	-10,8640	-1,6296	3,2812	-1,0346	-0,4586	0,9604	
x ^k - x ^{k-1}		9,6124	4,3481	3,2758	5,0340	3,3061	
f(x ^k)	11,0582	5,7304	3,2925	4,2006	3,2624	1,6856	

Рис. 5.1. Табличное представление основных этапов поиска решения системы нелинейных алгебраических уравнений методом Ньютона–Рафсона

На Листе 3 оформляется график зависимости количества итераций от точности полученного решения и приводятся данные, необходимые для его построения (рис. 5.2). Делается вывод о влиянии выбранной точности на количе-

ство шагов, которое следует выполнить для ее достижения.

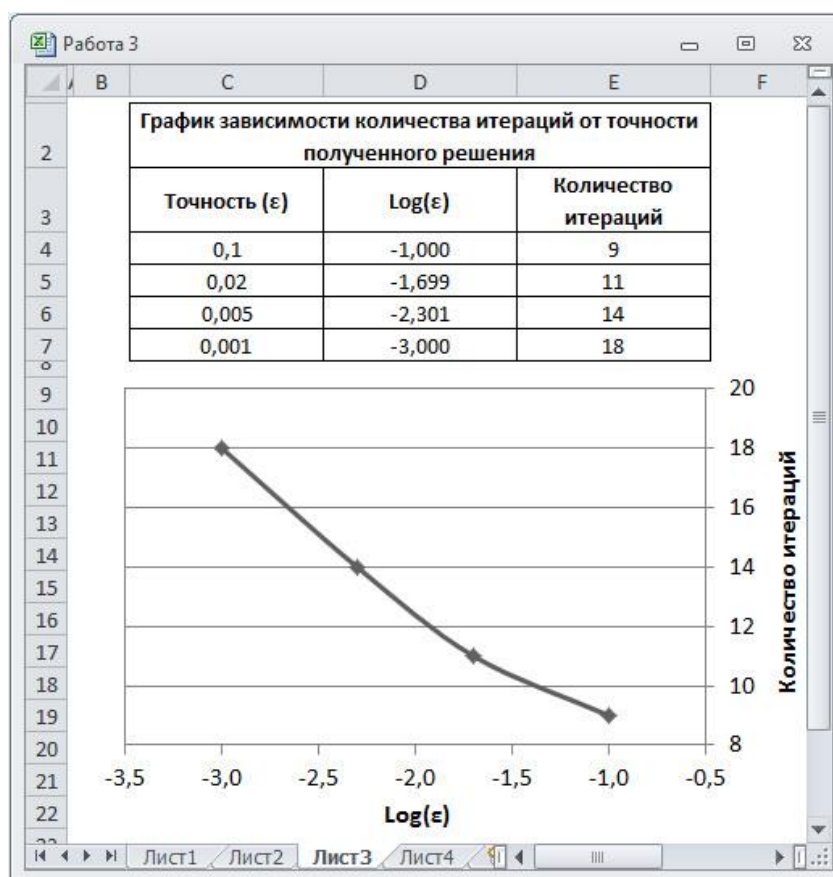


Рис. 5.2. Пример оформления графика зависимости количества сделанных итераций от точности полученного результата

По образцу (рис. 4.5) для лабораторной работы 2, оформляется график изменения значений элементов вектора решения системы от номера итерации. Делаются выводы о взаимном влиянии значений независимых переменных в ходе итерационной процедуры.

6. Работа 4. Интерполирование экспериментальных зависимостей в Microsoft Excel

6.1. Основные понятия и расчетные соотношения для интерполирования экспериментальных зависимостей

Задача интерполирования экспериментальных данных ставится следующим образом (рис. 6.1). Имеется функциональная зависимость вида $y = F(x)$,

полученная в ходе экспериментальных наблюдений и заданная в табличной форме $n + 1$ парами значений, называемыми **узлами интерполяции** (M_i).

При решении задачи интерполирования требуется найти интерполирующую функцию известного класса $y = f(x)$, принимающую в узлах интерполяции те же значения, что были получены в ходе экспериментальных наблюдений. Геометрически это означает, что требуется найти определенного типа кривую $y = f(x)$, проходящую через заданную систему узловых точек, принадлежащих множеству $\{M_0, ..., M_n\}$.

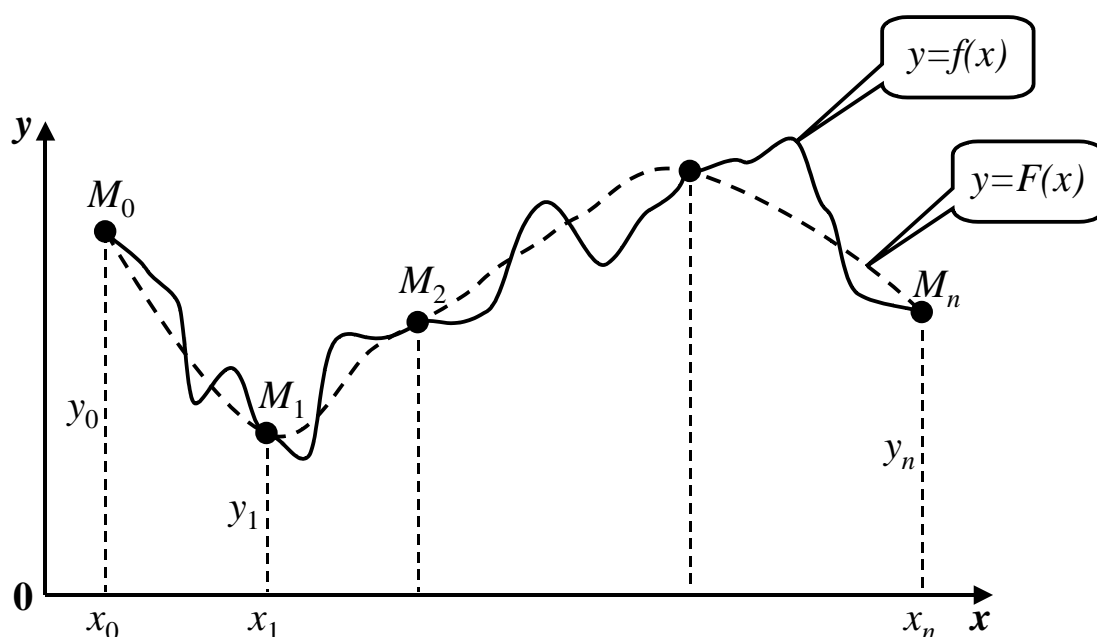


Рис. 6.1. Графическая иллюстрация задачи интерполирования

В данной постановке задача может иметь бесчисленное множество решений. Однако она становится однозначно определенной, если искать вместо произвольной функции полином степени m . В общем виде полиномиальная функция записывается как:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m$$

или свернуто:

$$y = \sum_{j=0}^m a_j x^j.$$

Частными случаями решения такой задачи являются функция вида $y = \text{const}$ (полином нулевой степени), который можно получить, зная лишь один узел интерполяции, или линейная функция $y = a_0 + a_1x$ (полином 1-й степени), получающийся из двух узловых точек. В общем случае для получения интерпо-

ляционного полинома степени m необходимо выбрать $m + 1$ узел интерполяции из имеющегося множества $\{M_0, \dots, M_n\}$.

Таким образом, **задача интерполирования** сводится к получению достаточно простой интерполяционной функции $y = f(x)$, совпадающей в использованных для этого узлах интерполяции с известными экспериментальными значениями, а в остальных точках приближенно описывающей неизвестную закономерность с удовлетворительной точностью.

Принято говорить собственно об **интерполяции**, когда ведется поиск значений функции, описывающей данные, в точках, находящихся внутри экспериментального интервала изменения независимой переменной (x_0, x_n) и не являющихся узлами интерполяции. В то же время, говорят об **экстраполяции**, если ведется поиск аналогичных значений за пределами отрезка $[x_0, x_n]$.

Подбор степени интерполяционного полинома можно осуществить на основе информации о конечных разностях различных порядков.

Пусть $y = F(x)$ – функция, заданная в виде множества полученных экспериментально узлов интерполяции, причем все ее значения (y_i) получены в равноотстоящих друг от друга точках (x_i) :

$$x_{i+1} - x_i = \Delta x = \text{const}, \quad \forall i = \overline{0, n-1}.$$

Тогда выражения $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i, \quad \forall i = \overline{0, n-1}$ называются **конечными разностями первого порядка**. Очевидно, если узлов интерполяции $n + 1$, то количество конечных разностей первого порядка n .

На основе информации о конечных разностях более низкого порядка определяются конечные разности более высоких порядков (m):

$$\Delta^m y_i = \Delta^{m-1} y_{i+1} - \Delta^{m-1} y_i, \quad \forall i = \overline{0, n-m}.$$

Таким образом, при $n + 1$ узлах интерполяции максимально возможная величина порядка конечной разности равна n , однако для определения наиболее подходящей степени интерполяционного полинома достаточно рассчитать и проанализировать конечные разности вплоть до порядка $n - 1$.

Конечные разности различных порядков удобно записывать в виде **диагональной таблицы конечных разностей** (табл. 6.1).

Конечные разности позволяют составить впечатление о важной для интерполяции «степени гладкости» рассматриваемой функции $y = F(x)$.

Выбор степени интерполяционного полинома основывается на следую-

щем правиле: она должна совпадать с порядком практически постоянных (в пределах точности полученных экспериментальных значений) конечных разностей. Для использования этого правила достаточно оценить величину разности между максимальным и минимальным значениями конечных разностей каждого порядка:

$$d_j = \max_i \{\Delta^j y_i\} - \min_i \{\Delta^j y_i\}.$$

Таблица 6.1

Диагональная таблица конечных разностей

x	y	Δy	$\Delta^2 y$...	$\Delta^j y$...	$\Delta^{n-1} y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$...	$\Delta^j y_0$...	$\Delta^{n-1} y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$...	$\Delta^j y_1$...	$\Delta^{n-1} y_1$
x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$	
x_3	y_3	Δy_3	$\Delta^2 y_3$...	$\Delta^j y_i$...	
...	
x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$...	$\Delta^j y_{n-i}$		
x_{i+1}	y_{i+1}	Δy_{i+1}			
...	Δy_{n-2}				
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-1}					
x_n	y_n						
		d_1	d_2	...	d_j	...	d_{n-1}

Порядок m с наименьшим разбросом d_m в значениях конечных разностей указывает на искомую степень интерполяционного полинома.

Качество решения задачи интерполирования можно оценить по величине среднеквадратичной ошибки, рассчитанной во всех известных узлах интерполяции или тех узлах, которые не использовались для получения интерполяционного полинома:

$$E = \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n (y_i - f(x_i))^2}.$$

Расчет интерполяционного полинома может быть выполнен с использованием формул Лагранжа или Ньютона.

Интерполяционный полином Лагранжа степени m записывается в виде:

$$f_m(x) = \sum_{i=0}^m y_i \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_1) \cdot \dots \cdot (x-x_{i-1}) \cdot (x-x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x-x_m)}{(x_i-x_0) \cdot (x_i-x_1) \cdot \dots \cdot (x_i-x_{i-1}) \cdot (x_i-x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x_i-x_m)}$$

или свернуто:

$$f_m(x) = \sum_{i=0}^m y_i \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^m (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^m (x_i - x_j)}.$$

Для расчета интерполяционного полинома степени m по формуле Ньютона требуется найти значения разделенных разностей вплоть до m -го порядка, для чего требуется $m + 1$ узел интерполяции.

Разделенная разность первого порядка определяется следующим образом:

$$\delta_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad \forall i = \overline{0, n-1}.$$

Разделенные разности более высоких порядков определяются на основе информации о разделенных разностях более низких порядков:

$$\delta_i^m = \frac{\delta_{i+1}^{m-1} - \delta_i^{m-1}}{x_{i+m} - x_i}, \quad \forall i = \overline{0, n-m}.$$

Разделенные разности различных порядков удобно записывать в виде **диагональной таблицы разделенных разностей** (табл. 6.2).

Таблица 6.2

Диагональная таблица разделенных разностей

x	y	δy	$\delta^2 y$...	$\delta^j y$...	$\delta^m y$
x_0	y_0	δy_0	$\delta^2 y_0$...	$\delta^j y_0$...	$\delta^m y_0$
x_1	y_1	δy_1	$\delta^2 y_1$	
x_2	y_2	δy_2	$\delta^j y_i$...	
...	$\delta^2 y_i$	
x_i	y_i	δy_i	$\delta^j y_{m-i}$		
x_{i+1}	y_{i+1}	...	$\delta^2 y_{m-2}$				
...	...	δy_{m-1}					
x_m	y_m						

Интерполяционный полином Ньютона записывается в виде:

$$f_m(x) = y_0 + \delta y_0(x - x_0) + \delta^2 y_0(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \delta^m y_0(x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{m-1})$$

или свернуто:

$$f_m(x) = y_0 + \sum_{j=1}^m \left[\delta^j y_0 \cdot \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i) \right].$$

На самом деле интерполяционные формулы Лагранжа и Ньютона представляют собой различные формы записи одной и той же зависимости. Однако формула Ньютона удобна тем, что при добавлении нового узла интерполяции все ранее найденные члены остаются без изменения и в полиноме добавляется лишь один дополнительный член. Это позволяет, последовательно добавляя по одному дополнительному узлу, при необходимости, постепенно наращивать сложность интерполирующей зависимости.

6.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний об интерполировании экспериментальных зависимостей; получение навыков численного расчета интерполирующих зависимостей с использованием различных методов.

Задача. Получить интерполирующие зависимости для полиномов различных степеней по формулам Лагранжа и Ньютона с использованием табличного процессора MS Excel. Оформить результаты расчетов в табличной и графической формах. Провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на точность описания экспериментальных данных методом интерполирования.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и особенностям описания экспериментальных данных методом интерполирования.

2. Допущенному студенту получить вариант задания с выборкой экспериментальных данных (табл. 6.3).

3. На Листе 1 рабочего файла MS Excel представить исходные данные: таблицу экспериментальных данных и рисунок с изображением соответствующих точек на координатной плоскости.

4. На Листе 2 для имеющейся экспериментальной выборки составить таблицу конечных разностей всех возможных порядков, определить оптимальную степень интерполяционного полинома.

Варианты задания для работы 4

Вариант 1			Вариант 2			Вариант 3		
№ точки	X	Y	№ точки	X	Y	№ точки	X	Y
1	−2,00	4, 2	1	−2,00	0,48	1	−2,90	15,54
2	−1,60	4,13	2	−1,50	−0,57	2	−2,60	14,49
3	−1,20	3,67	3	−1,00	−1,90	3	−2,30	13,45
4	−0,80	2,97	4	−0,50	−3,18	4	−2,00	12,82
5	−0,40	2,24	5	0,00	−4,20	5	−1,70	11,91
6	0,00	1,73	6	0,50	−5,91	6	−1,40	11,21
7	0,40	0,94	7	1,00	−7,24	7	−1,10	10,88
8	0,80	−0,05	8	1,50	−8,62	8	−0,80	10,37
9	1,20	−1,04	9	2,00	−10,30	9	−0,50	10,05
10	1,60	−1,76	10	2,50	−11,68	10	−0,20	9,9
11	2,00	−3,00				11	0,10	9,92
12	2,40	−4,18				12	0,40	9,66
						13	0,70	10,15
						14	0,95	10,21
						15	1,00	10,26
Номера точек для п. 5	1, 6, 11		Номера точек для п. 5	1, 5, 9		Номера точек для п. 5	1, 7, 13	
Номера точек для п. 6	1, 4, 9, 12		Номера точек для п. 6	1, 3, 5, 10		Номера точек для п. 6	1, 5, 10, 14	
Вариант 4			Вариант 5			Вариант 6		
№ точки	X	Y	№ точки	X	Y	№ точки	X	Y
1	−2,50	6,60	1	−3,30	20,91	1	−2,10	1,60
2	−2,15	4,95	2	−2,95	19,72	2	−1,85	2,72
3	−1,80	3,63	3	−2,60	18,27	3	−1,6	3,65
4	−1,45	2,58	4	−2,25	16,87	4	−1,35	4,59
5	−1,10	1,60	5	−1,90	15,43	5	−1,10	5,08
6	−0,75	1,03	6	−1,55	14,22	6	−0,85	6,03
7	−0,40	0,60	7	−1,20	12,59	7	−0,60	6,37
8	−0,05	0,18	8	−0,85	11,23	8	−0,35	7,03
9	0,30	0,13	9	−0,50	9,84	9	−0,10	7,40
10	0,65	0,32	10	−0,15	8,23	10	0,15	7,81
11	1,00	0,69	11	0,20	7,00	11	0,40	7,67
12	1,35	1,47	12	0,55	5,12	12	0,65	7,93
13	1,70	2,47	13	0,90	3,89	13	0,90	7,97
			14	1,25	2,14	14	1,15	8,01
						15	1,40	7,62
Номера точек для п. 5	1, 7, 13		Номера точек для п. 5	1, 7, 13		Номера точек для п. 5	1, 8, 15	
Номера точек для п. 6	1, 4, 10, 13		Номера точек для п. 6	1, 4, 7, 14		Номера точек для п. 6	1, 5, 12, 15	

5. На Листе 3 для указанного в варианте задания набора точек из экспериментальной выборки в табличной форме представить результаты интерполирования имеющихся данных полиномом 2-й степени по формуле Лагранжа. Построить график полученной зависимости. Добавить на рисунок все исходные экспериментальные точки, обозначив двумя различными цветами множество точек, собственно использованное для расчета интерполяционного полинома по формуле Лагранжа, и множество всех остальных точек.

6. На Листе 4 из указанного в варианте задания набора точек экспериментальной выборки составить таблицу разделенных разностей для интерполирования полиномом 3-й степени по формуле Ньютона. В табличной форме представить результаты данного способа интерполирования. Построить график полученной зависимости. Добавить на рисунок все исходные экспериментальные точки, обозначив двумя различными цветами множество точек, собственно использованное для расчета интерполяционного полинома по формуле Ньютона, и множество всех остальных точек.

7. На Листе 5 представить в табличной форме ход расчета среднеквадратичной ошибки интерполирования экспериментальных данных:

- во всех точках;
- только в точках, не использованных для получения интерполяционных полиномов по формулам Лагранжа и Ньютона в пунктах 5, 6.

Сравнить величины ошибок и сделать выводы.

8. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Сформулируйте постановку задачи интерполирования.
2. Что называется узлами интерполяции?
3. Что называется экстраполяцией? Что отличает ее от любой интерполяции?
4. Как определяются конечные разности различных порядков?
5. Каково обязательное требование к экспериментальным точкам, используемым для составления таблицы конечных разностей?
6. Как с помощью конечных разностей определить оптимальную степень интерполирующей зависимости?

7. Как определяются разделенные разности различных порядков?
8. Запишите в общем виде полином N -й степени.
9. Запишите в общем виде интерполяционный полином Лагранжа N -й степени.
10. Используются ли в интерполяционном полиноме Лагранжа конечные или разделенные разности?
11. Запишите в общем виде интерполяционную формулу Ньютона для получения полинома N -й степени.
12. Используются ли в интерполяционной формуле Ньютона конечные или разделенные разности?
13. Каков максимальный порядок разделенной разности, необходимой для определения интерполирующей зависимости N -й степени?
14. Какое количество точек экспериментальных данных необходимо для получения интерполирующей зависимости в виде полинома N -й степени?
15. Каковы могут быть теоретически возможные минимальное и максимальное значения степени интерполяционного полинома при наличии M точек экспериментальных данных?
16. Какое количество экспериментальных точек всегда лежит на графике интерполяционного полинома N -й степени?
17. Какое количество различных линейных фрагментов будет входить в состав интерполирующей кусочно-линейной функции, описывающей M точек экспериментальных данных?
18. Как рассчитывается среднеквадратичная ошибка

6.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 4 на следующем примере. Требуется получить интерполирующие полиномы 2-й и 3-й степеней для описания экспериментальных данных, представленных на рис. 6.2.

На Листе 1 книги MS Excel (рис. 6.2) приводится график, который отображает положение точек экспериментальных данных на координатной плоскости. Слева в таблице приведены числовые значения координат для этих точек.

На Листе 2 (рис. 6.3) для имеющейся экспериментальной выборки состав-

лена таблица конечных разностей всех возможных порядков (для 10 точек данных – вплоть до 9-го порядка) и определена оптимальная степень интерполяционного полинома (выделена цветом).

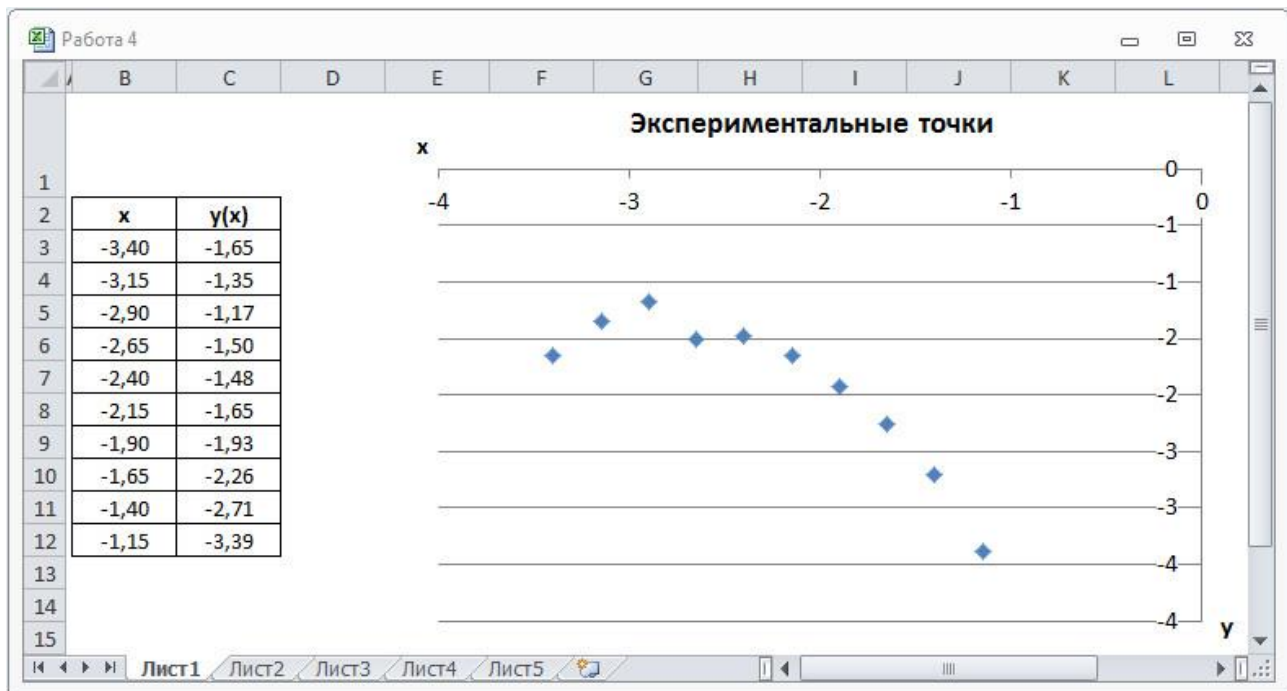


Рис. 6.2. Пример оформления исходных данных

Таблица конечных разностей										
x	y(x)	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$	$\Delta^6 y$	$\Delta^7 y$	$\Delta^8 y$	$\Delta^9 y$
-3,40	-1,65	0,30	-0,12	-0,39	1,25	-2,65	4,67	-7,33	10,52	-14,04
-3,15	-1,35	0,18	-0,51	0,86	-1,40	2,02	-2,66	3,19	-3,52	
-2,90	-1,17	-0,33	0,35	-0,54	0,62	-0,64	0,53	-0,33		
-2,65	-1,50	0,02	-0,19	0,08	-0,02	-0,11	0,20			
-2,40	-1,48	-0,17	-0,11	0,06	-0,13	0,09				
-2,15	-1,65	-0,28	-0,05	-0,07	-0,04					
-1,90	-1,93	-0,33	-0,12	-0,11						
-1,65	-2,26	-0,45	-0,23							
-1,40	-2,71	-0,68								
-1,15	-3,39									
d_m	0,98	0,86	1,40	2,65	4,67	7,33	10,52	14,04		
Оптимальная степень интерполяционного полинома										

Рис. 6.3. Пример оформления таблицы конечных разностей и основных этапов поиска оптимальной степени интерполирующего полинома

На Листе 3 (рис. 6.4) приведены результаты интерполирования данных.

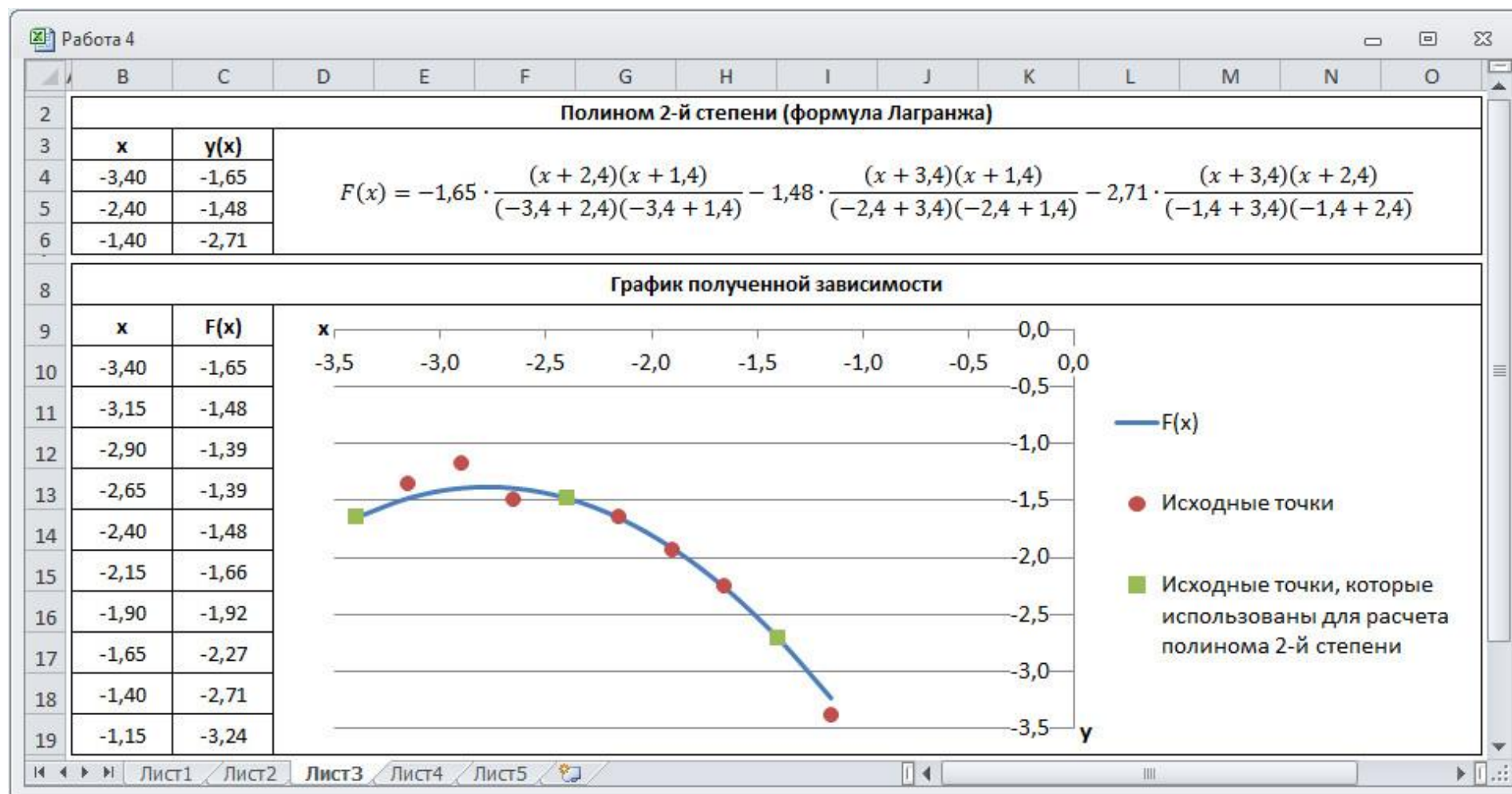


Рис. 6.4. Пример оформления результатов интерполирования данных полиномом 2-й степени и графика полученной зависимости

7. Работа 5. Аппроксимация экспериментальных зависимостей в Microsoft Excel

7.1. Основные теоретические положения полиномиальной аппроксимации экспериментальных зависимостей

Задача аппроксимации экспериментальных зависимостей ставится следующим образом. Имеется функциональная зависимость вида $y = F(x)$, полученная в ходе экспериментальных наблюдений и заданная в табличной форме $n + 1$ парами значений. Необходимо описать полученную закономерность некоторой аналитической зависимостью так, чтобы расчетные результирующие значения были максимально приближены к экспериментальным данным. Следует учесть, что поскольку исходные экспериментальные данные были получены с некоторой погрешностью, отсутствует необходимость абсолютно точного описания результирующей величины в известных точках.

Таким образом, под решением задачи **аппроксимации** экспериментальных данных понимается параметрическая идентификация математической модели (вычисление коэффициентов модели, обеспечивающих наименьшее рассогласование между экспериментальными и расчетными значениями результирующей величины) [3].

При аппроксимации экспериментальных данных количество искомых параметров (коэффициентов) математической модели должно быть меньше числа опытов. Указанная особенность является характерным отличием методов аппроксимации экспериментальных данных от интерполирования, когда для нахождения коэффициентов интерполирующей зависимости определенного вида требуется фиксированное количество пар экспериментальных значений.

Получаемая в результате решения задачи аппроксимации аналитическая зависимость называется **аппроксимирующей зависимостью**. Она представляет собой функцию одной или нескольких переменных.

Структурная идентификация аналитической зависимости предваряет параметрическую и производится на основе данных о природе рассматриваемого процесса или явления, оценки распределения экспериментальных значений и с использованием ранее накопленного опыта. В аппроксимирующих зависимостях могут использоваться, например, степенные, тригонометрические или логарифмические функции [3].

В выполняемой лабораторной работе для аппроксимации экспериментальных зависимостей используются функции в виде полиномов (многочленов степени m):

$$y^* = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m,$$

где $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ – параметры аппроксимации (коэффициенты уравнения регрессии).

Для оценки качества описания экспериментальных данных аппроксимирующей зависимостью в работе используется критерий вида:

$$R = \sum_{i=0}^n (y_i^* - y_i)^2. \quad (7.1)$$

Метод расчета коэффициентов аппроксимирующей зависимости, основанный на использовании данного критерия, получил название **метода наименьших квадратов**.

Аналитическое решение задачи аппроксимации экспериментальных данных полиномом степени m в виде вектора коэффициентов полиномиальной функции получается частным дифференцированием критерия (7.1) по каждому из искомых параметров. В результате оно сводится к необходимости решения следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} (n+1) \cdot a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^2 + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^m - \sum_{i=0}^n y_i = 0, \\ a_0 \sum_{i=0}^n x_i + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^3 + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} - \sum_{i=0}^n x_i y_i = 0, \\ \dots \\ a_0 \sum_{i=0}^n x_i^m + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^{2m} - \sum_{i=0}^n x_i^m y_i = 0. \end{cases}$$

Если перенести свободные члены в уравнениях этой системы в правую часть, ее можно представить в векторно-матричной форме следующим образом:

$$\overline{\overline{F}} \cdot \vec{a} = \vec{b}, \quad (7.2)$$

где

$$\overline{\overline{F}} = \begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^m \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i^3 & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m & \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} & \sum_{i=0}^n x_i^{m+2} & \dots & \sum_{i=0}^n x_i^{2m} \end{bmatrix}, \quad \vec{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_m \end{bmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \dots \\ \sum_{i=0}^n x_i^m y_i \end{bmatrix}.$$

Решение системы относительно вектора \vec{a} и будет являться, по сути, решением задачи аппроксимации экспериментальных данных. Коэффициенты и свободные члены данной системы можно получить, составив таблицу (табл. 7.1).

Таблица 7.1

Таблица для расчета коэффициентов системы уравнений (7.2)

x	y	x^2	x^3	...	x^{2m}	xy	x^2y	...	x^my
x_0	y_0	x_0^2	x_0^3	...	x_0^{2m}	x_0y_0	$x_0^2y_0$...	$x_0^my_0$
x_1	y_1	x_1^2	x_1^3	...	x_1^{2m}	x_1y_1	$x_1^2y_1$...	$x_1^my_1$
...	
x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	...	x_i^{2m}	x_iy_i	$x_i^2y_i$...	$x_i^my_i$
...	
x_n	y_n	x_n^2	x_n^3	...	x_n^{2m}	x_ny_n	$x_n^2y_n$...	$x_n^my_n$
$\sum_{i=0}^n x_i$	$\sum_{i=0}^n y_i$	$\sum_{i=0}^n x_i^2$	$\sum_{i=0}^n x_i^3$...	$\sum_{i=0}^n x_i^{2m}$	$\sum_{i=0}^n x_iy_i$	$\sum_{i=0}^n x_i^2y_i$...	$\sum_{i=0}^n x_i^my_i$

Матрицу коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений $\overline{\overline{F}}$ можно получить иначе – введя характеристическую матрицу $\overline{\overline{X}}$:

$$\overline{\overline{X}} = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^m \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{bmatrix}.$$

Матрица $\overline{\overline{F}}$ получается в результате умножения транспонированной матрицы $\overline{\overline{X}}$ на ее исходную форму:

$$\overline{\overline{F}} = \overline{\overline{X}}^T \cdot \overline{\overline{X}}.$$

Аналогично вектор свободных членов \vec{b} можно представить в виде следующего произведения:

$$\vec{b} = \overline{\overline{X}}^T \cdot \vec{y}.$$

Произведя подстановку в (7.2), получим:

$$\overline{\overline{X}}^T \cdot \overline{\overline{X}} \cdot \vec{a} = \overline{\overline{X}}^T \cdot \vec{y}.$$

Отсюда можем получить выражение для нахождения вектора неизвестных коэффициентов аппроксимирующей зависимости в векторно-матричной

форме с использованием характеристической матрицы \overline{X} :

$$\vec{a} = \left(\overline{X}^T \cdot \overline{X} \right)^{-1} \cdot \overline{X}^T \cdot \vec{y}. \quad (7.3)$$

7.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний об аппроксимации экспериментальных зависимостей; получение навыков расчета коэффициентов аппроксимирующих зависимостей методом наименьших квадратов.

Задача. Получить аппроксимирующие зависимости для полиномов различных степеней методом наименьших квадратов с использованием матричных операций в табличном процессоре MS Excel. Оформить результаты расчетов в табличной и графической формах. Провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на точность описания экспериментальных данных методом аппроксимации.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и особенностям описания экспериментальных данных методом аппроксимации.

2. Допущенному студенту получить вариант задания с выборкой экспериментальных данных (табл. 7.2). Представить на Листе 1 файла MS Excel исходные данные в табличной и графической формах.

3. На Листе 2 рассчитать коэффициенты аппроксимирующих полиномов 2-й и 4-й степеней методом наименьших квадратов в матричной форме с использованием характеристической матрицы \overline{X} и операций линейной алгебры по соотношению (7.3).

4. На Листе 3 рассчитать коэффициенты аппроксимирующих полиномов 3-й и 5-й степеней методом наименьших квадратов в матричной форме с использованием матрицы коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений \overline{F} по соотношению (7.2). Для решения системы использовать один из методов, указанный ведущим преподавателем:

– метод Крамера (К);

- метод обратной матрицы (ОМ);
- Жордана–Гаусса (ЖГ).

Таблица 7.2

Варианты задания для работы 5

Вариант 1			Вариант 2			Вариант 3		
№ точки	X	Y	№ точки	X	Y	№ точки	X	Y
1	–2,07	17,54	1	–2,23	2,85	1	–2,36	–2,58
2	–1,31	13,00	2	–2,03	1,83	2	–2,23	–3,07
3	–0,69	10,10	3	–1,67	–0,26	3	–2,01	–3,64
4	0,27	5,93	4	–1,62	–0,36	4	–1,56	–5,31
5	0,69	4,41	5	–1,23	–2,19	5	–1,34	–6,14
6	1,00	3,20	6	–0,97	–3,36	6	–1,17	–6,90
7	1,36	1,56	7	0,00	–7,19	7	–0,35	–8,92
8	1,76	0,03	8	0,93	–9,68	8	–0,24	–9,18
9	2,52	–2,50	9	1,23	–10,36	9	–0,01	–9,63
10	3,46	–6,51	10	1,86	–10,96	10	0,42	–10,58
11	3,74	–7,59				11	1,30	–11,03
						12	2,27	–9,65
Вариант метода для п. 5		К	Вариант метода для п. 5		ОМ	Вариант метода для п. 5		ЖГ
Вариант 4			Вариант 5			Вариант 6		
№ точки	X	Y	№ точки	X	Y	№ точки	X	Y
1	–2,48	1,76	1	–2,12	–8,75	1	–2,15	–19,29
2	–2,36	1,47	2	–1,50	–6,70	2	–1,42	–14,47
3	–1,75	1,24	3	–1,21	–5,80	3	–0,80	–10,56
4	–1,75	1,26	4	–0,92	–5,02	4	–0,14	–7,28
5	–1,09	0,74	5	–0,21	–2,67	5	0,03	–6,21
6	–0,98	0,98	6	0,70	–0,30	6	0,48	–4,67
7	–0,19	0,09	7	1,24	1,21	7	1,06	–2,64
8	0,29	–0,78	8	2,22	3,36	8	1,15	–2,20
9	0,48	–0,84	9	2,66	4,07	9	2,03	–0,99
10	0,58	–1,11	10	2,94	4,34	10	2,79	–1,36
11	1,22	–2,10	11	3,19	4,82	11	2,89	–1,45
12	1,60	–2,72	12	3,39	5,16	12	3,67	–3,93
			13	3,58	5,27	13	3,75	–4,14
			14	4,40	5,37	14	4,13	–6,36
			15	4,73	5,34			
Вариант метода для п. 5		К	Вариант метода для п. 5		ОМ	Вариант метода для п. 5		ЖГ

5. На Листе 4 в единой системе координат построить графики найденных аппроксимирующих зависимостей и исходные экспериментальные точки. Сде-

лать выводы по полученному рисунку.

6. На Листе 5 выполнить расчет значения критерия метода наименьших квадратов для каждой из аппроксимирующих зависимостей, полученных в п. 3, 4. Представить в виде столбчатой диаграммы зависимость величины критерия от выбранной степени полинома. Сделать выводы на основе данного рисунка.

7. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, подготовив Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Приведите общий вид полиномиальной функции степени M .
2. Сформулируйте задачу аппроксимации экспериментальных данных.
3. В чем отличие аппроксимации от интерполирования?
4. Каковы могут быть теоретически возможные минимальное и максимальное значения степени аппроксимирующего полинома при наличии M точек экспериментальных данных?
5. Какое количество коэффициентов аппроксимирующей зависимости необходимо найти для описания полинома степени M ?
6. Приведите формулу для расчета критерия метода наименьших квадратов?
7. Как изменится величина критерия метода наименьших квадратов с увеличением степени аппроксимирующих полиномов, описывающих одно и то же множество экспериментальных данных?
8. Почему метод наименьших квадратов имеет такое название?
9. Какие операции линейной алгебры используются в матричном методе наименьших квадратов?
10. Как можно повысить точность аппроксимации?
11. Каким может быть минимальное значение критерия метода наименьших квадратов?
12. Чему будет равен коэффициент a_{M+1} аппроксимирующего полинома степени $M+1$, если значение критерия метода наименьших квадратов для полинома степени M равно 0?

Работа 5																			
	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
2		x	x²	x³	x⁴	x⁵	x⁶	x⁷	x⁸	x⁹	x¹⁰	y	xy	x²y	x³y	x⁴y	x⁵y		
3		-2,07	4,28	-8,87	18,36	-38,01	78,67	-162,85	337,10	-697,80	1444,45	-3,45	7,14	-14,78	30,60	-63,34	131,12		
4		-1,10	1,21	-1,33	1,46	-1,61	1,77	-1,95	2,14	-2,36	2,59	-1,63	1,79	-1,97	2,17	-2,39	2,63		
5		-0,36	0,13	-0,05	0,02	-0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,59	0,21	-0,08	0,03	-0,01	0,00		
6		0,48	0,23	0,11	0,05	0,03	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,91	0,44	0,21	0,10	0,05	0,02		
7		1,18	1,39	1,64	1,94	2,29	2,70	3,19	3,76	4,44	5,23	2,34	2,76	3,26	3,84	4,54	5,35		
8		1,30	1,69	2,20	2,86	3,71	4,83	6,27	8,16	10,60	13,79	2,56	3,33	4,33	5,62	7,31	9,51		
9		1,71	2,92	5,00	8,55	14,62	25,00	42,75	73,11	125,02	213,78	3,45	5,90	10,09	17,25	29,50	50,44		
10		2,33	5,43	12,65	29,47	68,67	160,01	372,81	868,66	2023,97	4715,84	5,71	13,30	31,00	72,23	168,29	392,12		
11		2,84	8,07	22,91	65,05	184,75	524,70	1490,14	4232,01	12018,91	34133,70	7,71	21,90	62,19	176,61	501,57	1424,45		
12		2,96	8,76	25,93	76,77	227,23	672,59	1990,87	5892,96	17443,17	51631,78	8,09	23,95	70,88	209,81	621,03	1838,26		
13	Σ	9,27	34,12	60,19	204,53	461,68	1470,28	3741,24	11417,90	30925,94	92161,17	25,10	80,72	165,12	518,26	1266,55	3853,90		
14																			
15		Полином 3-й степени																	
16																			
17		$\bar{A} =$	10,00	9,27	34,12	60,19					$\Delta = 1397895,8$	$\vec{a} =$	0,046						
18			9,27	34,12	60,19	204,53							1,613						
19			34,12	60,19	204,53	461,68							0,137						
20			60,19	204,53	461,68	1470,28							0,083						
21																			
22		$\bar{A}_1 =$	25,10	9,27	34,12	60,19					$\Delta_1 = 64360,1$								
23			80,72	34,12	60,19	204,53													
24			165,12	60,19	204,53	461,68													
25			518,26	204,53	461,68	1470,28													
26																			
27		Полином 5-й степени																	
28		$\bar{A} =$	10,00	9,27	34,12	60,19	204,53	461,68											
29			9,27	34,12	60,19	204,53	461,68	1470,28	3741,24										
30			34,12	60,19	204,53	461,68	1470,28	3741,24	11417,90										
31			60,19	204,53	461,68	1470,28	3741,24	11417,90	30925,94										
32			204,53	461,68	1470,28	3741,24	11417,90	30925,94	92161,17										
33			461,68	1470,28	3741,24	11417,90	30925,94	92161,17											
34			25,10	9,27	34,12	60,19	204,53	461,68											
35			80,72	34,12	60,19	204,53	461,68	1470,28											

Рис. 7.2. Оформление этапов поиска коэффициентов аппроксимирующих полиномов 3-й и 5-й степеней с использованием соотношения (7.2)

алгебраических уравнений (7.2). Коэффициенты для систем берутся из строки № 13 таблицы Листа 3. Ниже оформляются решения систем, полученных для обоих полиномов, методом Крамера.

На Листе 4 (рис. 7.3) строится график рассчитанных аппроксимирующих зависимостей. На график также наносятся экспериментальные точки.

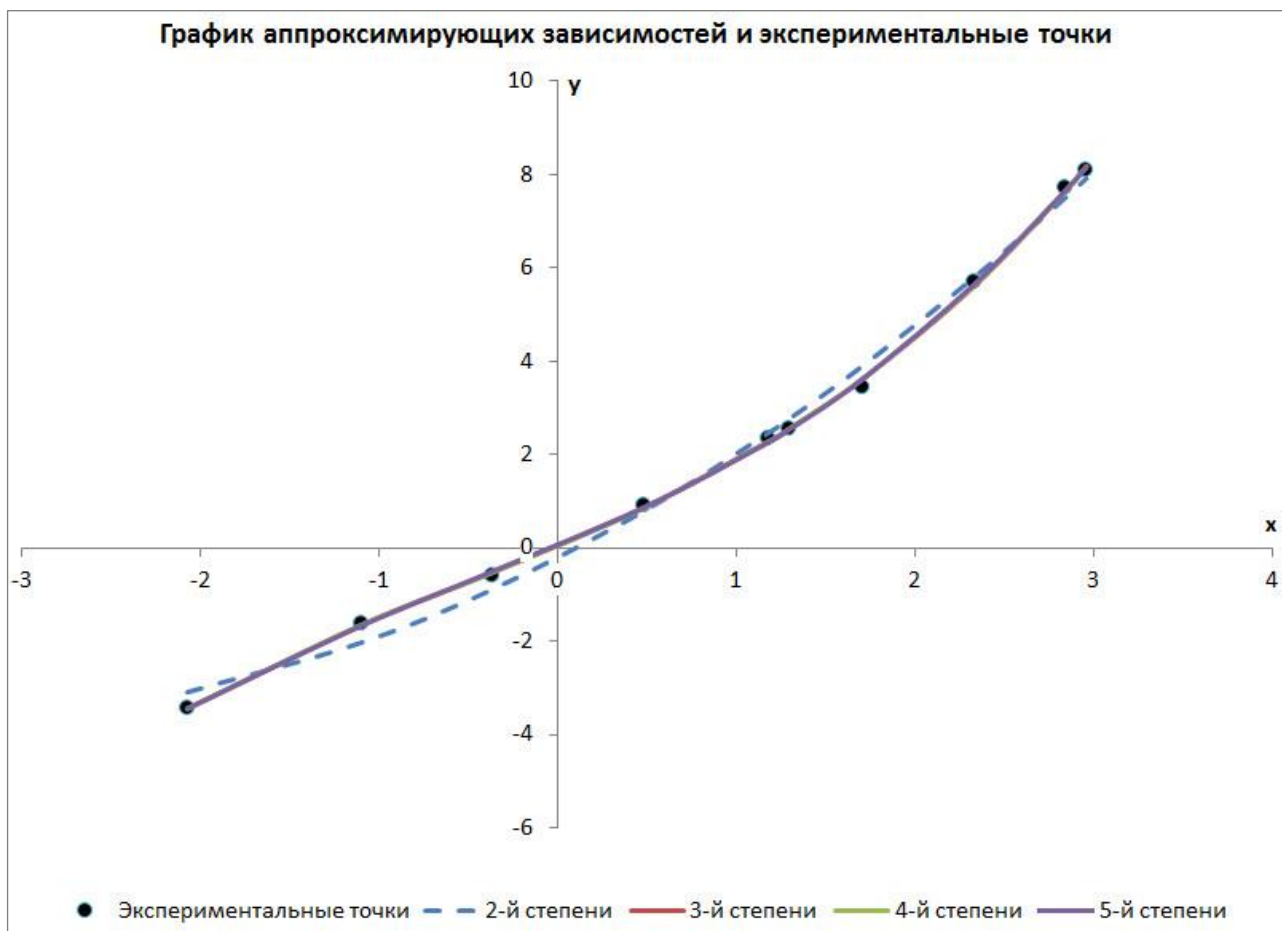


Рис. 7.3. Пример оформления графика на Листе 4

Из рисунка видно, что полином 2-й степени в наибольшей степени отличается от остальных функций, а их графики, в свою очередь, практически сливаются. Таким образом, по приведенному графику делаются выводы о степени близости полученных зависимостей к экспериментальным точкам, а также между собой.

Анализ полученных зависимостей завершается расчетом критерия метода наименьших квадратов для каждой аппроксимирующей зависимости. Полученные результаты представляются на Листе 5 в табличной форме и в виде столбчатой диаграммы (рис. 7.4).

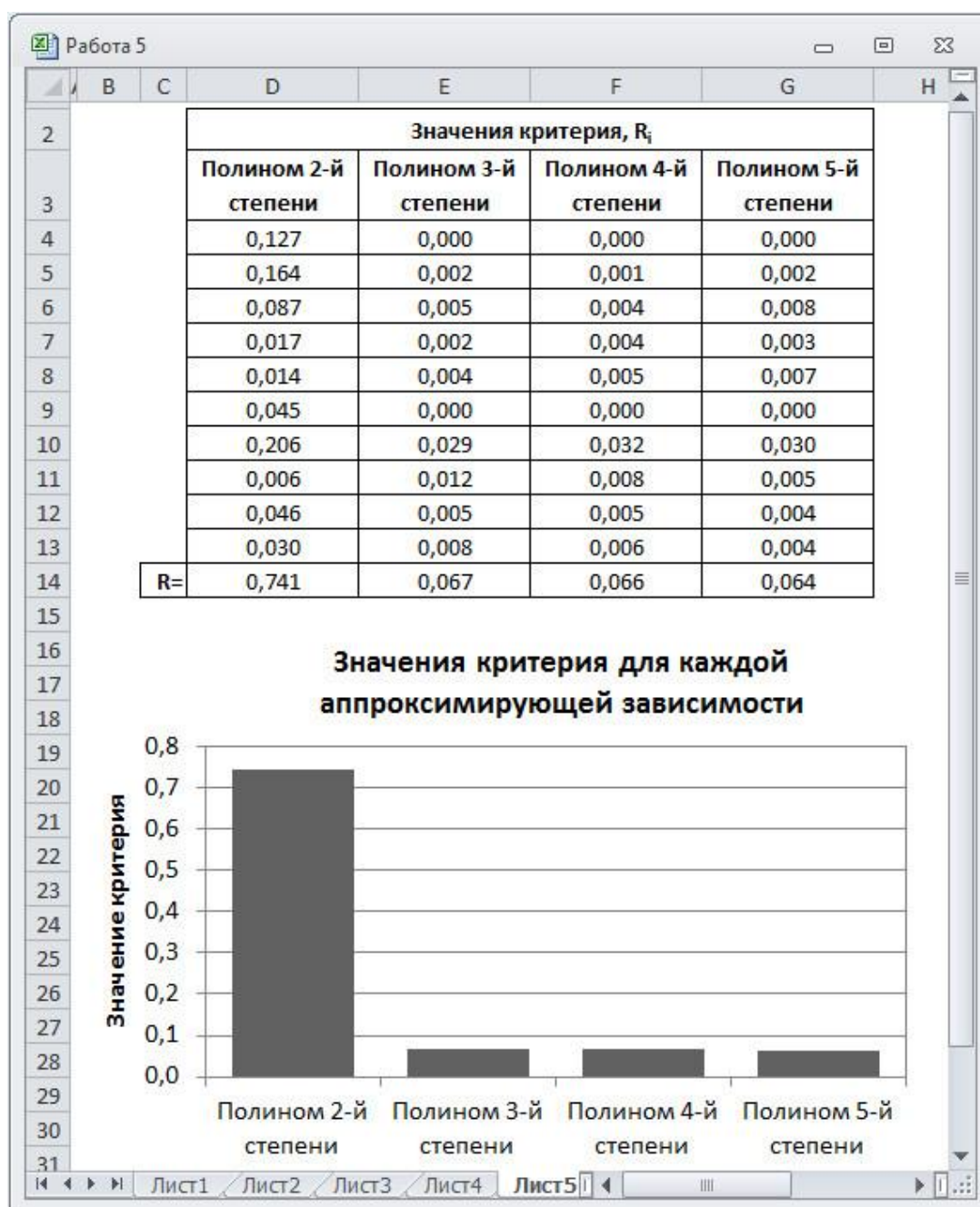


Рис. 7.4. Пример оформления Листа 5

8. Работа 6. Расчет значения определенного интеграла численными методами в Microsoft Excel

8.1. Численные методы расчета определенных интегралов

Численные методы, которые используются в работе 6, основаны на графической интерпретации понятия интеграла. Иными словами, рассчитать чис-

ленно значение определенного интеграла – значит найти площадь под кривой, образованной подынтегральной функцией, в заданных пределах интегрирования.

В рассматриваемых методах исходный интервал интегрирования делится на множество (n) равных подынтервалов, на каждом из них (i) строится геометрическая фигура, площадь которой, в зависимости от выбранного метода, можно рассчитать по одной из следующих формул:

– метода левых прямоугольников (рис. 8.1):

$$S_{i\text{ЛП}} = \Delta x \cdot f(x_i);$$

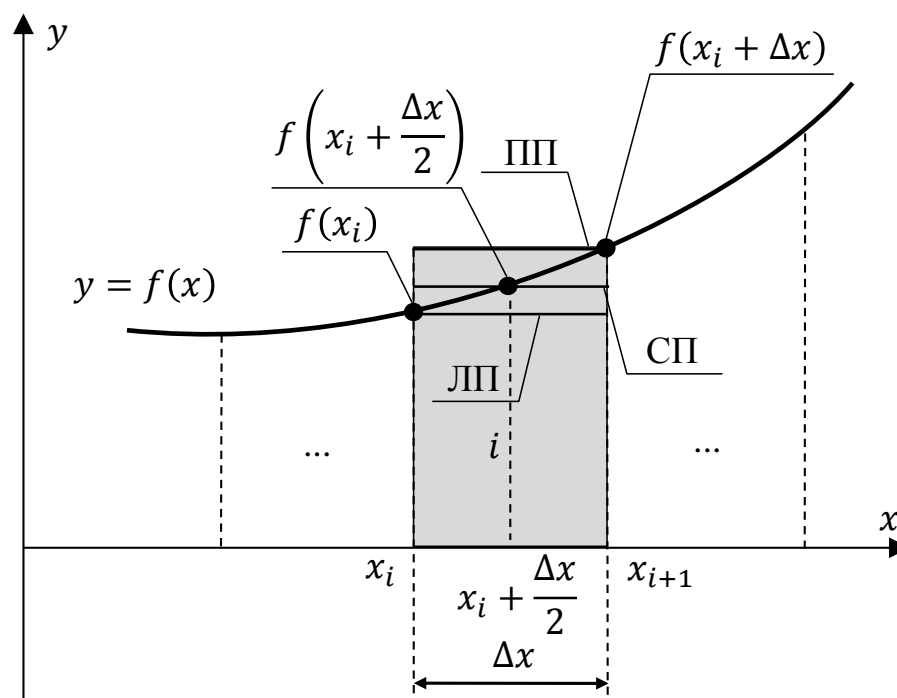


Рис. 8.1. Графическая интерпретация методов левых, правых и средних прямоугольников

– метода правых прямоугольников (рис. 8.1):

$$S_{i\text{ПП}} = \Delta x \cdot f(x_i + \Delta x);$$

– метода средних прямоугольников (рис. 8.1):

$$S_{i\text{СП}} = \Delta x \cdot f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right);$$

– метода трапеций (рис. 8.2):

$$S_{iT} = \frac{\Delta x}{2} \cdot (f(x_i) + f(x_i + \Delta x));$$

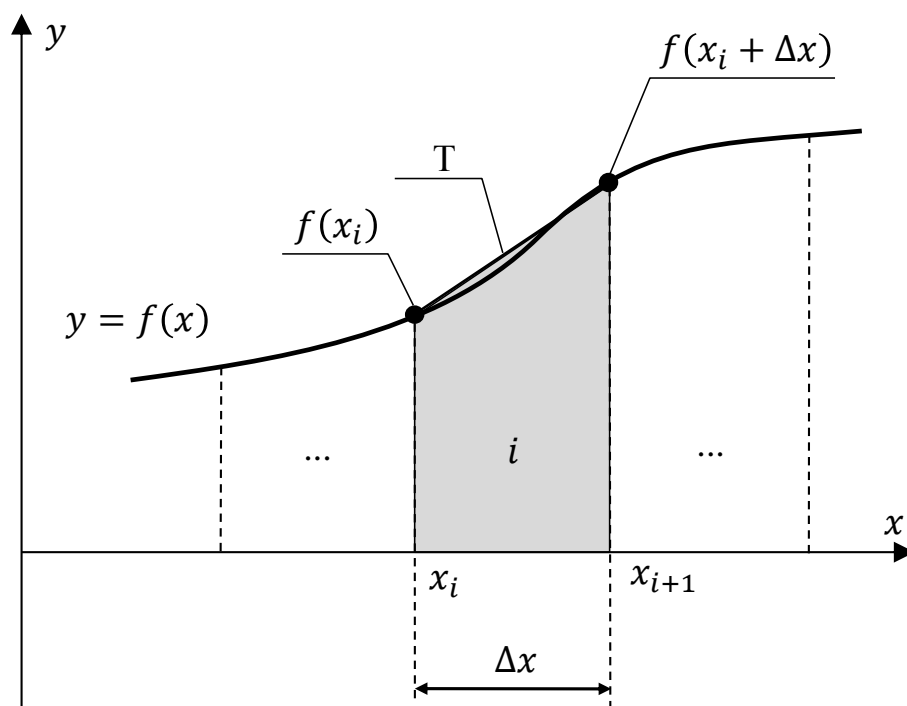


Рис. 8.2. Графическая интерпретация метода трапеций

– метода парабол (рис. 8.3):

$$S_{i\Pi} = \frac{\Delta x}{6} \cdot \left(f(x_i) + 4 \cdot f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right).$$

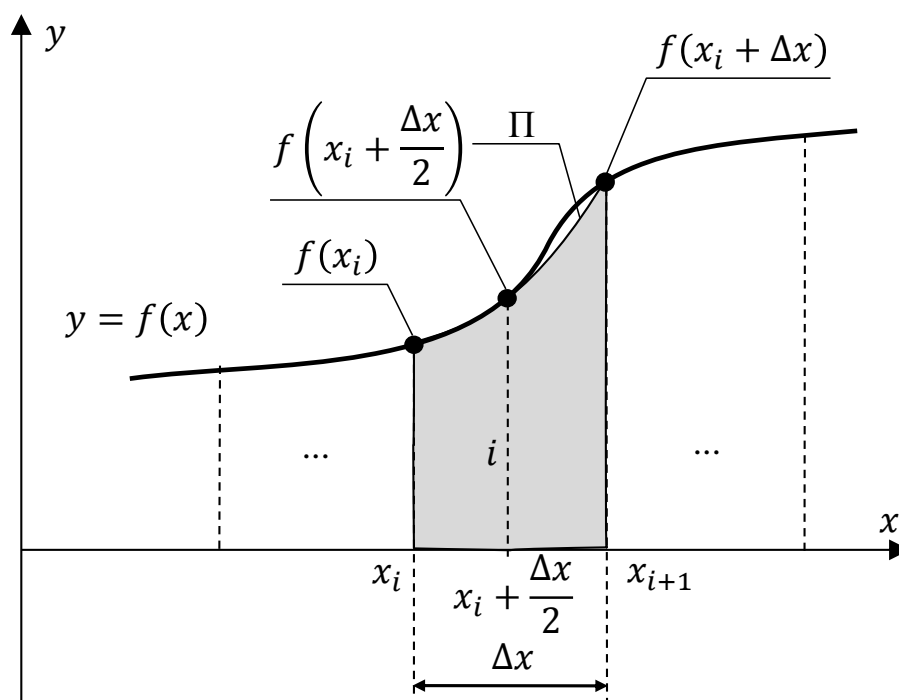


Рис. 8.3. Графическая интерпретация метода парабол

Выбор метода расчета из представленного перечня фактически определя-

ет вид интерполяционного полинома, описывающего на отдельно взятом подынтервале подынтегральную функцию. Так в методах левых, правых и средних прямоугольников этот полином строится только по одной точке подынтервала (левой или правой границам подынтервала или их среднему значению соответственно). В методе трапеций интерполирующая функция определяется по двум точкам, соответствующим границам подынтервала. В свою очередь, в методе парабол – по трем точкам – границам подынтервала и их среднему значению.

Общий алгоритм расчета следующий:

1) задается количество подынтервалов n , на которые делится исходный интервал интегрирования $[x_n, x_k]$, и определяется шаг интегрирования:

$$\Delta x = \frac{x_k - x_n}{n};$$

2) приближенное значение определенного интеграла рассчитывается как сумма площадей элементарных геометрических фигур по одной из следующих формул:

– для метода левых прямоугольников:

$$S_{\text{лп}} = \sum_{i=1}^n S_{i \text{ лп}} = \Delta x \cdot \sum_{i=1}^n f(x_i);$$

– для метода правых прямоугольников:

$$S_{\text{пп}} = \sum_{i=1}^n S_{i \text{ пп}} = \Delta x \cdot \sum_{i=1}^n f(x_i + \Delta x);$$

– для метода средних прямоугольников:

$$S_{\text{сп}} = \sum_{i=1}^n S_{i \text{ сп}} = \Delta x \cdot \sum_{i=1}^n f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right);$$

– для метода трапеций:

$$S_{\text{т}} = \sum_{i=1}^n S_{i \text{ т}} = \frac{\Delta x}{2} \cdot \left(\sum_{i=1}^n f(x_i) + \sum_{i=1}^n f(x_i + \Delta x) \right);$$

– для метода парабол:

$$S_{\text{п}} = \sum_{i=1}^n S_{i \text{ п}} = \frac{\Delta x}{6} \cdot \left(\sum_{i=1}^n f(x_i) + 4 \cdot \sum_{i=1}^n f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right) + \sum_{i=1}^n f(x_i + \Delta x) \right).$$

Из представленного перечня методы левых и правых прямоугольников самые неточные, причем их ошибка выше, если подынтегральная функция на рассматриваемом интервале монотонно возрастает или убывает, особенно при высокой скорости изменения (производной) функции. Методы средних прямо-

угольников и трапеций имеют примерно одинаковый порядок точности и более точны, чем методы левых и правых прямоугольников. В случае метода средних прямоугольников снижение общей ошибки достигается за счет взаимной компенсации ошибок до и после срединной точки подынтервала. В случае метода трапеций – за счет использования более сложной, линейной интерполирующей функции на подынтервале. Аналогично в еще более точном методе парабол для интерполирования подынтегральной функции на подынтервале применяется более сложная квадратичная зависимость.

Дальнейшее повышение точности расчета возможно благодаря использованию на каждом подынтервале интерполирующих зависимостей в виде полиномиальных функций более высоких порядков. Получение таких полиномов возможно с помощью коэффициентов Котеса. В общем виде формула для расчета площади криволинейной трапеции на i -м подынтервале записывается как:

$$S_{iK} = \frac{\Delta x}{\sum_{j=0}^m K_j} \cdot \sum_{j=0}^m K_j \cdot f(x_i + j \cdot \delta x),$$

где m – порядок интерполирующей зависимости на подынтервале (порядок коэффициентов Котеса); δx – расстояние между узлами интерполяции; K_j – коэффициенты Котеса m -го порядка (берутся из табл. 8.1).

Таблица 8.1

Значения коэффициентов Котеса различных порядков

m	$\sum_{j=0}^m K_j$	K_0	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5	K_6	K_7	K_8
0	1	1	–	–	–	–	–	–	–	–
1	2	1	1	–	–	–	–	–	–	–
2	6	1	4	1	–	–	–	–	–	–
3	8	1	3	3	1	–	–	–	–	–
4	90	7	32	12	32	7	–	–	–	–
5	288	19	75	50	50	75	19	–	–	–
6	840	41	216	27	272	27	216	41	–	–
7	17280	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751	–
8	28350	989	5888	–928	10496	–4540	10496	–928	5888	989

Расстояние между узлами интерполяции рассчитывается по соотношению:

$$\delta x = \frac{\Delta x}{m}.$$

Таким образом, приближенное значение определенного интеграла, рассчитанное на основе коэффициентов Котеса m -го порядка, выражается в виде:

$$S_K = \sum_{i=1}^n S_{iK} = \frac{\Delta x}{\sum_{j=0}^m K_j} \cdot \sum_{i=1}^n \sum_{j=0}^m K_j \cdot f(x_i + j \cdot \delta x).$$

Кроме того, на точность расчета определенного интеграла влияют вид самой подынтегральной функции и количество разбиений исходного интервала: чем оно больше, тем выше точность.

8.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах расчета значения определенного интеграла, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного расчета значения определенного интеграла.

Задача. Рассчитать различными численными методами значение определенного интеграла с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты расчетов в табличной и графической формах, провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на точность вычисления определенного интеграла.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и численным методам вычисления значения определенного интеграла.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (табл. 8.2) с коэффициентами подынтегральной функции и пределами интегрирования для вычисления значения определенного интеграла вида:

$$S = \int_{x_H}^{x_K} (a \cdot \exp(-d \cdot (x - c)^2) + b) dx.$$

3. На Листе 1 привести исходные данные для расчета, указанные в данном варианте задания.

Таблица 8.2

Варианты задания для работы 6

№ варианта	a	b	c	d	x_H	x_K	n	Вариант метода 1 для п. 5	m	Вариант метода для п. 7
1	-3,46	4,04	-2,60	0,13	-6,8	0,0	20	ЛП	4	ЛП
2	1,22	4,33	1,73	0,40	-1,3	4,1	25	ПП	5	СП
3	0,61	7,46	3,06	0,33	0,3	4,8	30	ЛП	6	Т
4	0,77	3,01	0,32	0,35	-1,6	4,0	35	ПП	4	П
5	-0,90	6,43	-3,86	0,30	-6,8	-1,3	20	ПП	5	ПП
6	4,60	3,06	1,38	0,13	-1,0	2,7	25	ЛП	6	СП
7	1,11	4,22	-3,86	0,18	-7,2	0,3	30	ПП	4	Т
8	-0,98	4,81	1,11	0,38	-0,6	2,2	35	ЛП	5	П
9	-1,21	5,43	2,09	0,10	0,6	3,5	20	ЛП	6	ЛП
10	-4,47	3,07	2,49	0,15	-1,4	5,9	25	ПП	4	СП
11	-1,46	6,67	-0,32	0,20	-3,2	3,5	30	ЛП	5	Т
12	-0,92	7,71	0,63	0,11	-0,9	5,2	35	ПП	6	П
13	1,81	5,07	1,20	0,31	-2,8	2,4	20	ПП	4	ПП
14	1,70	5,63	3,92	0,20	1,0	3,9	25	ЛП	5	СП
15	1,14	6,21	3,69	0,13	-0,6	7,1	30	ПП	6	Т
16	2,59	3,16	2,55	0,37	0,6	3,6	35	ЛП	4	П
17	-1,02	6,78	-3,83	0,39	-8,1	-2,3	20	ЛП	5	ЛП
18	-0,60	7,34	-3,88	0,14	-6,4	0,6	25	ПП	6	СП
19	0,72	6,70	-2,12	0,19	-3,7	-0,8	30	ЛП	4	Т
20	-1,11	5,18	0,64	0,34	-1,2	0,7	35	ПП	5	П
21	0,61	3,76	-1,54	0,19	-2,8	-0,6	20	ПП	6	ПП
22	-0,94	5,29	2,50	0,27	-0,1	5,0	25	ЛП	4	СП
23	0,82	7,76	1,32	0,15	-2,7	4,5	30	ПП	5	Т
24	-1,02	7,72	-3,91	0,16	-5,4	0,2	35	ЛП	6	П

4. На Листе 2 построить график подынтегральной функции в заданных пределах интегрирования.

5. На Листе 3 в табличной форме представить расчет значения определенного интеграла пятью методами с указанным в варианте задания количеством разбиений на n одинаковых по ширине фигур:

- левых (ЛП) или правых (ПП) прямоугольников (метод 1, выбирается в соответствии с заданным вариантом);
- средних прямоугольников (СП, метод 2);
- трапеций (Т, метод 3);
- парабол (П, метод 4);
- с использованием коэффициентов Котеса указанного в варианте задания порядка m (КК, метод 5).

6. Приняв за истинное значение интеграла результат расчета методом 5, на Листе 4 разместить столбчатую диаграмму, показывающую зависимость абсолютной ошибки от выбранного метода расчета (для методов 1–4). Сделать выводы по полученному рисунку.

7. На Листе 5 дополнительно рассчитать значение определенного интеграла одним из методов 1–4 (в соответствии с заданным вариантом) при разбиении на 100, 150, 200 и 250 одинаковых по ширине фигур.

8. Приняв за истинное значение интеграла ранее полученный результат расчета по методу 5, на Листе 6 построить график зависимости абсолютной ошибки вычисления определенного интеграла указанным методом от количества разбиений, используя значения определенного интеграла, полученные в п. 5, 7 для одного и того же метода. Сделать выводы по полученному рисунку.

9. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, подготовив Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Каков геометрический смысл определенного интеграла?
2. Как рассчитать шаг интегрирования при известных пределах и количестве разбиений подынтегральной функции?

3. Перечислите известные вам численные методы расчета определенных интегралов.

4. Какие из известных вам численных методов расчета определенных интегралов являются наименее точными?

5. От каких факторов зависит точность вычисления определенного интеграла?

6. Каким образом количество разбиений подынтегральной функции влияет на точность вычисления определенного интеграла?

7. Сравните по точности вычисления определенного интеграла методы:

– средних прямоугольников и трапеций;

– левых и правых прямоугольников;

– левых и средних прямоугольников.

8. Какова погрешность вычисления определенного интеграла методом средних прямоугольников при линейной подынтегральной функции? Ответ обосновать.

9. Как изменяется точность вычисления определенного интеграла с повышением степени полинома, интерполирующего подынтегральную функцию на подынтервалах?

10. Какой минимальный порядок коэффициентов Котеса позволит безошибочно вычислить определенный интеграл с квадратичной подынтегральной функцией?

11. Какое минимальное количество разбиений подынтегральной функции в виде полинома 3-й степени позволит безошибочно вычислить значение определенного интеграла с помощью коэффициентов Котеса 4-го порядка?

8.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 6 на следующем примере. Требуется вычислить значение определенного интеграла вида:

$$S = \int_{x_1}^{x_2} (-3,8 \cdot \exp(-0,19 \cdot (x - 1,12)^2) + 3,56) dx$$

в пределах интегрирования $[-2,7; 2,9]$ при 30 разбиениях интервала интегрирования методами левых и средних прямоугольников, трапеций, парабол и Котеса 4-го порядка.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные по образцу (рис. 3.4) для лабораторной работы 1.

График подынтегральной функции в заданных пределах интегрирования и все необходимые для его построения данные оформляются на Листе 2 аналогично примеру, представленному на рис. 3.5.

Расчет значения определенного интеграла заданными методами оформляется в табличном виде на Листе 3, как показано на рис. 8.4. Суммы значений подынтегральной функции в колонках C–D и H–L используются в формулах для расчета значений определенного интеграла в таблице справа.

Столбчатая диаграмма, используемая для анализа влияния выбора метода расчета значения определенного интеграла на ошибку получаемого результата, оформляется на Листе 4 по образцу (рис. 8.5). По приведенной диаграмме делается вывод о степени близости тех или иных методов по точности вычисления заданного интеграла и собственно о точности различных методов.

Аналогично рис. 8.4 на Листе 5 приводятся результаты дополнительного расчета значений определенного интеграла методом левых прямоугольников при различном количестве разбиений.

График зависимости абсолютной ошибки от количества точек разбиения для анализа его влияния на точность получаемого результата, оформляется на Листе 6 по образцу (рис. 8.6). По приведенному графику делается вывод о влиянии количества разбиений на ошибку расчета определенного интеграла.

На основе рис. 8.5 и 8.6 делаются общие выводы о степени влияния различных факторов (метода расчета, количества точек разбиения) на ошибку расчета определенного интеграла.

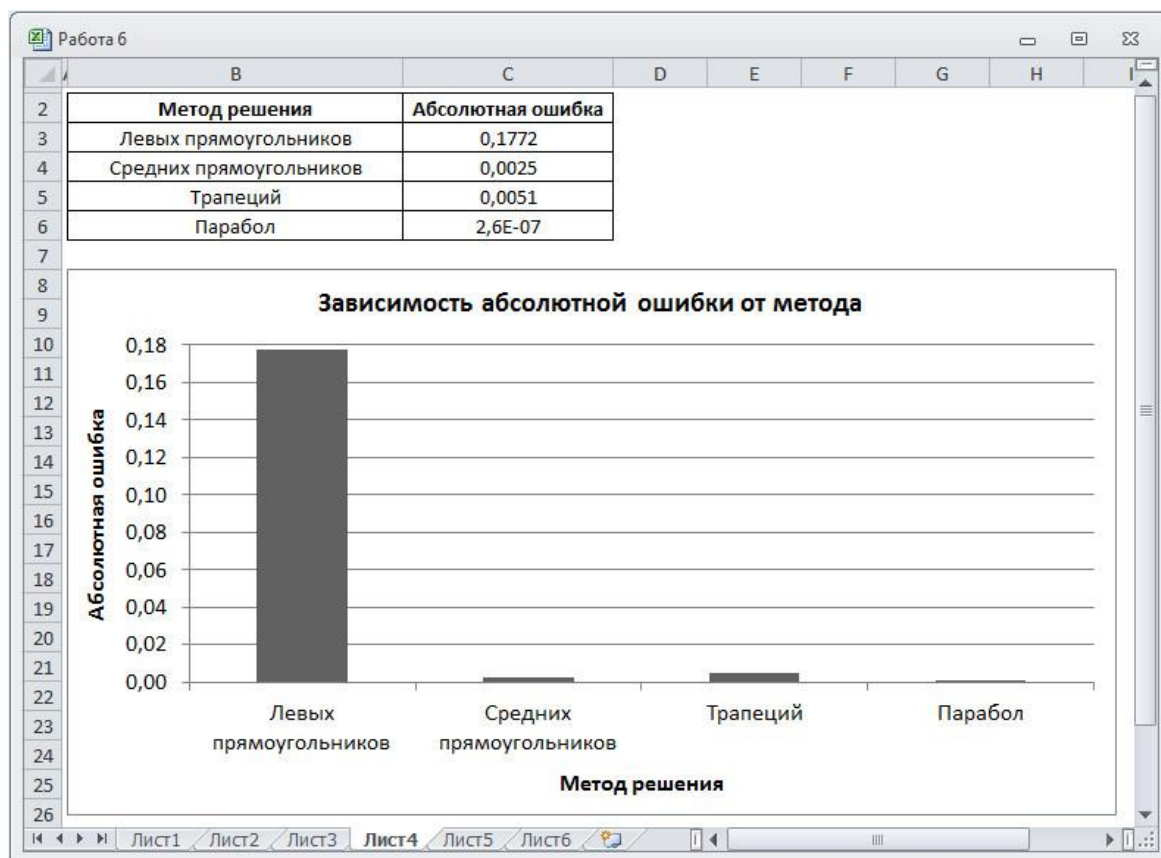


Рис. 8.5. Оформление столбчатой диаграммы для анализа влияния выбора метода на точность расчета значения определенного интеграла

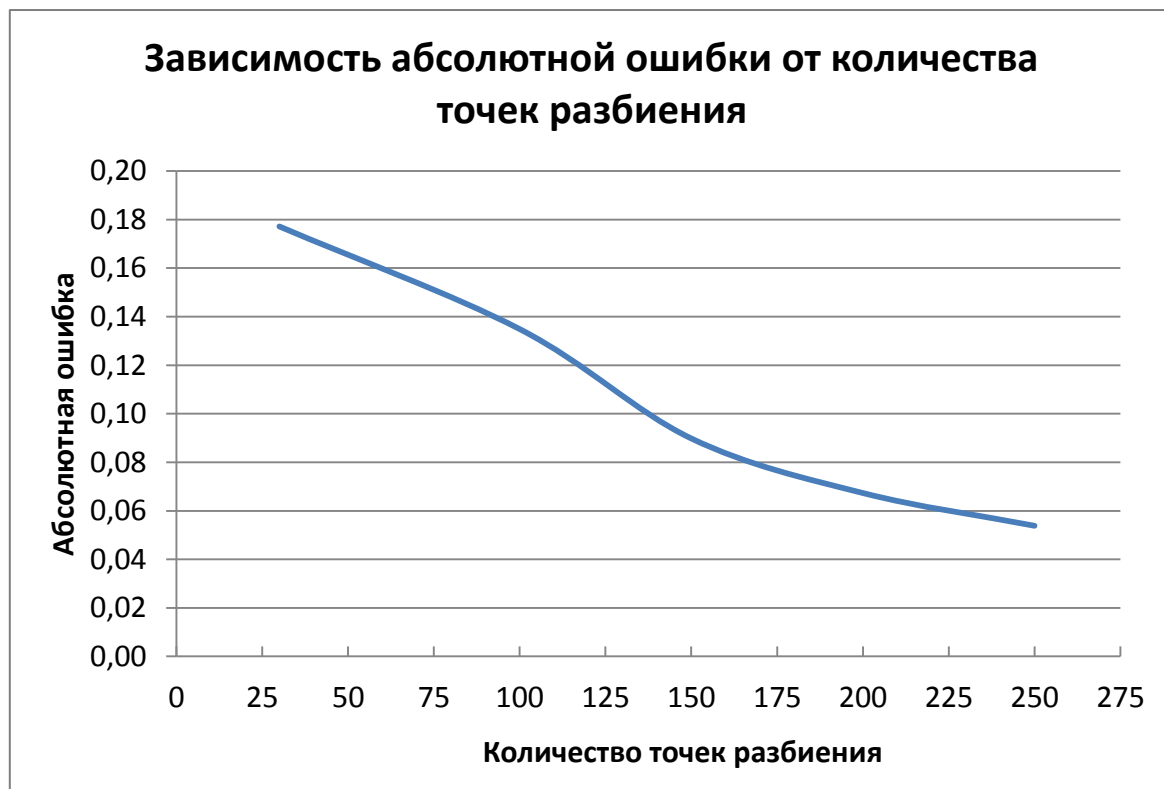


Рис. 8.6. Зависимость абсолютной ошибки от количества точек разбиения для анализа влияния шага интегрирования на точность получаемого результата

9. Работа 7. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений в Microsoft Excel

9.1. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Уравнение вида

$$y^{(N)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(N-1)})$$

называется **обыкновенным дифференциальным уравнением N -го порядка**.

В вариантах лабораторной работы используются дифференциальные уравнения первого порядка:

$$y' = f(x, y). \quad (9.1)$$

Общее решение обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка – множество функциональных зависимостей вида $y = y(x) + C$ (где C – произвольная константа), при подстановке любой из которых в уравнение оно обращается в тождество.

Частное решение уравнения (9.1) может быть получено из общего подстановкой известного значения функции в какой-либо точке, называемого начальным условием.

В отличие от математического анализа, который дает возможность получить функциональную зависимость, являющуюся решением дифференциального уравнения, в форме алгебраической записи, методы вычислительной математики позволяют получить эту функцию в виде множества числовых значений аргумента и соответствующих им значений функции решения, которая, в свою очередь, по сути, первообразная для функции производной (9.1). Последний факт обуславливает употребление словосочетания «интегрирование дифференциального уравнения» в качестве названия процедуры поиска частного решения.

Шаг интегрирования – расстояние по оси независимой переменной между двумя соседними точками частного решения дифференциального уравнения.

Все множество точек частного решения дифференциального уравнения (n) принадлежит некоторому интервалу, длина которого определяется количеством этих точек и величиной шага интегрирования (dx) по соотношению (9.2):

$$L = \max\{x_0, x_k\} - \min\{x_0, x_k\} = (n-1) \cdot dx. \quad (9.2)$$

Наиболее простой и требующий наименьших вычислительных затрат при численном решении обыкновенных дифференциальных уравнений – **метод Эйлера**. Его расчетная формула получается напрямую из уравнения (9.1) с учетом определения производной функции:

$$y' = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y^{(k)} - y^{(k-1)}}{\Delta x} = f(x, y).$$

Отсюда получаем систему для численного расчета функции решения:

$$\begin{cases} x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x; \\ K_1 = \Delta x \cdot f(x^{(k-1)}, y^{(k-1)}); \\ y^{(k)} = y^{(k-1)} + K_1. \end{cases}$$

Из рис. 9.1 видно, что следствием простоты метода Эйлера является значительное накопление ошибки в ходе вычисления каждой новой точки решения. Снизить ошибку можно, уменьшив шаг изменения аргумента, однако полностью избавиться от нее невозможно. Поэтому для более точных расчетов необходимо использовать другие методы.

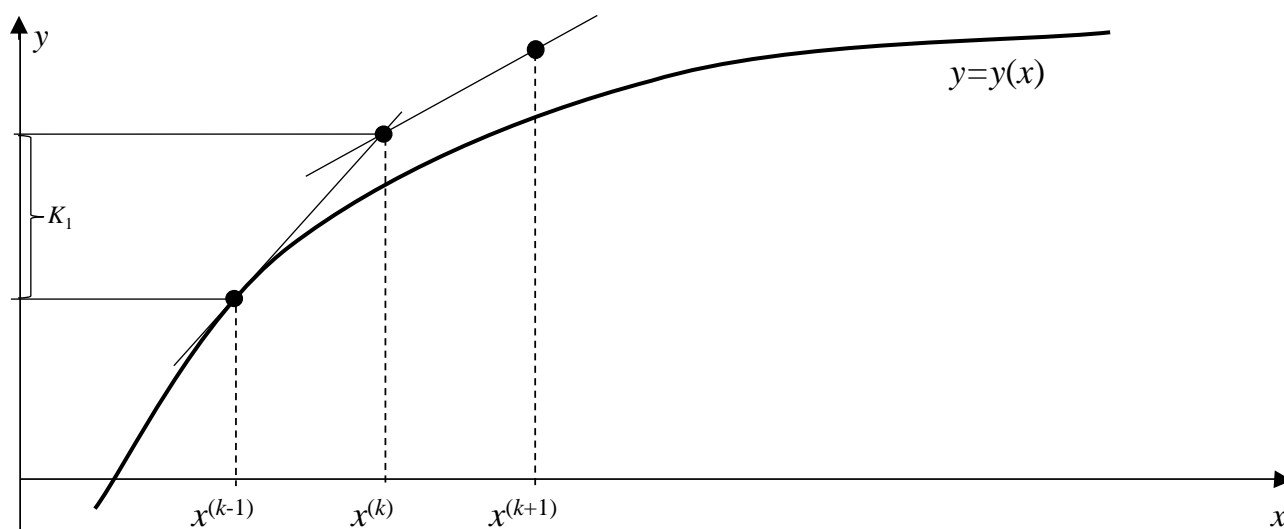


Рис. 9.1. Графическая интерпретация метода Эйлера

К одним из них относится **модифицированный метод Эйлера**. Данный метод предусматривает корректировку каждого следующего значения функции в зависимости от рассчитанного значения функции в промежуточной точке, равноудаленной от ближайших точек решения (рис. 9.2).

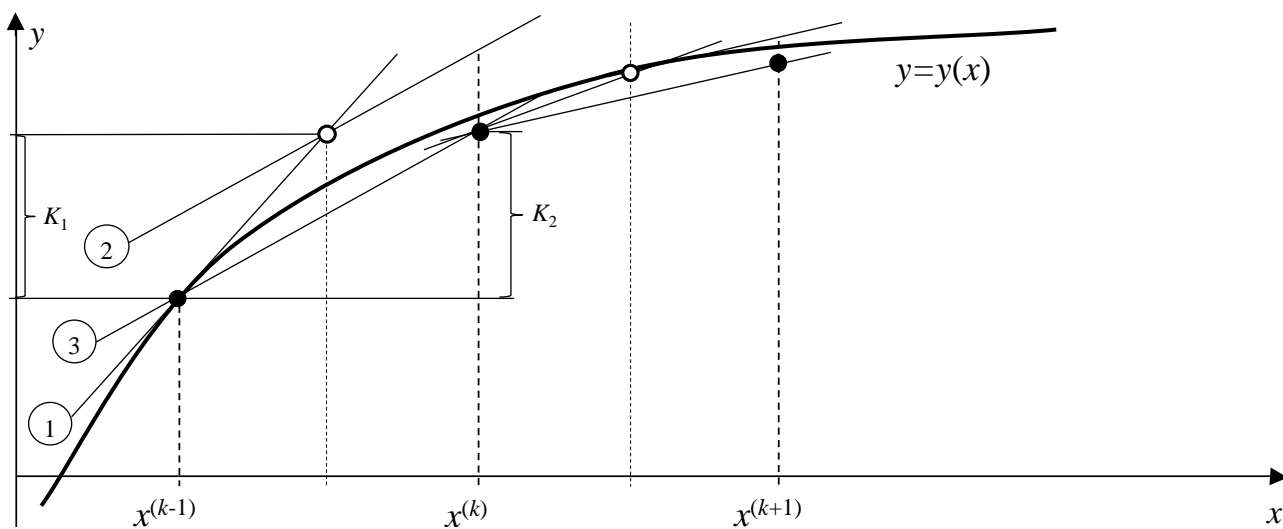


Рис. 9.2. Графическая интерпретация модифицированного метода Эйлера

Система для численного расчета функции решения модифицированным методом Эйлера выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x; \\ K_1 = \frac{\Delta x}{2} \cdot f(x^{(k-1)}, y^{(k-1)}); \\ K_2 = \Delta x \cdot f\left(x^{(k-1)} + \frac{\Delta x}{2}, y^{(k-1)} + K_1\right); \\ y^{(k)} = y^{(k-1)} + K_2. \end{cases}$$

Еще одной модификацией метода Эйлера является **метод Эйлера–Коши**. В нем каждое следующее значение функции решения корректируется за счет вычисления среднего арифметического тангенсов углов наклона касательных в новой и последней точках решения (рис. 9.3).

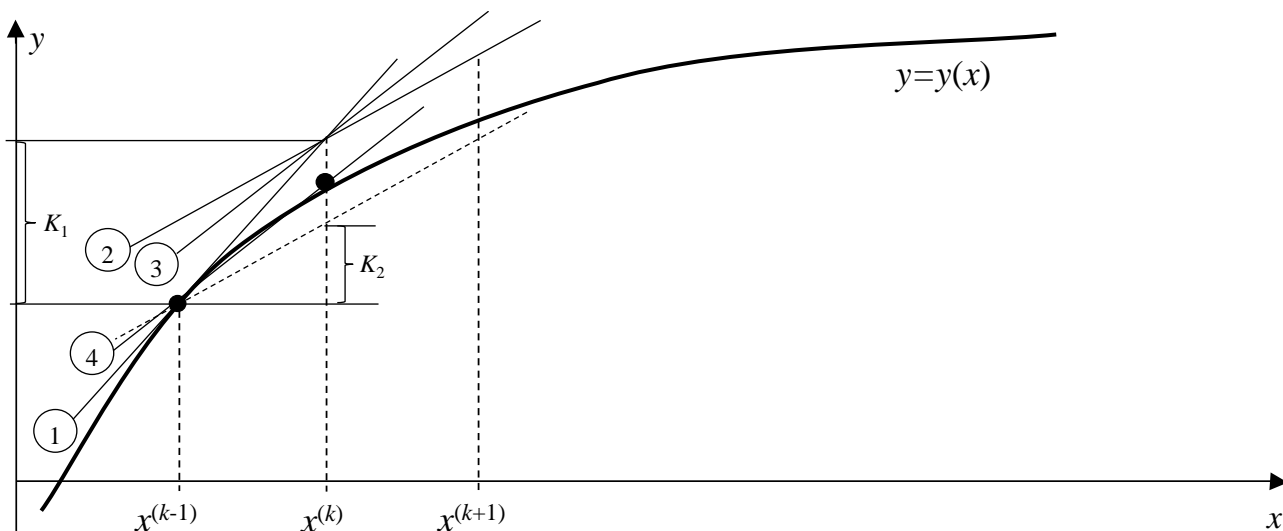


Рис. 9.3. Графическая интерпретация метода Эйлера–Коши

Система для численного расчета функции решения методом Эйлера–Коши выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x; \\ K_1 = \Delta x \cdot f(x^{(k-1)}, y^{(k-1)}); \\ K_2 = \Delta x \cdot f(x^{(k-1)} + \Delta x, y^{(k-1)} + K_1); \\ y^{(k)} = y^{(k-1)} + \frac{1}{2} \cdot [K_1 + K_2] \end{cases}$$

Несмотря на значительное повышение точности решения дифференциальных уравнений модифицированными методами Эйлера по сравнению с простым методом Эйлера, для ряда задач она остается недостаточной. На помощь приходят методы более высоких порядков точности, требующие большего количества промежуточных расчетов. Один из них – **метод Рунге–Кутты 4-го порядка**. Система для численного расчета функции решения этим методом имеет вид:

$$\begin{cases} x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x; \\ K_1 = \Delta x \cdot f(x^{(k-1)}, y^{(k-1)}); \\ K_2 = \Delta x \cdot f\left(x^{(k-1)} + \frac{\Delta x}{2}, y^{(k-1)} + \frac{K_1}{2}\right); \\ K_3 = \Delta x \cdot f\left(x^{(k-1)} + \frac{\Delta x}{2}, y^{(k-1)} + \frac{K_2}{2}\right); \\ K_4 = \Delta x \cdot f(x^{(k-1)} + \Delta x, y^{(k-1)} + K_3); \\ y^{(k)} = y^{(k-1)} + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4). \end{cases}$$

9.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах решения дифференциальных уравнений, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Задача. Решить различными численными методами обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты в табличной и графической формах,

провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на точность решения дифференциальных уравнений.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и численным методам решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (таблица) с коэффициентами дифференциального уравнения вида: $y' = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3y + a_4xy$ и параметрами настройки численных методов его решения: dx – шаг интегрирования; x_0, y_0 – начальное условие; x_k – координата точки, в которой требуется найти решение дифференциального уравнения.

3. На Листе 1 привести исходные данные для расчета, указанные в выданном варианте задания.

4. На Листе 2 в табличной форме представить решения заданного дифференциального уравнения с указанными в варианте параметрами настройки на интервале $(\min\{x_0, x_k\}; \max\{x_0, x_k\})$ следующими методами:

- Эйлера (Э, метод 1);
- модифицированным Эйлера (МЭ) или Эйлера–Коши (ЭК, метод 2);
- Рунге–Кутты 4-го порядка (РК, метод 3);
- Рунге–Кутты 4-го порядка с шагом интегрирования, уменьшенным в 10 раз по сравнению с шагом, указанным в варианте задания (метод 4).

5. На Листе 3 построить график зависимостей $y = y(x)$, полученных с помощью методов, перечисленных в п. 4. Для построения использовать рядом расположенные 4–5 точек, включая x_k . Считая зависимость, полученную с использованием метода 4, наиболее точной, сделать выводы в отношении точности методов 1–3.

6. На Листе 4 для метода, указанного в варианте задания, в табличной форме представить четыре решения дифференциального уравнения на интервале $(\min\{x_0, x_k\}; \max\{x_0, x_k\})$ со значениями шага интегрирования, уменьшенными в 2, 4, 6 и 8 раз по сравнению с первоначальным.

Варианты задания для работы 7

№ варианта	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	dx	$x_0; y_0$	x_k	Вариант метода 2 для п. 4	Вариант метода для п. 6
1	1,281	-0,002	0,162	-0,3196	0,0931	0,15	3,15; -1,50	5,70	МЭ	РК
2	1,893	0,933	-0,002	-0,1128	0,0615	0,15	-4,80; 0,15	-7,05	ЭК	Э
3	-1,515	0,854	-0,313	0,4914	0,0172	0,05	2,10; 1,95	1,30	МЭ	МЭ
4	0,990	-0,533	0,930	-0,1836	-0,0140	0,15	-2,15; 0,70	-0,50	ЭК	РК
5	0,995	0,004	-0,182	0,0664	-0,0076	0,10	-2,20; 0,65	-1,20	МЭ	Э
6	-1,801	-0,541	-0,242	0,2940	0,0243	0,10	3,05; 0,90	4,85	ЭК	ЭК
7	0,595	-0,899	0,620	-0,2207	-0,0640	0,15	2,65; 0,35	0,55	МЭ	РК
8	-0,422	0,760	-0,833	-0,4917	0,0904	0,15	-1,60; 0,85	-3,70	ЭК	Э
9	1,042	0,049	-0,412	0,1626	-0,0292	0,05	-3,50; -0,60	-4,60	МЭ	МЭ
10	1,035	0,550	-0,694	0,3341	-0,0631	0,15	-1,20; -0,90	2,55	ЭК	РК
11	0,452	0,875	0,505	-0,1680	-0,0781	0,15	-1,75; -0,40	0,20	МЭ	Э
12	-0,736	-0,856	0,432	0,0112	-0,0587	0,10	-0,55; 0,70	-1,85	ЭК	ЭК
13	-0,972	0,285	-0,259	-0,4414	0,0578	0,05	-2,65; -1,75	-3,20	МЭ	РК
14	-1,560	0,694	-0,235	-0,2167	-0,0951	0,15	5,00; -1,35	1,40	ЭК	Э
15	1,816	0,935	0,082	-0,0798	-0,0254	0,15	3,00; -1,25	0,75	МЭ	МЭ
16	1,310	-0,058	-0,704	-0,2083	0,0260	0,05	3,00; 1,55	3,60	ЭК	РК
17	1,510	0,891	-0,238	-0,4161	-0,0542	0,10	-1,50; -0,45	-2,50	МЭ	Э
18	1,714	0,313	-0,447	0,1119	-0,0206	0,05	-1,85; -1,30	-1,20	ЭК	ЭК
19	1,428	0,642	-0,429	0,0700	0,0149	0,05	-5,00; 1,20	-6,00	МЭ	РК
20	1,258	0,981	-0,927	-0,1048	-0,0460	0,05	-4,85; 1,70	-4,05	ЭК	Э
21	0,939	-0,184	-0,786	0,1536	-0,0456	0,10	3,75; 0,95	5,15	МЭ	МЭ
22	0,571	-0,794	-0,612	0,3163	0,0096	0,05	2,35; -0,20	1,30	ЭК	РК
23	1,757	-0,734	0,971	-0,0560	-0,0126	0,10	0,60; 1,95	2,30	МЭ	Э
24	-0,904	-0,848	0,229	0,0109	0,0723	0,15	0,55; 1,90	3,55	ЭК	ЭК

7. На Листе 5 построить графики зависимостей $y = y(x)$, полученные методом, указанным в варианте задания для п. 6, с различными значениями шага интегрирования: исходным по варианту и уменьшенным, как указано в п. 6. Добавить к построенным графикам зависимость, полученную по методу 4. Считая последнюю зависимость наиболее точной, сделать выводы в отношении влияния величины шага интегрирования на точность получаемого решения.

8. На Листе 6 рассчитать абсолютные ошибки расчета величины $y(x_k)$ по методам 1–3 с указанным в варианте значением шага интегрирования и заданным методом при различных (исходном и уменьшенных в соответствии с п. 6) значениях шага интегрирования, в сравнении с величиной $y(x_k)$, полученной по методу 4. Построить столбчатую диаграмму, иллюстрирующую величину абсолютной ошибки для каждого метода, и график зависимости абсолютной ошибки расчета заданным методом от количества точек интегрирования. Сделать выводы по диаграмме и графику.

9. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Что является общим решением обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка?

2. Что является частным решением обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка?

3. В каком виде получается решение обыкновенного дифференциального уравнения численным методом?

4. Перечислите известные вам методы численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

5. Какие из известных вам методов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений являются наименее и наиболее точными?

6. От каких факторов зависит точность решения дифференциального уравнения численными методами?

7. Что такое шаг интегрирования?

8. Как связаны между собой шаг интегрирования дифференциального уравнения и количество точек его частного решения?

9. Проиллюстрируйте графически ход численного решения дифференци-

ального уравнения методом Эйлера.

10. Проиллюстрируйте графически ход численного решения дифференциального уравнения модифицированным методом Эйлера.

11. Проиллюстрируйте графически ход численного решения дифференциального уравнения методом Эйлера–Коши.

9.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 7 на следующем примере. Требуется решить дифференциальное уравнение вида $y' = 0,291 + 0,81x - 0,457x^2 - 0,2532y + 0,018xy$ на отрезке $[-4,2; -3,4]$ с шагом интегрирования $dx = 0,05$ при известном начальном условии $y(-4,2) = 0,7$ методами Эйлера, Эйлера модифицированным и Рунге–Кутты 4-го порядка.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные аналогично примеру (рис. 3.4) для лабораторной работы 1.

Решения дифференциального уравнения заданными методами оформляются в табличном виде на Листе 2 по образцу (рис. 9.4). На этом рисунке дан образец оформления решения дифференциального уравнения методами Эйлера, модифицированным Эйлера и Рунге–Кутты 4-го порядка.

Метод Эйлера			Модифицированный метод Эйлера				Метод Рунге-Кутты 4-го порядка (dx=0,05)					
x	y	K ₁	x	y	K ₁	K ₂	x	y	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄
-4,200	0,700	-0,570	-4,200	0,700	-0,285	-0,560	-4,200	0,700	-0,570	-0,560	-0,560	-0,549
-4,150	0,130	-0,549	-4,150	0,140	-0,275	-0,539	-4,150	0,140	-0,549	-0,539	-0,539	-0,529
-4,100	-0,419	-0,529	-4,100	-0,399	-0,265	-0,519	-4,100	-0,399	-0,529	-0,519	-0,519	-0,509
-4,050	-0,948	-0,509	-4,050	-0,918	-0,255	-0,500	-4,050	-0,918	-0,509	-0,500	-0,500	-0,490
-4,000	-1,457	-0,489	-4,000	-1,417	-0,245	-0,480	-4,000	-1,418	-0,490	-0,480	-0,481	-0,471
-3,950	-1,946	-0,470	-3,950	-1,898	-0,236	-0,462	-3,950	-1,898	-0,471	-0,462	-0,462	-0,453
-3,900	-2,417	-0,452	-3,900	-2,360	-0,226	-0,444	-3,900	-2,360	-0,453	-0,444	-0,444	-0,435
-3,850	-2,869	-0,434	-3,850	-2,804	-0,217	-0,426	-3,850	-2,804	-0,435	-0,426	-0,426	-0,417
-3,800	-3,302	-0,416	-3,800	-3,230	-0,209	-0,409	-3,800	-3,230	-0,417	-0,409	-0,409	-0,400
-3,750	-3,719	-0,399	-3,750	-3,638	-0,200	-0,392	-3,750	-3,639	-0,400	-0,392	-0,392	-0,384
-3,700	-4,118	-0,382	-3,700	-4,030	-0,192	-0,375	-3,700	-4,031	-0,384	-0,375	-0,376	-0,367
-3,650	-4,500	-0,366	-3,650	-4,406	-0,184	-0,359	-3,650	-4,406	-0,367	-0,359	-0,360	-0,352
-3,600	-4,866	-0,350	-3,600	-4,765	-0,176	-0,344	-3,600	-4,766	-0,352	-0,344	-0,344	-0,336
-3,550	-5,216	-0,334	-3,550	-5,109	-0,168	-0,329	-3,550	-5,110	-0,336	-0,329	-0,329	-0,321
-3,500	-5,550	-0,319	-3,500	-5,438	-0,161	-0,314	-3,500	-5,438	-0,321	-0,314	-0,314	-0,306
-3,450	-5,870	-0,305	-3,450	-5,751	-0,153	-0,299	-3,450	-5,752	-0,306	-0,299	-0,299	-0,292
-3,400	-6,174		-3,400	-6,051			-3,400	-6,051				

Рис. 9.4. Табличное отображение решения дифференциального уравнения

На рис. 9.5 и 9.6 приведены примеры оформления графических зависимостей, представляющих собой результаты решения дифференциального уравнения различными методами и с разным шагом интегрирования, а на рис. 9.7 – результаты анализа влияния этих факторов на получаемый результат.

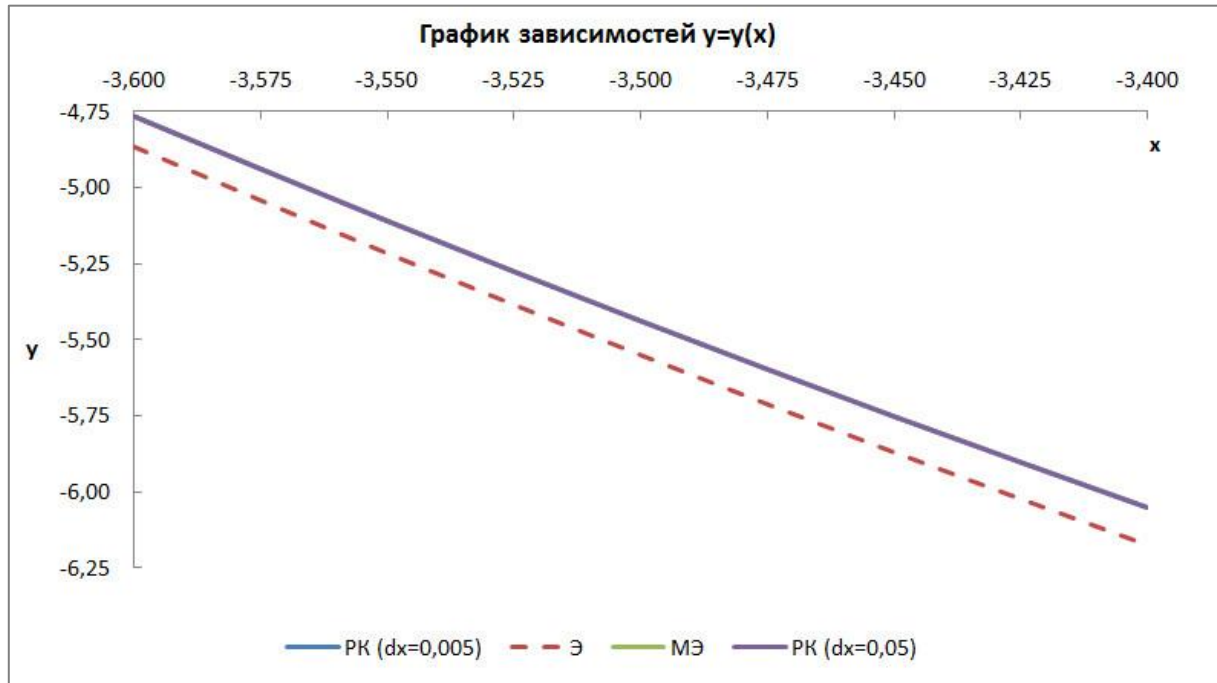


Рис. 9.5. Оформление графика зависимостей $y = y(x)$ для анализа влияния выбора метода на точность решения дифференциального уравнения

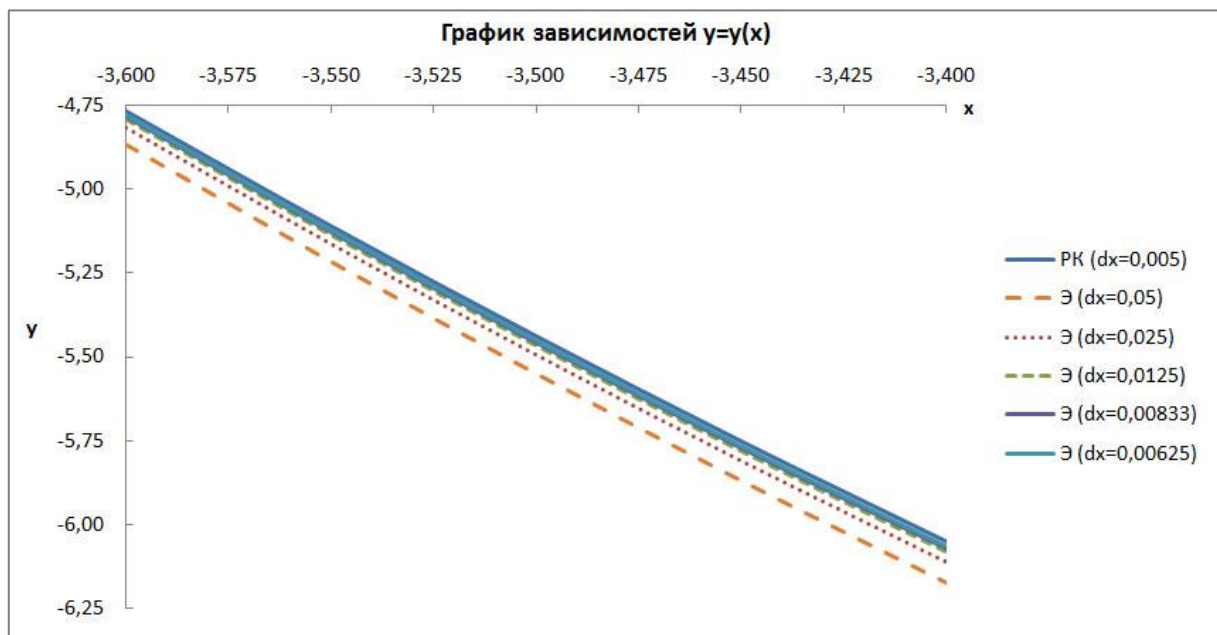


Рис. 9.6. Оформление графика зависимостей $y = y(x)$ для анализа влияния размера шага интегрирования на точность решения дифференциального уравнения

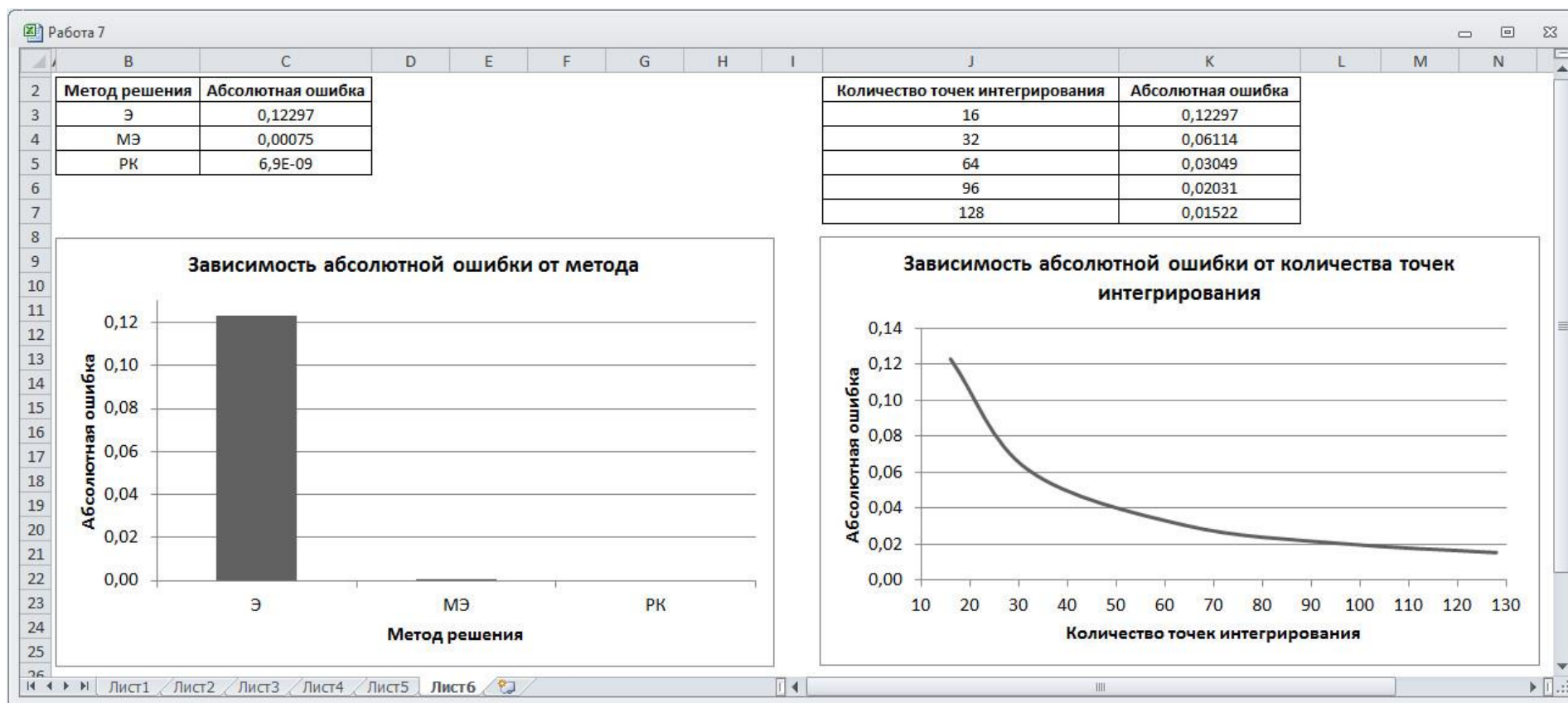


Рис. 9.7. Оформление диаграммы и графика для анализа влияния выбора метода и количества точек интегрирования на точность решения дифференциального уравнения

Так, график зависимостей $y = y(x)$, используемый для анализа влияния выбора метода решения дифференциального уравнения на точность получаемого результата, оформляется на Листе 3 по образцу (рис. 9.5). По приведенному графику делается вывод о степени близости тех или иных методов по точности решения заданного дифференциального уравнения и собственно о точности различных методов.

График зависимостей $y = y(x)$, используемый для анализа влияния размера шага интегрирования на точность получаемого результата, оформляется на Листе 5 аналогично предыдущему образцу (рис. 9.6). По приведенному графику делается вывод о влиянии выбранной величины шага интегрирования на точность решения дифференциального уравнения.

Анализ влияния выбора метода и шага интегрирования на точность решения дифференциального уравнения завершается с использованием диаграммы и графика зависимости абсолютной ошибки от вышеназванных факторов. Соответствующий Лист 6 книги MS Excel оформляется, как показано на рис. 9.7. По диаграмме и графику делается вывод о влиянии выбранного метода решения и шага (количества точек) интегрирования на точность решения дифференциального уравнения.

10. Работа 8. Численная оптимизация в задачах с одномерным критерием в Microsoft Excel

10.1. Численные методы оптимизации функций с одним неизвестным

Целью решения задачи оптимизации функции одной переменной является нахождение такого значения переменной из области ее допустимых значений, при котором обеспечивается наилучшее (минимальное или максимальное) значение критерия оптимизации с учетом имеющихся в задаче ограничений.

Одномерный критерий оптимизации (целевая функция) представляет собой некоторую функцию одной переменной $y = R(x)$, по принимаемым значениям которой можно судить об оптимальности предъявляемого на ее вход аргумента.

Если наилучшим значением оптимизируемой переменной считается то,

которое обеспечивает минимальное значение критерия, говорят о **задаче минимизации**. Если требуется найти переменную, обеспечивающую максимум критерия, – это **задача максимизации**.

Функция, описывающая критерий оптимизации, может иметь как **локальные** (максимальные или минимальные значения критерия в некотором ограниченном интервале изменения переменных), так и **глобальные** (максимальные или минимальные значения критерия во всей области определения переменных) экстремумы. Глобальный максимум или глобальный минимум целевой функции обычно бывают единичными (исключение – редкие случаи равновеликих глобальных экстремумов). Количество локальных экстремумов определяется сложностью критерия оптимизации, в том числе количеством оптимизируемых переменных. При решении задачи оптимизации требуется найти точку глобального оптимума, удовлетворяющую имеющимся ограничениям, а наличие локальных оптимумов, как правило, затрудняет процесс поиска.

При оптимизации функций выделяют три основные группы численных методов: детерминированного, градиентного и случайного поисков. Однако для одномерной оптимизации используется только детерминированный поиск, основанный на расчете значений оптимизируемой переменной на текущем шаге в зависимости от величин критерия оптимизации в нескольких точках рассматриваемого интервала локализации экстремума. Количество таких точек и их месторасположение на координатной прямой определяется используемым методом. В работе рассматриваются методы локализации экстремума, золотого сечения и чисел Фибоначчи.

Алгоритм **метода локализации экстремума** следующий:

1. Задается начальный интервал поиска точки оптимума $[a, b]$ (рис. 10.1) и точность вычисления ε ;

2. Заданный интервал делится на четыре равные части тремя точками x_1, x_2, x_3 с использованием следующих расчетных соотношений:

$$\Delta x = (b - a) / 4;$$

$$x_j = a + j \cdot \Delta x, \quad j = \overline{1, 3};$$

3. Определяются значения критерия оптимизации в найденных точках:

$$R(x_1), R(x_2), R(x_3);$$

4. Из трех точек внутри интервала $[a, b]$ выбирается та (x_{opt}), в которой критерий оптимизации имеет наилучшее (наименьшее – для задачи минимизации или наибольшее – для задачи максимизации) значение:

$$R(x_{\text{opt}}) = \text{opt}\{R(x_1), R(x_2), R(x_3)\}.$$

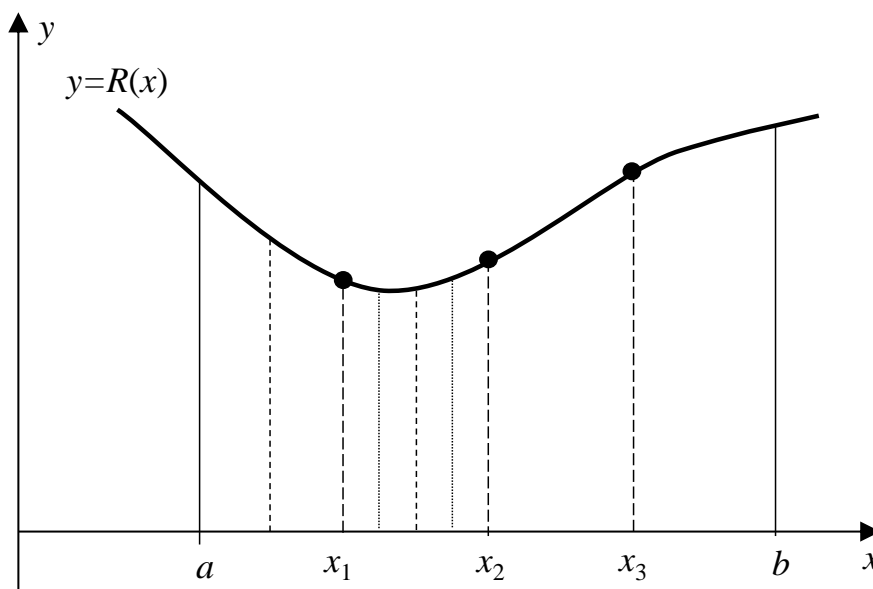


Рис. 10.1. Графическая интерпретация метода локализации экстремума

В редких, но теоретически возможных случаях, когда сразу две или все три полученные точки имеют одинаково лучшее значение, в качестве x_{opt} принимается их среднеарифметическое значение;

5. Вдвое сужается интервал поиска точки оптимума:

$$a = x_{\text{opt}} - \Delta x;$$

$$b = x_{\text{opt}} + \Delta x;$$

6. Процедура повторяется с п. 2 до тех пор, пока не будет выполнено условие окончания вычисления:

$$\frac{b-a}{2} \leq \varepsilon. \quad (10.1)$$

В **методе золотого сечения** в процессе поиска точки оптимума происходит деление исходного интервала двумя точками: x_1, x_2 (рис. 10.2) в соответствии с правилом, получившим название золотого сечения:

$$\frac{x_1 - a}{b - a} = \frac{b - x_2}{b - a} = \frac{x_2 - x_1}{x_2 - a} = \frac{x_2 - x_1}{b - x_1} = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \approx 0,382.$$

Алгоритм метода следующий:

1. Задается начальный интервал локализации точки оптимума $[a, b]$ и точность ее вычисления ε ;
2. Заданный интервал делится на три части точками x_1, x_2 с использовани-

ем следующих расчетных соотношений:

$$x_1 = a + Z \cdot (b - a); \quad (10.2)$$

$$x_2 = b + Z \cdot (a - b); \quad (10.3)$$

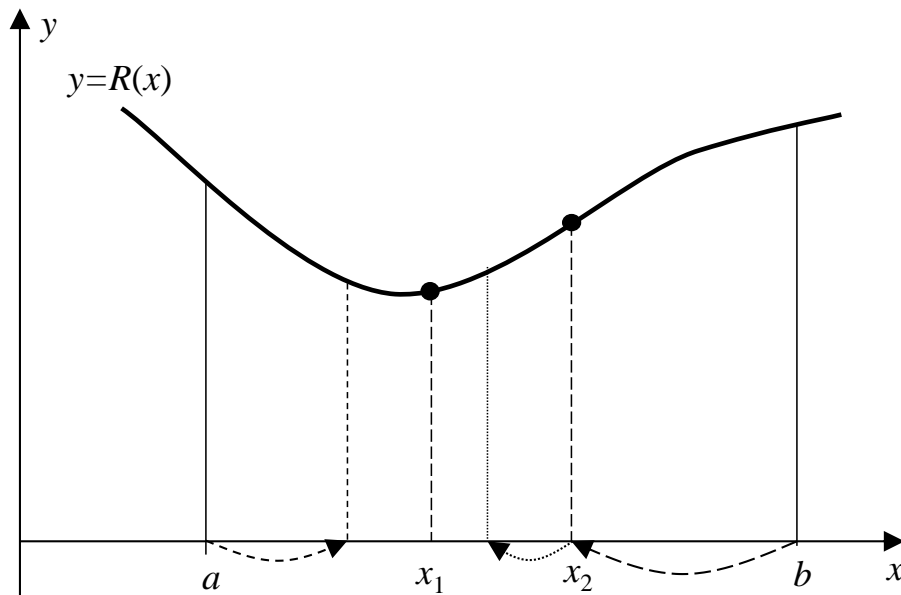


Рис. 10.2. Графическая интерпретация метода золотого сечения

3. Определяются значения критерия оптимизации в найденных точках:

$$R(x_1), R(x_2);$$

4. Полученные значения $R(x_1)$ и $R(x_2)$ сравниваются между собой:

– если $R(x_1)$ лучше, чем $R(x_2)$, то правая граница интервала смещается в точку x_2 , точка x_2 смещается в точку x_1 :

$$b = x_2;$$

$$x_2 = x_1,$$

а новое значение x_1 вычисляется по формуле (10.2) с учетом новых границ интервала локализации оптимума;

– если $R(x_2)$ лучше, чем $R(x_1)$, то левая граница интервала смещается в точку x_1 , точка x_1 смещается в точку x_2 :

$$a = x_1;$$

$$x_1 = x_2,$$

а новое значение x_2 вычисляется по формуле (10.3) с учетом новых границ интервала локализации оптимума;

– в редких, но теоретически возможных случаях, когда $R(x_1) = R(x_2)$, левая и правая границы интервала смещаются соответственно в точки x_1 и x_2 :

$$a = x_1;$$

$$b = x_2,$$

а новые значения x_1 и x_2 вычисляются по формулам (10.2) и (10.3) с учетом новых границ интервала локализации оптимума;

5. Процедура повторяется с п. 3 до тех пор, пока не будет выполнено условие окончания вычисления (10.1).

Метод чисел Фибоначчи основан на использовании последовательности Фибоначчи, описываемой соотношениями:

$$F_0 = F_1 = 1,$$

$$F_i = F_{i-1} + F_{i-2}, \quad \forall i > 1$$

для вычисления положения промежуточных точек в исходном интервале.

Таким образом, последовательность чисел Фибоначчи выглядит следующим образом:

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	...
F_i	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	144	233	...

Алгоритм данного метода следующий:

1. Задается начальный интервал поиска точки оптимума $[a, b]$ и точность вычисления ε ;

2. Определяется число Фибоначчи F_I , удовлетворяющее условию:

$$F_{I-1} < N < F_I,$$

где

$$N = (b - a) / \varepsilon;$$

3. Рассчитывается минимальный шаг поиска точки оптимума:

$$\Delta x = (b - a) / F_I;$$

4. Заданный интервал $[a, b]$ делится на три части точками x_1, x_2 в соответствии со следующими расчетными соотношениями:

$$x_1^{(k)} = a + \Delta x \cdot F_{I-k-1}; \quad (10.4)$$

$$x_2^{(k)} = a + \Delta x \cdot F_{I-k}, \quad (10.5)$$

где k – порядковый номер шага выполнения данной расчетной процедуры в цикле ($k = \overline{1, I-1}$);

5. Определяются значения критерия оптимизации в найденных точках:

$$R(x_1), R(x_2);$$

6. Сравниваются значения критерия оптимизации в промежуточных точках аналогично методу золотого сечения:

– если $R(x_1)$ лучше, чем $R(x_2)$, то правая граница интервала смещается в точку x_2 , точка x_2 смещается в точку x_1 , а новое значение x_1 вычисляется по формуле (10.4);

– если $R(x_2)$ лучше, чем $R(x_1)$, то левая граница интервала смещается в точку x_1 , точка x_1 смещается в точку x_2 , а новое значение x_2 вычисляется по формуле (10.5);

– в редких, но теоретически возможных случаях, когда $R(x_1) = R(x_2)$, левая и правая границы интервала смещаются соответственно в точки x_1 и x_2 , а новые значения x_1 и x_2 вычисляются по формулам (10.4) и (10.5);

7. Процедура повторяется с п. 5, пока $k < I$.

Графическая интерпретация хода решения данным методом схожа с методом золотого сечения.

10.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах одномерной оптимизации, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного решения задач оптимизации функций одной переменной.

Задача. Указанным численным методом найти координаты локальных и глобального оптимумов заданного типа с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты расчетов в табличной форме, провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на точность и скорость решения задачи одномерной оптимизации.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и численным методам решения задачи оптимизации функции одной переменной.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (таблица) с коэффициентами критерия оптимизации вида:

$$R(x) = a_0 + a_1x + a_2 \sin(a_3x),$$

интервалом локализации оптимальных значений независимой переменной,

Варианты задания для работы 7

№ варианта	a_0	a_1	a_2	a_3	x_0	x_k	Тип экстремумов	Вариант метода
1	2,02	1,01	3,36	0,86	−9,5	12,0	Минимумы	ЛЭ
2	−2,80	−0,41	4,30	0,81	−12,0	9,5	Максимумы	ЗС
3	1,23	−0,56	−4,46	1,06	−12,0	8,0	Минимумы	ЧФ
4	3,72	0,36	4,71	1,14	−6,0	10,0	Максимумы	ЛЭ
5	1,80	0,82	−2,29	0,77	−7,5	14,0	Минимумы	ЗС
6	0,80	1,01	−4,68	1,04	−11,0	10,0	Максимумы	ЧФ
7	1,68	0,76	−3,70	1,00	−11,0	8,0	Минимумы	ЛЭ
8	−3,37	−1,01	4,06	0,70	−14,0	11,0	Максимумы	ЗС
9	−3,76	0,30	−2,35	0,76	−14,0	14,0	Минимумы	ЧФ
10	−0,18	−0,42	4,95	1,20	−9,5	10,0	Максимумы	ЛЭ
11	0,55	0,70	−4,31	0,61	−14,0	13,0	Минимумы	ЗС
12	4,23	−1,03	4,94	0,80	−13,0	14,0	Максимумы	ЧФ
13	−1,61	−0,88	−2,39	0,79	−13,0	12,0	Минимумы	ЛЭ
14	0,59	−0,88	2,57	1,10	−6,5	11,0	Максимумы	ЗС
15	−4,56	0,51	−3,74	1,07	−10,0	10,0	Минимумы	ЧФ
16	4,47	1,07	−3,92	0,73	−13,0	12,0	Максимумы	ЛЭ
17	3,19	0,49	2,98	1,11	−14,0	13,0	Минимумы	ЗС
18	−2,41	−0,89	3,36	1,03	−14,0	12,0	Максимумы	ЧФ
19	2,99	0,75	−3,40	1,18	−15,0	9,5	Минимумы	ЛЭ
20	−2,09	−1,02	3,06	1,08	−10,0	15,0	Максимумы	ЗС
21	−4,15	−0,76	3,01	1,14	−13,0	15,0	Минимумы	ЧФ
22	−4,06	0,78	−3,25	0,69	−14,0	12,0	Максимумы	ЛЭ
23	−3,50	0,72	−4,81	0,99	−13,0	8,5	Минимумы	ЗС
24	−1,76	0,85	−4,56	1,12	−10,0	7,0	Максимумы	ЧФ

типом экстремумов (минимумы или максимумы) и одного из методов ее решения:

- локализации экстремума (ЛЭ);
- золотого сечения (ЗС);
- чисел Фибоначчи (ЧФ).

3. На Листе 1 привести исходные данные для расчета, указанные в выданном варианте задания.

4. На Листе 2 построить график оптимизируемой функции и перечислить координаты ее глобальных и локальных минимумов и максимумов (с точностью до 0,5) в указанном интервале локализации.

5. На Листе 3 в табличной форме представить решения задачи оптимизации функции одной переменной для всех экстремумов указанного в варианте задания типа с точностью 0,001.

6. На Листе 4 в табличной форме представить решения задачи оптимизации функции одной переменной для глобального экстремума указанного в варианте задания типа со значениями точности 0,1, 0,01, 0,001, 0,0001.

7. На Листе 5 построить график зависимости количества шагов расчета координаты глобального оптимума от выбранной точности. Для независимой переменной использовать логарифмическую шкалу. Сделать выводы по рисунку.

8. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Изобразите на рисунке пример одномерной функции, имеющей несколько максимумов и минимумов. Укажите среди них глобальные и локальные оптимумы.

2. Какова цель решения задачи оптимизации?

3. Сформулируйте необходимое и достаточное условия существования оптимума функции одной переменной.

4. Какие вы знаете группы методов решения оптимизационных задач?

5. Назовите методы, использующиеся для решения задач одномерной оптимизации.

6. Проиллюстрируйте и кратко опишите алгоритм работы одного из ме-

тодов:

- локализации экстремума;
- золотого сечения;
- чисел Фибоначчи.

7. Назовите один или несколько численных методов одномерной оптимизации, в которых за один шаг расчетного цикла интервал поиска оптимума уменьшается наиболее сильно.

8. Назовите один или несколько численных методов одномерной оптимизации, в которых за один шаг расчетного цикла требуется наименьшее количество расчетов значения критерия.

9. Как влияет выбор метода решения задачи одномерной оптимизации на точность получаемого решения?

10. Как влияет выбранная точность поиска точки оптимума на продолжительность работы алгоритма?

11. Как определяются значения чисел, входящих в последовательность Фибоначчи?

12. Во сколько раз, как правило, уменьшается интервал локализации точки оптимума за один шаг расчетного цикла одного из методов:

- локализации экстремума;
- золотого сечения;
- чисел Фибоначчи.

10.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Порядок выполнения и оформления лабораторной работы 8 рассматривается на следующем примере. Для критерия вида:

$$R(x) = 2,25 + 1,75x - 1,75\sin(-2x),$$

требуется найти точки локальных и глобального минимумов методом локализации экстремума в интервале локализации оптимальных значений $(-5; 5)$.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные аналогично примеру (рис. 3.4) для лабораторной работы 1.

График оптимизируемой функции оформляется на Листе 2 по образцу (рис. 3.5). В таблице под графиком перечисляются координаты ее глобальных и локальных минимумов и максимумов (с точностью до 0,5) в

указанном интервале локализации ($-5, 5$). В этой таблице должны быть выделены цветом примерные значения глобальных экстремумов.

На Листе 3 в табличном виде представляются основные этапы поиска локальных и глобального минимумов с точностью 0,001 методом локализации экстремума (рис. 10.3).

Метод ЛЭ, $\varepsilon=0,001$, $x \approx -4,0$									
a	b	Δx	x_1	x_2	x_3	$R(x_1)$	$R(x_2)$	$R(x_3)$	$(b-a)/2$
-5,000	-3,000	0,500	-4,500	-4,000	-3,500	-6,3462	-6,4814	-5,0247	1,000
-4,500	-3,500	0,250	-4,250	-4,000	-3,750	-6,5849	-6,4814	-5,9540	0,500
-4,500	-4,000	0,125	-4,375	-4,250	-4,125	-6,4995	-6,5849	-6,5833	0,250
-4,375	-4,125	0,063	-4,313	-4,250	-4,188	-6,5520	-6,5849	-6,5959	0,125
-4,250	-4,125	0,031	-4,219	-4,188	-4,156	-6,5932	-6,5959	-6,5927	0,063
-4,219	-4,156	0,016	-4,203	-4,188	-4,172	-6,5953	-6,5959	-6,5951	0,031
-4,203	-4,172	0,008	-4,195	-4,188	-4,180	-6,5958	-6,5959	-6,5957	0,016
-4,195	-4,180	0,004	-4,191	-4,188	-4,184	-6,59591	-6,59592	-6,59585	0,008
-4,191	-4,184	0,002	-4,189	-4,188	-4,186	-6,59593	-6,59592	-6,59590	0,004
-4,191	-4,188	0,001	-4,190	-4,189	-4,188	-6,595919	-6,595926	-6,595927	0,002
-4,189	-4,188	0,000	-4,189	-4,188	-4,188	-6,5959272	-6,5959270	-6,5959254	0,001

Метод ЛЭ, $\varepsilon=0,001$, $x \approx 1,0$									
a	b	Δx	x_1	x_2	x_3	$R(x_1)$	$R(x_2)$	$R(x_3)$	$(b-a)/2$
-2,000	0,000	0,500	-1,500	-1,000	-0,500	-0,6220	-1,0913	-0,0976	1,000
-1,500	-0,500	0,250	-1,250	-1,000	-0,750	-0,9848	-1,0913	-0,8081	0,500

Рис. 10.3. Табличное отображение основных этапов поиска оптимумов уравнения методом локализации экстремума

Аналогично на Листе 4 оформляется табличное отображение основных этапов поиска глобального оптимума заданным методом (локализации экстремума) с различными точностями.

На Листе 5 строится график зависимости количества шагов от выбранной точности, по которому делается вывод о влиянии точности расчетов на количество проделанных итераций, как показано в примере на рис. 5.2 для лабораторной работы 3.

11. Работа 9. Численная оптимизация в задачах с многомерным критерием в Microsoft Excel

11.1. Численные методы многомерной оптимизации

Целью решения задачи оптимизации функции нескольких переменных (многомерной оптимизации) является нахождение такого вектора значений переменных из области их допустимых значений, при которых обеспечивается наилучшее (минимальное или максимальное) значение критерия оптимизации с учетом имеющихся в задаче ограничений.

Многомерный критерий оптимизации представляет собой некоторую функцию нескольких (n) переменных $y = R(x_1, x_2, \dots, x_n)$, по принимаемым значениям которой можно судить об оптимальности предъявляемого на ее вход вектора аргументов.

При многомерной оптимизации в работе используются методы детерминированного и градиентного поисков. Из первой группы методов используются метод поочередного изменения переменных и сканирования. Из второй группы – методы релаксаций, градиента и наискорейшего спуска.

Метод поочередного изменения переменных заключается в нахождении точки оптимума функции нескольких переменных по очереди вдоль каждой из соответствующих им n осей с постепенным уменьшением шага поиска. Алгоритм метода следующий:

1. Задаются точка начального приближения $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ (рис. 11.1), начальный шаг поиска h и точность решения задачи ε , рассчитывается значение критерия оптимизации в начальной точке $R(x^{(0)})$, которое сохраняется в качестве лучшего промежуточного оптимума;

2. Выбирается следующая по порядку переменная j (в начале работы алгоритма и после последней переменной – первая), вдоль которой будет осуществляться поиск; определяется значение критерия оптимизации в двух точках, отстоящих от последней лучшей точки на величину шага h , в положительном и отрицательном направлениях оси x_j :

$$R(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_j^{(k)} + h, \dots, x_m^{(k)}), R(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_j^{(k)} - h, \dots, x_m^{(k)});$$

3. Определяется возможность улучшения целевой функции в положительном или отрицательном направлении. Если оба найденных значения крите-

рия оптимизации хуже, чем в последней лучшей точке, алгоритм возвращается к п. 2, иначе коэффициенту d , отвечающему за знак осевого направления, присваивается значение 1, если функция улучшилась в положительном направлении оси, или -1 , если функция улучшилась в отрицательном направлении оси.

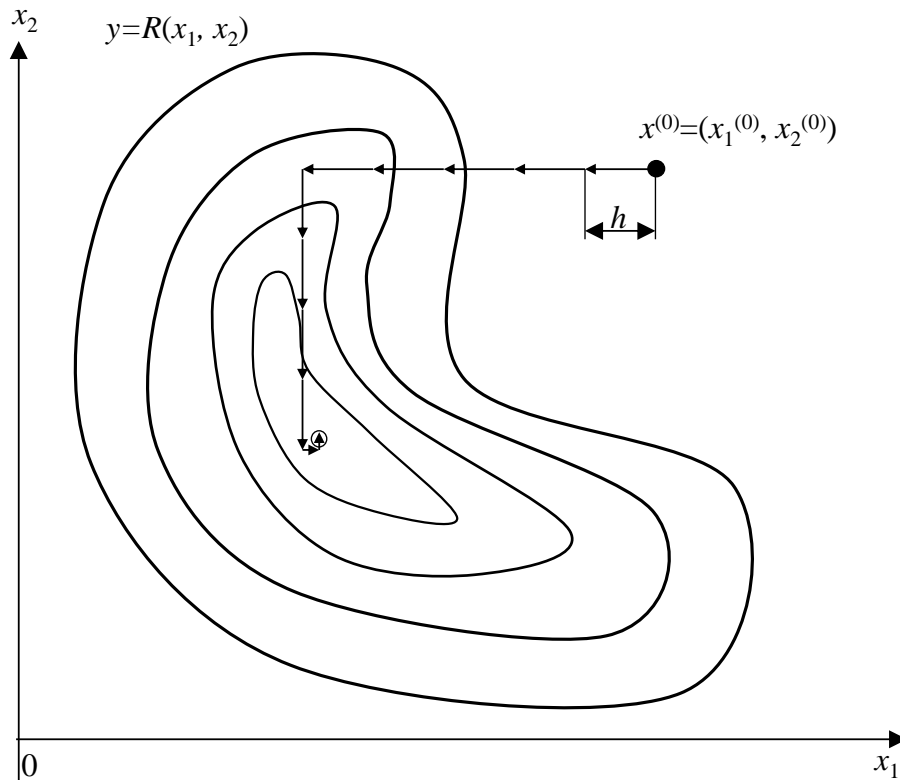


Рис. 11.1. Графическая интерпретация метода поочередного изменения переменных на примере функции двух переменных

4. Из последней лучшей точки делается серия шагов в осевом направлении улучшения целевой функции:

$$x^{(k)} = (x_1^{(k-1)}, x_2^{(k-1)}, \dots, x_j^{(k-1)} + d \cdot h, \dots, x_m^{(k-1)})$$

с контролем значения критерия оптимизации и сохранением информации о новой лучшей точке, если оно улучшается. Как только целевая функция в новой точке не улучшилась, алгоритм возвращается к п. 2;

5. Если ни по одной из оптимизируемых переменных не удастся найти осевое направление улучшения целевой функции, шаг поиска h уменьшается, например, вдвое;

6. Вычислительный процесс заканчивается, когда при шаге поиска, не превышающем заданную точность ($h \leq \varepsilon$), не удастся найти хотя бы одну переменную, по которой возможно улучшение критерия оптимизации.

При использовании **метода сканирования** вместо одного начального приближения задаются интервалы изменения каждой оптимизируемой переменной, а промежуточные решения получаются в узловых точках сетки, образующейся при делении заданных интервалов на одинаковые по длине подынтервалы (рис. 11.2). Алгоритм метода следующий:

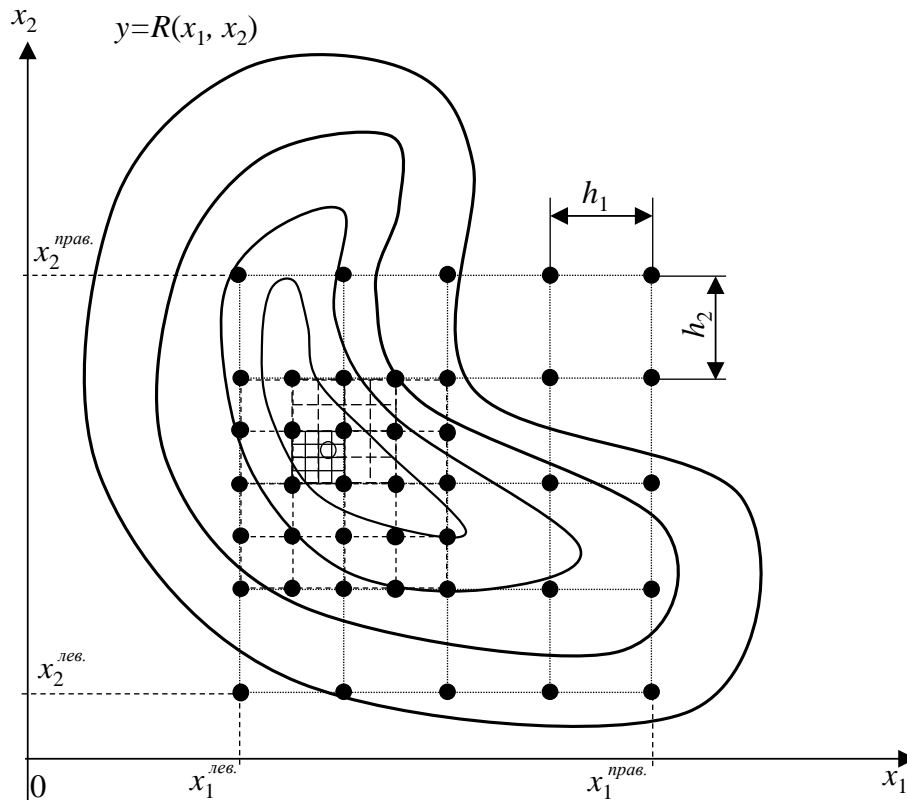


Рис. 11.2. Графическая интерпретация метода сканирования на примере функции двух переменных

1. Задаются интервалы изменения каждой переменной $[x_j^{\text{лев.}}, x_j^{\text{прав.}}]$, количество подынтервалов N , одинаковое для всех переменных, и точность поиска ε ;

2. Определяется расстояние между узлами сетки сканирования по каждой переменной:

$$h_j = (x_j^{\text{прав.}} - x_j^{\text{лев.}}) / N;$$

3. Организуется n циклов по каждой из оптимизируемых переменных для перебора всех узлов сетки сканирования с рассчитанным шагом; для каждого нового узла рассчитывается значение целевой функции и сохраняется информация о лучшем узле;

4. Если выполняется условие:

$$\max_j(h_j) \leq \varepsilon,$$

то вычислительный процесс заканчивается и решением задачи является последний лучший узел, в противном случае уменьшаются интервалы изменения переменных:

$$x_j^{лев.} = \begin{cases} x_j^{лучш.} - h_j, & h_j > \varepsilon; \\ x_j^{лучш.}, & h_j \leq \varepsilon; \end{cases}$$

$$x_j^{прав.} = \begin{cases} x_j^{лучш.} + h_j, & h_j > \varepsilon; \\ x_j^{лучш.}, & h_j \leq \varepsilon \end{cases}$$

и алгоритм возвращается к п. 2.

Как правило, задача решается при одинаковых или сопоставимых по длине интервалах изменения оптимизируемых переменных.

При выборе больших начальных интервалов изменения переменных и малом количестве подынтервалов велика вероятность пропуска глобального решения, попавшего между узлами сетки, однако большое количество подынтервалов приводит к резкому росту количества узлов сетки и, как следствие, объема вычислений.

Алгоритм **метода релаксаций** (рис. 11.3) сводится к выбору переменной, вдоль оси которой целевая функция улучшается наиболее быстро, на основе информации о частных производных в последней лучшей точке:

1. Задаются точка начального приближения $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$, начальный шаг поиска h и точность решения задачи ε , рассчитывается значение критерия оптимизации в начальной точке, которая сохраняется в качестве последней лучшей;

2. Определяются значения частных производных целевой функции по всем оптимизируемым переменным в последней лучшей точке;

3. В зависимости от типа решаемой задачи оптимизации (минимизация или максимизация), величин и знаков частных производных с использованием табл. 11.1 определяется коэффициент (d), учитывающий осевое направление движения к оптимуму. В качестве изменяемой переменной выбираем ту (j), частная производная по которой дала наибольшее по абсолютной величине значение;

4) из последней лучшей точки осуществляется движение вдоль выбранного направления оси изменяемой переменной:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} + d \cdot h.$$

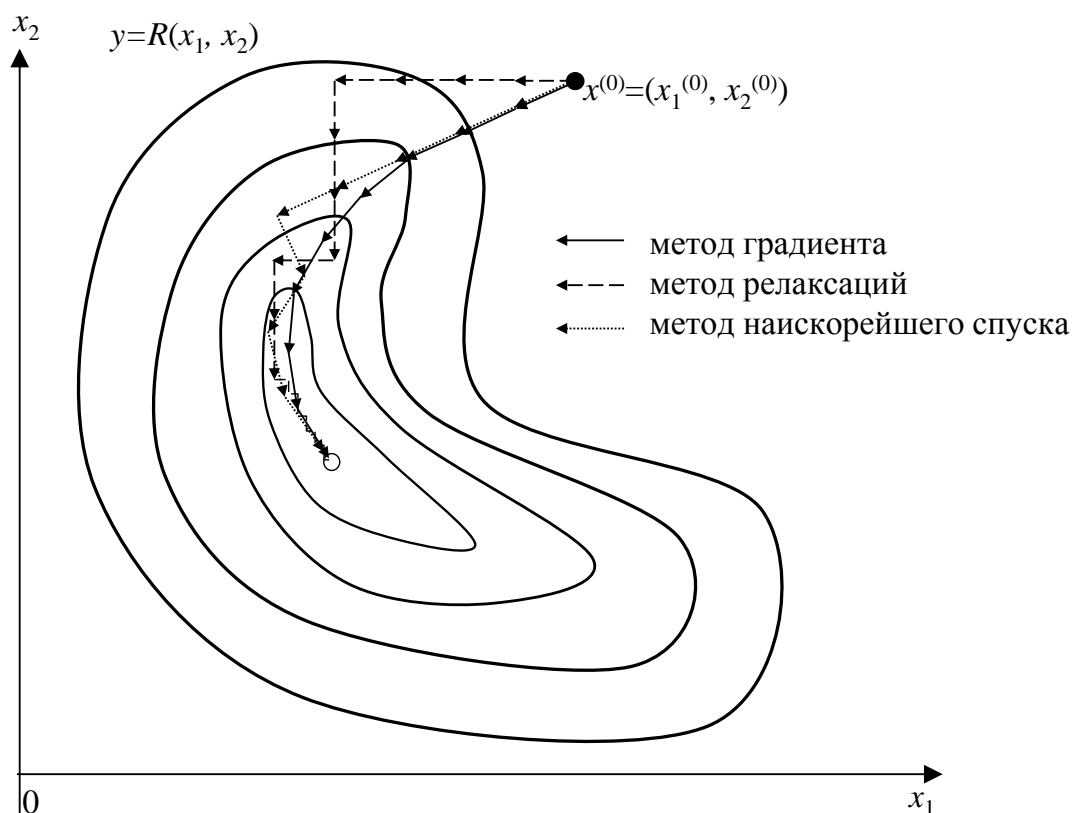


Рис. 11.3. Графическая интерпретация градиентных методов оптимизации функций нескольких переменных на примере функции двух переменных

Таблица 11.1

Выбор осевого направления движения к оптимуму

Тип задачи	Знак производной	Коэффициент d
Минимизация	+	-1
	-	1
Максимизация	+	1
	-	-1

В каждой вновь полученной точке контролируется значение критерия оптимизации. Серия шагов в выбранном направлении продолжается, пока оно улучшается, иначе алгоритм возвращается к п. 2;

5. Если при движении во вновь полученном осевом направлении первый же шаг оказывается неудачным, его величину необходимо уменьшить, например, вдвое, и вернуться к п. 2;

6. Вычислительный процесс завершается, если не удастся достигнуть

улучшения целевой функции ни по одной из оптимизируемых переменных при шаге, удовлетворяющем условию: $h \leq \varepsilon$.

Метод релаксаций характеризуется достаточно большим количеством шагов, выполняемых в процессе поиска оптимума, и малым объемом вычислений, так как расчет частных производных требуется сравнительно редко.

В **методе градиента** (рис. 11.3) расчет частных производных осуществляется на каждом шаге с целью определения направления наискорейшего улучшения целевой функции, и шаг делается строго в этом направлении. Алгоритм метода следующий:

1. Задаются точка начального приближения $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$, начальный шаг поиска h и точность решения задачи ε , рассчитывается значение критерия оптимизации в начальной точке, которая сохраняется в качестве последней лучшей;

2. Определяются значения частных производных целевой функции по всем оптимизируемым переменным в последней лучшей точке и рассчитываются координаты градиента:

$$\beta_j = \frac{\frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_i} \right)^2}}, \quad \forall j = \overline{1, m}; \quad (11.1)$$

3. Выполняется единственный шаг в направлении улучшения целевой функции:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} + d \cdot h \cdot \beta_j, \quad \forall j = \overline{1, m}, \quad (11.2)$$

где коэффициент $d = 1$, если решается задача максимизации, и $d = -1$, если решается задача минимизации. Рассчитывается значение критерия оптимизации в новой точке;

4. Если $R(x^{(k)})$ лучше, чем $R(x^{(k-1)})$, то новая точка запоминается в качестве лучшей и алгоритм возвращается к п. 2, иначе шаг поиска уменьшается, например, вдвое, и также производится возврат к п. 2;

5. Вычислительный процесс останавливается, если не удастся ни разу улучшить целевую функцию при шаге, удовлетворяющем условию: $h \leq \varepsilon$.

Метод градиента позволяет достичь точки оптимума за наименьшее количество шагов, однако объем вычислений оказывается достаточно большим из-за расчета частных производных и координат вектора градиента на каждом

шаге.

Преимущества методов релаксаций и градиента объединены в **методе наискорейшего спуска** (рис. 11.3). Алгоритм данного метода следующий:

1. Задаются точка начального приближения $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$, начальный шаг поиска h и точность решения задачи ε , рассчитывается значение критерия оптимизации в начальной точке, которая сохраняется в качестве последней лучшей;

2. По формуле (11.1) определяются координаты градиента целевой функции в последней лучшей точке;

3. С использованием выражения (11.2) выполняется серия шагов в направлении улучшения целевой функции до тех пор, пока целевой функции продолжает улучшаться. При первом же ухудшении целевой функции алгоритм возвращается к п. 2;

4. Если первый же шаг после пересчета градиента не дает улучшения целевой функции, его размер уменьшается, например, вдвое, и расчет продолжается с п. 3;

5. Вычислительный процесс завершается, если не удастся достичь улучшения целевой функции при шаге, удовлетворяющем условию: $h \leq \varepsilon$.

Таким образом, метод наискорейшего спуска позволяет достичь точки оптимума за достаточно малое количество шагов, при малом объеме дополнительных вычислений частных производных и координат вектора градиента.

11.2. Общие положения. Варианты задания

Цель работы – закрепление знаний о численных методах многомерной оптимизации, их особенностях, преимуществах и недостатках; получение навыков численного решения задач оптимизации функций нескольких переменных.

Задача. Указанными численными методами детерминированного и градиентного поисков найти координаты точки глобального оптимума функции нескольких переменных с использованием табличного процессора MS Excel, оформить результаты расчетов в табличной форме, провести исследование и сделать выводы о влиянии различных факторов на скорость решения задачи многомерной оптимизации.

Ход выполнения работы:

1. Каждому студенту индивидуально получить допуск к выполнению лабораторной работы, ответив на 2–3 вопроса ведущего преподавателя по общей теории и численным методам решения задачи оптимизации функции нескольких переменных.

2. Допущенному студенту получить вариант задания (табл. 11.2) с коэффициентами критерия оптимизации вида:

$$R(x_1, x_2, x_3) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + b_1x_1^2 + b_2x_2^2 + b_3x_3^2 + c_1x_1x_2 + c_2x_1x_3 + c_3x_2x_3,$$

начальными условиями поиска: $x^{(0)}$ – начальная точка; h – начальный шаг поиска и методами решения:

- поочередного изменения переменных (ПИП);
- сканирования (МС);
- релаксаций (МР);
- градиента (МГ);
- наискорейшего спуска (НС).

3. На Листе 1 оформить исходные данные, указанные в выданном варианте задания.

4. На Листе 2 представить ход и результаты аналитического расчета точки оптимума заданной целевой функции с точностью 0,001.

5. На Листе 3 рассчитать точки оптимума одним из методов детерминированного поиска, указанным в варианте задания, с различным значением точности: 0,5; 0,1; 0,02.

6. На Листе 4 в табличной форме оформить ход расчета точки оптимума одним из методов градиентного поиска, указанным в варианте задания, с различным значением точности: 0,5; 0,1; 0,02.

7. На Листе 5 построить график зависимости значений целевой функции от порядкового номера приближения к оптимуму, полученных при точности 0,5 по методам, указанным в п. 5 и 6. Объяснить характер полученных зависимостей.

8. На Листе 6 в таблице показать ход расчета точки оптимума по методу, указанному в п. 6, с точностью 0,001 при различном начальном значении шага поиска: в 1,5, 2,0, 2,5, 3 и 4 раза больше указанного в варианте задания.

Таблица 11.2

Варианты задания для работы 9

№№ вар.	Тип задачи	a_0	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3	c_1	c_2	c_3	$x^{(0)}$	h	Метод для п. 5	Метод для п. 6
1	Мин.	-2,57	0,48	-1,48	-2,32	1,57	0,20	1,42	-1,96	1,19	1,64	-7,6, 8,7, -6,6	1,0	ПИП	МР
2	Макс.	-0,59	-2,64	2,47	3,22	-1,54	-0,28	-0,70	-1,02	-1,08	-0,57	2,1, 22,0, -7,0	1,2	МС	МГ
3	Макс.	-2,92	-3,10	1,39	-2,93	-0,99	-0,19	-1,02	-1,81	0,78	-1,38	7,9, 4,3, -7,7	0,8	ПИП	НС
4	Мин.	-1,95	-2,29	-2,91	1,05	1,99	0,42	1,35	-0,07	-1,00	1,35	3,7, 27,0, -12,0	0,8	МС	МР
5	Мин.	4,47	-3,11	-2,10	-2,50	1,75	1,00	0,66	-1,86	-0,78	0,97	11,0, 11,0, 8,0	0,9	ПИП	МГ
6	Макс.	4,46	2,82	2,32	-1,07	-0,19	-0,02	-1,43	-1,36	1,81	-1,92	4,9, -6,5, -6,1	0,9	МС	НС
7	Мин.	-1,75	0,86	-0,40	-1,83	0,49	1,06	0,01	-1,10	-0,50	-1,01	-5,2, -7,2, 6,2	0,8	ПИП	МР
8	Мин.	3,94	1,32	-1,46	3,94	1,55	0,22	0,29	1,80	1,64	-1,81	-6,2, -5,7, 7,0	1,2	МС	МГ
9	Мин.	-4,51	1,01	-0,78	-2,50	1,56	1,68	0,94	0,53	-1,08	0,35	7,3, 5,4, -5,6	0,8	ПИП	НС
10	Мин.	-2,03	3,94	1,66	0,61	1,85	0,85	1,19	1,86	0,13	0,50	-10,0, 7,8, -7,9	0,9	МС	МР
11	Макс.	0,77	-1,16	-1,81	0,78	-0,40	-1,49	-0,09	-0,92	0,86	-1,06	-5,6, -4,9, -3,5	0,7	ПИП	МГ
12	Мин.	2,39	-0,27	-3,66	0,68	-0,94	-0,09	-0,65	1,94	1,01	1,33	-5,6, -6,5, -5,5	0,8	МС	НС
13	Мин.	-3,69	-1,45	2,07	-3,22	0,63	1,95	1,48	-1,68	-1,71	1,69	31,0, 8,8, 4,0	0,9	ПИП	МР
14	Мин.	-2,93	-0,22	2,66	3,34	0,60	1,43	1,80	-1,60	1,56	1,73	5,1, -4,0, -8,4	0,8	МС	МГ
15	Макс.	-0,34	2,31	2,46	-1,63	-1,20	-1,52	-0,94	0,57	-1,13	-0,09	-5,4, -5,2, 3,8	0,8	ПИП	НС
16	Мин.	3,62	3,67	2,77	1,25	0,10	1,72	0,46	-0,39	-0,51	-1,47	10,0, 11,0, 4,0	0,6	МС	МР
17	Макс.	4,95	1,83	3,17	1,12	-0,02	-1,72	-1,07	-0,08	-0,61	-0,74	-5,6, -5,9, -0,7	0,9	ПИП	МГ
18	Макс.	1,99	-3,52	1,85	3,00	-0,98	-0,74	-0,34	-0,61	-1,46	-1,41	3,6, -0,8, -9,8	0,7	МС	НС
19	Макс.	2,63	1,70	-3,53	1,36	-1,96	-0,37	-0,92	1,90	-0,18	-0,31	0,7, 3,1, -5,9	0,9	ПИП	МР
20	Мин.	2,17	-0,55	-3,71	-0,13	0,44	0,26	1,69	-0,90	1,37	-0,55	-16,0, -12,0, -3,6	1,0	МС	МГ
21	Макс.	-0,01	-1,20	-0,26	-3,90	-1,03	-1,98	-1,05	-0,56	0,30	-1,67	1,6, -7,4, 3,4	0,8	ПИП	НС
22	Макс.	-0,21	2,75	-2,63	1,43	-1,85	-0,46	-1,40	0,62	0,07	1,86	-4,1, 9,1, -4,6	0,9	МС	МР
23	Макс.	1,05	3,78	-3,08	3,06	-1,44	-0,28	-1,74	-0,70	-1,51	1,21	-7,6, 3,1, -0,8	0,7	ПИП	МГ
24	Мин.	4,60	2,09	0,62	-3,86	0,39	1,56	0,41	1,06	-0,22	0,70	-0,4, -0,7, 3,9	0,9	МС	НС

Использованные сокращения: мин. – минимизация, макс. – максимизация

9. На Листе 7 построить график зависимости количества приближений к оптимуму от величины выбранного начального шага (при точности 0,02), используя полученные в п. 6 и 8 результаты расчетов по методу, указанному в п. 6. Сделать вывод по графику.

10. Студентам, полностью выполнившим задание, защитить работу, представив готовый Excel-файл, объяснив полученные результаты и ответив на дополнительные вопросы ведущего преподавателя.

Примерный перечень теоретических вопросов для допуска и защиты лабораторной работы:

1. Что является целью решения задачи оптимизации?
2. Что представляют собой линии равного уровня? Для чего они используются?
3. Проиллюстрируйте глобальный и локальные оптимумы гипотетической функции в пространстве двух переменных с использованием линий равного уровня.
4. Сформулируйте необходимое условие существования оптимума функции нескольких переменных в заданной точке.
5. Какие вы знаете классы методов оптимизации функции нескольких переменных?
6. Перечислите известные вам методы для оптимизации функции нескольких переменных для следующих групп методов:
 - детерминированного поиска;
 - градиентного поиска.
7. Что отличает группу методов градиентного поиска от методов детерминированного поиска?
8. Проиллюстрируйте с использованием линий равного уровня гипотетической целевой функции двух переменных алгоритмы работы следующих методов:
 - поочередного изменения переменных;
 - сканирования;
 - релаксаций;
 - градиента;
 - наискорейшего спуска.
9. Может ли изменяться порядок использования переменных в следующих методах многомерной оптимизации:

- поочередного изменения переменных;
- релаксаций?

10. Какое количество расчетов значений целевой функции в новых точках предстоит выполнить на любом шаге расчета, кроме первого, методом сканирования, если используется сетка 7×7 точек.

11. Как по значениям частных производных определить саму изменяемую переменную и направление ее изменения при решении задачи оптимизации методом релаксаций для случаев:

- минимизации;
- максимизации?

12. Что общего и в чем разница между алгоритмами методов поочередного изменения переменных и релаксаций?

13. Как рассчитывается направление наиболее быстрого улучшения целевой функции в точке? Запишите формулу.

14. Что общего и в чем разница между алгоритмами методов градиента и наискорейшего спуска?

15. Что общего между алгоритмами методов релаксаций и наискорейшего спуска?

11.3. Пример выполнения и оформления работы в Microsoft Excel

Рассмотрим порядок выполнения и оформления лабораторной работы 9 на следующем примере. Требуется найти точку минимума для критерия вида:

$$R(x_1, x_2, x_3) = 1,325 + 0,032x_1 + 0,098x_2 + 0,024x_3 + 1,189x_1^2 + 1,484x_2^2 + 0,623x_3^2 + 1,772x_1x_2 - 0,741x_1x_3 + 0,271x_2x_3$$

аналитическим способом (для решения системы частных производных используется метод Крамера) и методами поочередного изменения переменных и градиента при следующих начальных условиях: начальная точка $x^{(0)} = (8,2; 5,6; 4,6)$; начальный шаг $h = 0,7$.

На Листе 1 книги MS Excel приводятся исходные данные, оформленные аналогично примеру (рис. 3.4) для лабораторной работы 1.

На Листе 2 оформляются система частных производных для поиска точки минимума аналитическим способом и ход ее решения методом Крамера (рис. 11.4).

Работа 9					
Метод поочередного изменения переменных					
N	h	x_1	x_2	x_3	R
$\epsilon=0,5$					
1	0,7	8,2	5,6	4,6	202,3166
2	0,7	8,9	5,6	4,6	221,1315
3	0,7	7,5	5,6	4,6	184,6668
4	0,7	6,8	5,6	4,6	168,1823
5	0,7	6,1	5,6	4,6	152,8630
6	0,7	5,4	5,6	4,6	138,7090
7	0,7	4,7	5,6	4,6	125,7201
8	0,7	4,0	5,6	4,6	113,8965
9	0,7	3,3	5,6	4,6	103,2381
10	0,7	2,6	5,6	4,6	93,7449
11	0,7	1,9	5,6	4,6	85,4169
12	0,7	1,2	5,6	4,6	78,2542
13	0,7	0,5	5,6	4,6	72,2566
14	0,7	-0,2	5,6	4,6	67,4243
15	0,7	-0,9	5,6	4,6	63,7572
16	0,7	-1,6	5,6	4,6	61,2554
17	0,7	-2,3	5,6	4,6	59,9187
18	0,7	-3,0	5,6	4,6	59,7473
19	0,7	-3,7	5,6	4,6	60,7411
20	0,7	-3,0	6,3	4,6	69,3290
21	0,7	-3,0	4,9	4,6	51,6199

Рис. 11.5. Табличное отображение основных этапов поиска оптимума функции различными методами



Рис. 11.6. Оформление графика зависимости значения целевой функции от порядкового номера приближения к оптимуму

На Листе 6 в табличной форме представляется ход расчета точки оптимума по заданному методу (метод градиента) с точностью 0,02 при различном начальном значении шага поиска: 1,05, 1,4, 1,75, 2,1, 2,8. Лист 6 оформляется аналогично Листу 4 (рис. 11.5).

Далее на Листе 7 строится график зависимости количества приближений к оптимуму от величины выбранного начального шага (рис 11.7).



Рис. 11.7. Оформление графика зависимости количества приближений к оптимуму от величины выбранного начального шага

По графику делается вывод о влиянии величины начального шага на количество итераций.

Заключение

Представленным в настоящем учебном пособии перечнем не исчерпывается все многообразие численных методов решения задач вычислительной математики. Для использования в лабораторном практикуме приведены только те из них, которые достаточно просто могут быть реализованы на основе базовых функций и могут наиболее наглядно, в пошаговом режиме проиллюстрировать ход работы алгоритмов в среде табличного процессора Microsoft Excel.

Целый ряд методов, например, решение краевой задачи для систем дифференциальных уравнений или оптимизация многомерных функций методом деформируемых многогранников Нелдера–Мида, может быть реализован в MS Excel лишь пользователями, уже обладающими достаточно большим опытом решения подобных задач другими, более простыми методами. Однако же, обладая таким опытом, целесообразно учиться применять на практике вышеуказанные методы уже непосредственно с использованием языков и сред программирования, чему посвящены специальные учебные дисциплины на старших курсах.

Студенты, выполнившие в полном объеме лабораторный практикум, могут убедиться, что применение численных методов для решения конкретных задач – это творческий процесс. С одной стороны, не только собственно выбор метода, но и правильная настройка его параметров позволяют значительно повысить эффективность (быстроту и минимальную ошибку) решения задачи. С другой стороны, могут вноситься изменения и непосредственно в классические алгоритмы методов, такие как использование переменного размера шага поиска нового приближения по одной переменной, различного размера шага по каждой переменной, выбор других условий окончания вычислительной процедуры (одного или комбинации нескольких). Кроме того, продвинутые пользователи зачастую используют сразу несколько методов решения с тем, чтобы извлечь пользу от достоинств каждого из них.

Авторы пособия искренне надеются, что знания и навыки, полученные студентами в ходе лабораторного практикума, позволят не только применять их для поиска решений уравнений, систем и т. д., но и раскрыть свой творческий потенциал при решении значительно более сложных учебных, научных и технологических задач.

Библиографический список

1. Официальный сайт Microsoft Office. [Электронный ресурс]: Корпорация Майкрософт, 2013. – Режим доступа: <http://office.microsoft.com/ru-ru/> – свободный.
2. Использование Excel в информационных технологиях: методические разработки/ сост. В. Г. Матвейкин, Б. С. Дмитриевский, С. Е. Хлебников. – Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2009. – 36 с.
3. Дударов С. П. Вычислительные методы обработки экспериментальных данных: учебно-методическое пособие/ С. П. Дударов, А. Н. Шайкин, А. Ф. Егоров. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2005. – 52 с.
4. Дударов С. П. Программирование и численные методы в задачах химической технологии. Лабораторный практикум: учеб. пособие/ С. П. Дударов. – М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2009. – 108 с.

Учебное издание

ДУДАРОВ Сергей Павлович
ПАПАЕВ Павел Леонидович

Использование численных методов в табличном процессоре Microsoft Excel

Лабораторный практикум

Редактор: Е. В. Копасова

Подписано в печать 18.03.2013 г. Формат 60×84 1/16.

Усл. печ. л. 6,7. Уч.-изд. л. 7,3. Тираж 100 экз.

Заказ

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Издательский центр

Адрес университета и издательского центра:

125047 Москва, Миусская пл., 9