

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра материаловедения,
технологии и управления качеством

Синёв И.В., Симаков В.В.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Учебное пособие

для студентов 2 курса
направления подготовки бакалавриата
22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»,
профиля подготовки «Нанотехнологии, диагностика и синтез
современных материалов»,
института физики

Авторы

Синёв Илья Владимирович – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

Симаков Вячеслав Владимирович – д.т.н., доцент, профессор кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Численное интегрирование.	4
1.1 Формула прямоугольников	6
1.2 Формула трапеций	7
1.3 Формула Симпсона	8
1.4 Численное интегрирования функции заданной таблично	9
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	17

ВВЕДЕНИЕ

Численные методы являются основой решения комплексных задач, возникающих в ходе развития материаловедения и новейших областей техники и технологий. Использование ЭВМ при решении научных и технических задач позволяет провести детальное математическое моделирование процессов и систем, которое существенно сокращает потребность в натурных экспериментах, а в ряде случаев может их заменить.

Важным аспектом алгоритмов численных методов является гарантирование нахождения приближенного решения с заданной точностью за конечное число математических операций. При этом для численных методов характерна множественность возможных методов решения.

В пособии излагаются основы численных методов решения задач алгебры, математического анализа, оптимизации, обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассмотрены алгоритмы и возможности их применения для приближенного решения различных классов математических задач. В пособии изложен материал, необходимый студентам для приобретения навыков применения численных методов для решения задач теоретического и прикладного характера в области профессиональной деятельности. Наибольшее внимание уделяется фундаментальным разделам численных методов – численному решению систем линейных алгебраических уравнений, методам оптимизации и разностным методам решения задач математической физики.

Теоретический материал изложен сжато, но при этом большое вниманиеделено рекомендациям по практическому применению рассмотренных алгоритмов. Изложение материала проиллюстрировано рядом примеров направленных на развитие практических навыков применения численных методов для решения конкретных задач. Предполагается, что при изучении данного курса студенты знакомы с основами высшей математики и владеют навыками программирования.

1 Численное интегрирование

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $x \in [a, b]$ и известна ее первообразная $F(x)$, то определенный интеграл от этой функции в пределах от a до b может быть вычислен по формуле Ньютона – Лейбница:

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a),$$

где $F'(x) = f(x)$ – первообразная подынтегральной функции $f(x)$.

Численное значение интеграла – это площадь криволинейной трапеции, ограниченной линиями графика функции и осью абсцисс Ox (выделенная область на рисунке 1).

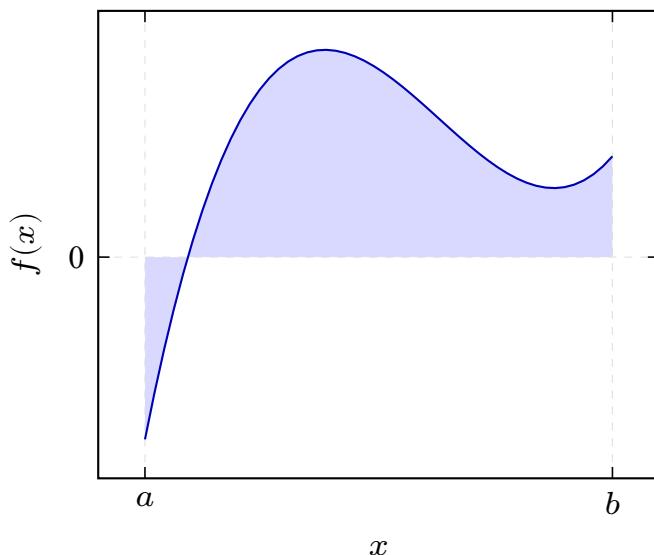


Рисунок 1 – Геометрический смысл определенного интеграла

Однако во многих случаях первообразная функция $F(x)$ не может быть найдена с помощью элементарных средств или является слишком сложной, поэтому вычисление определенного интеграла может быть затруднительным или даже практически невозможным.

Кроме того, на практике подынтегральная функция $f(x)$ часто задается таблично и тогда само понятие первообразной теряет смысл. Аналогичные вопросы возникают при вычислении кратных интегралов. Поэтому важное значение имеют приближенные и в первую очередь численные методы вычисления определенных интегралов.

Задача численного интегрирования функции заключается в вычислении значения определенного интеграла на основании ряда значений подынтегральной функции $f(x)$.

Обычный прием численного вычисления интеграла состоит в том, что данную функцию $f(x)$ на рассматриваемом отрезке $x \in [a, b]$ заменяют интерполяющей или аппроксимирующей функцией $\varphi(x)$ простого вида (например, полиномом), а затем приближенно полагают:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b \varphi(x) dx$$

Далее рассматриваются способы приближенного вычисления определенных интегралов вида:

$$I = \int_a^b \varphi(x) dx,$$

основанные на замене интеграла конечной суммой:

$$I \approx \sum_{i=0}^n c_i \cdot \varphi(x_i),$$

где c_i – числовые коэффициенты квадратурной формулы; x_i – узлы квадратурной формулы, т.е. точки отрезка $[a, b]$, ($i = 0, 1, \dots, n$).

На основании свойств определенных интегралов, I можно представить в виде суммы интегралов по частичным отрезкам:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

Поэтому, для построения формулы численного интегрирования на всем отрезке $[a, b]$ достаточно построить квадратурную формулу на частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ для интеграла:

$$S_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx.$$

1.1 Формула прямоугольников

В методе прямоугольников на частичном отрезке подынтегральная функция заменяется полиномом нулевой степени, то есть константу:

$$f(x) \approx L_0(x) = \text{const}$$

С геометрической точки зрения, в методе прямоугольников площадь криволинейной трапеции (интеграл от функции) на частичном отрезке заменяется площадью прямоугольника, ширина которого будет определяться расстоянием между соответствующими соседними узлами интегрирования, а высота – значением подынтегральной функции в этих узлах.

В зависимости от выбора узла сетки $\{x_i\}$ для аппроксимации подынтегральной функции $f(x)$ на частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ различают левую и правую формулы прямоугольников: если в качестве значения аппроксимирующего полинома выбирается значение подынтегральной функции на левом конце отрезка $L_0 \approx f(x_{i-1}) = y_{i-1}$ (рисунок 2), то справедлива левая формула прямоугольников:

$$S_i^- \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_0(x) dx = y_{i-1} \cdot (x_i - x_{i-1}),$$

а если значение аппроксимирующего полинома соответствует значению подынтегральной функции на правом конце частичного отрезка $L_0 \approx f(x_i) = y_i$ (рисунок 2), то справедлива правая формула прямоугольников :

$$S_i^+ \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_0(x) dx = y_i \cdot (x_i - x_{i-1}),$$

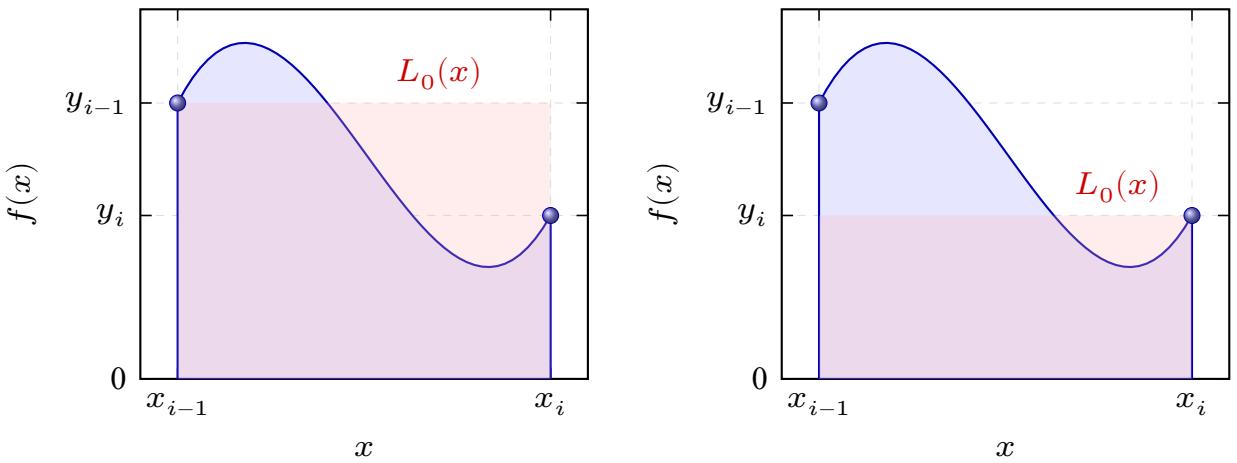


Рисунок 2 – График подынтегральной функции $f(x)$ и аппроксимирующего полинома $L_0(x)$ на частичном отрезке для формулы прямоугольников

1.2 Формула трапеций

Квадратурная *формула трапеций* является следствием замены на частичном отрезке подынтегральной функции интерполяционным полиномом первой степени $f(x) \approx L_1(x)$, построенным по множеству узлов сетки $\{x_{i-1}, x_i\}$:

$$L_1(x) = \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} \cdot y_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \cdot y_i.$$

Интегрирование интерполяционного полинома Лагранжа на частичном отрезке определяет формулу трапеций:

$$S_i \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_1(x) dx = \frac{y_i + y_{i-1}}{2} \cdot (x_i - x_{i-1})$$

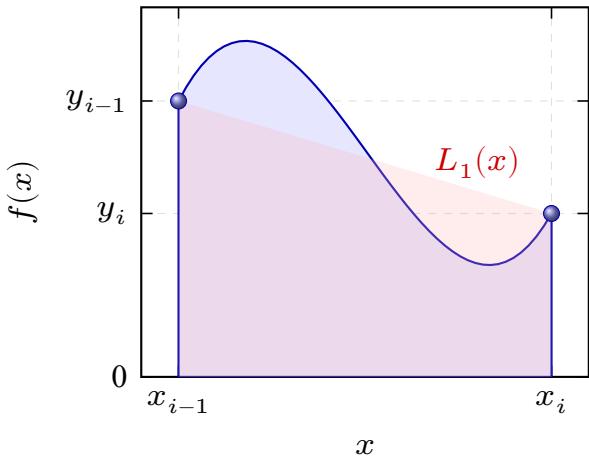


Рисунок 3 – График подынтегральной функции $f(x)$ и аппроксимирующего полинома $L_1(x)$ на частичном отрезке для формулы трапеций

1.3 Формула Симпсона

На частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ квадратурная *формула Симпсона* является следствием аппроксимации подынтегральной функции $f(x)$ интерполяционным полиномом Лагранжа второй степени $f(x) \approx L_2(x)$, который построен по узлам сетки $\{x_{i-1}, x_{i-1/2}, x_i\}$:

$$\begin{aligned}
 L_2(x) = & \frac{(x - x_{i-1/2}) \cdot (x - x_i)}{(x_{i-1/2} - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1})} \cdot y_{i-1} + \\
 & + \frac{(x - x_{i-1}) \cdot (x_i - x)}{(x_{i-1/2} - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1/2})} \cdot y_{i-1/2} +, \\
 & + \frac{(x - x_{i-1}) \cdot (x - x_{i-1/2})}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1/2})} \cdot y_i
 \end{aligned}$$

где $x_{i-1/2}$ – узел вспомогательной сетки, расположенный между узлами основной сетки $x_{i-1} < x_{i-1/2} < x_i$

Выражение для полинома Лагранжа в каноническом виде:

$$L_2(x) = c_0 + c_1 \cdot x + c_2 \cdot x^2,$$

где c_0, c_1, c_2 – коэффициенты при соответствующих степенях x интерполяционного полинома Лагранжа $L_2(x)$ в пределах частичного отрезка $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Интегрирование интерполяционного полинома Лагранжа $L_2(x)$ на частич-

ном отрезке $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$ определяет формулу Симпсона:

$$S_i \approx \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x) dx = c_0 \cdot (x_{i+1} - x_{i-1}) + c_1 \cdot \frac{x_{i+1}^2 - x_{i-1}^2}{2} + c_2 \cdot \frac{x_{i+1}^3 - x_{i-1}^3}{3}.$$

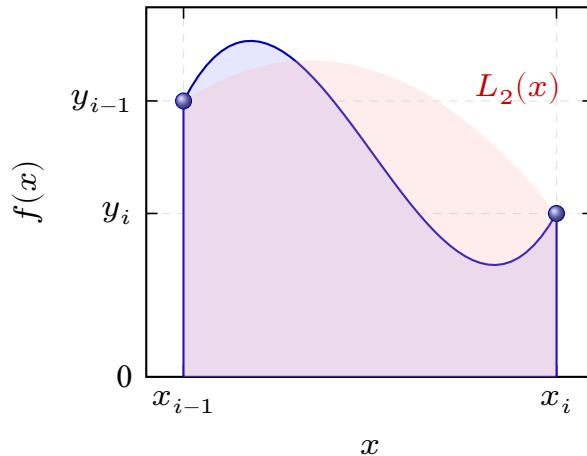


Рисунок 4 – График подынтегральной функции $f(x)$ и аппроксимирующего полинома $L_2(x)$ на частичном отрезке для формулы Симпсона

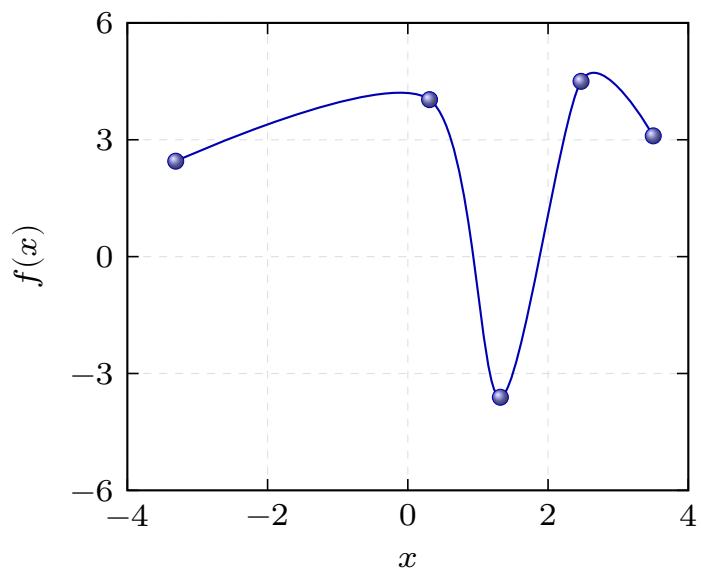
1.4 Численное интегрирования функции заданной таблично

На множестве узлов сетки $\{x_i\}$ определены значения некоторой функции $\{y_i\} = f(x_i)$:

Таблица 1 – Таблично заданная функциональная зависимость

i	0	1	2	3	4
x_i	-3.31	0.31	1.32	2.47	3.50
y_i	2.45	4.03	-3.61	4.50	3.10

- 1) Построим график функции $f(x)$ заданной таблично.



- 2) Воспользуемся левой и правой формулами прямоугольников для нахождения численного значения интеграла от функции $f(x)$, заданной таблично на отрезке $x \in [x_0, x_4]$. Для этого разобьем весь отрезок интегрирования на частичные отрезки:

$$[x_0, x_4] = [x_0, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup [x_2, x_3] \cup [x_3, x_4]$$

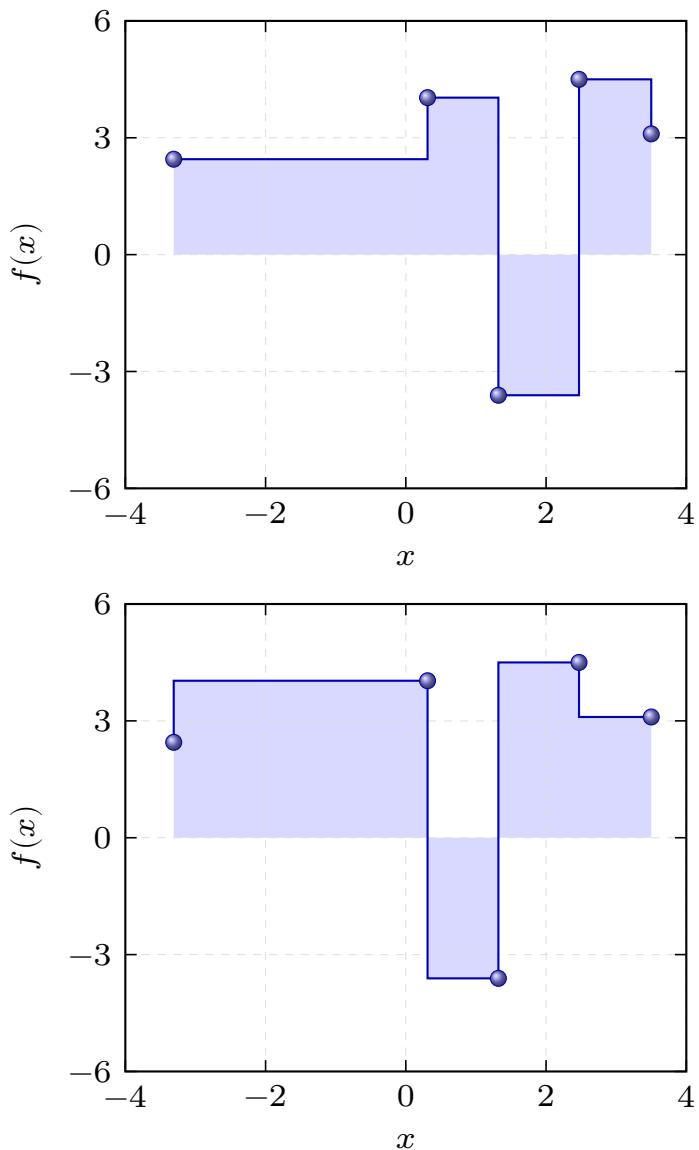


Рисунок 5 – Использование квадратурных формул левых и правых
прямоугольников

На каждом частичном отрезке квадратурная формула является следствием замены подынтегральной функции $f(x)$ интерполяционным полиномом нулевой степени $f(x) \approx L_0(x) = \text{const}$, построенным на узлам $\{x_{i-1}, x_i\}$.

По методу прямоугольников, определим значение интеграла на каждом ча-

стичном отрезке (левые прямоугольники):

$$\begin{aligned}
 S_1^- &= y_0 \cdot (x_1 - x_0) = 2.45 \cdot (0.31 - (-3.31)) \approx 8.87 \\
 S_2^- &= y_1 \cdot (x_2 - x_1) = 4.03 \cdot (1.32 - 0.31) \approx 4.07 \\
 S_3^- &= y_2 \cdot (x_3 - x_2) = -3.61 \cdot (2.47 - 1.32) \approx -4.15 \\
 S_4^- &= y_3 \cdot (x_4 - x_3) = 4.5 \cdot (3.50 - 2.47) \approx 4.64
 \end{aligned}$$

(правые прямоугольники):

$$\begin{aligned}
 S_1^+ &= y_1 \cdot (x_1 - x_0) = 4.03 \cdot (0.31 - (-3.31)) \approx 14.59 \\
 S_2^+ &= y_2 \cdot (x_2 - x_1) = -3.61 \cdot (1.32 - 0.31) \approx -3.65 \\
 S_3^+ &= y_3 \cdot (x_3 - x_2) = 4.50 \cdot (2.47 - 1.32) \approx 5.18 \\
 S_4^+ &= y_4 \cdot (x_4 - x_3) = 3.10 \cdot (3.50 - 2.47) \approx 3.19
 \end{aligned}$$

Значение интегралов I^- и I^+ на всем отрезке интегрирования $[x_0, x_4]$:

$$\begin{aligned}
 I^- &= S_1^- + S_2^- + S_3^- + S_4^- = 8.87 + 4.07 - 4.15 + 4.64 = 13.43 \\
 I^+ &= S_1^+ + S_2^+ + S_3^+ + S_4^+ = 14.59 - 3.65 + 5.18 + 3.19 = 19.31
 \end{aligned}$$

3) Рассмотрим *метод трапеций* для нахождения численного значения интеграла от функции $f(x)$, заданной таблично на отрезке $x \in [x_0, x_4]$. Разобьем весь отрезок интегрирования на частичные отрезки:

$$[x_0, x_4] = [x_0, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup [x_2, x_3] \cup [x_3, x_4]$$

На каждом частичном отрезке квадратурная формула является следствием замены подынтегральной функции $f(x)$ интерполяционным полиномом Лагранжа первой степени $f(x) \approx L_1(x)$, построенным на узлам $\{x_{i-1}, x_i\}$, т.е. прямой соединяющей два соседних узла.

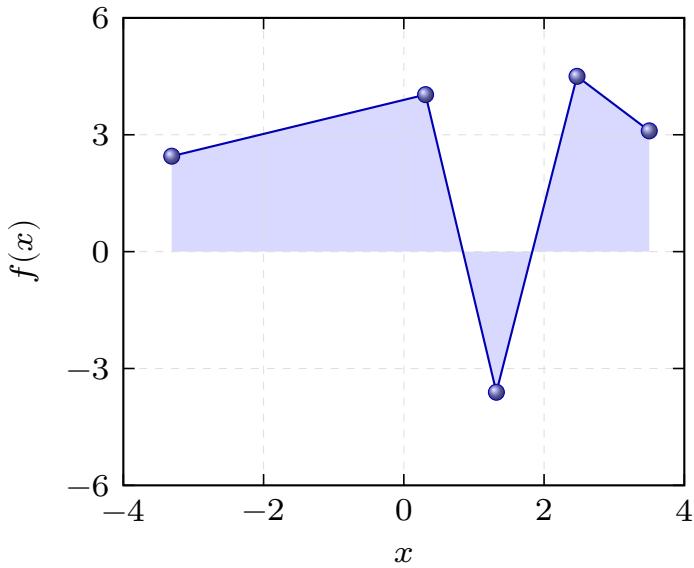


Рисунок 6 – Использование квадратурных формул трапеций

По методу трапеций, определим значение интеграла на каждом частичном отрезке:

$$\begin{aligned}
 S_1 &= \frac{y_1 + y_0}{2} \cdot (x_1 - x_0) = \frac{4.03 + 2.45}{2} \cdot (0.31 - (-3.31)) \approx 11.73 \\
 S_2 &= \frac{y_2 + y_1}{2} \cdot (x_2 - x_1) = \frac{-3.61 + 4.03}{2} \cdot (1.32 - 0.31) \approx 0.21 \\
 S_3 &= \frac{y_3 + y_2}{2} \cdot (x_3 - x_2) = \frac{4.50 - 3.61}{2} \cdot (2.47 - 1.32) \approx 0.51 \\
 S_4 &= \frac{y_4 + y_3}{2} \cdot (x_4 - x_3) = \frac{3.10 + 4.50}{2} \cdot (3.50 - 2.47) \approx 3.91
 \end{aligned}$$

Определим интеграл I на всем отрезке интегрирования $[x_0, x_4]$, воспользовавшись свойством аддитивности интеграла:

$$I = S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 11.73 + 0.21 + 0.51 + 3.91 = 16.37.$$

- 4) Рассмотрим *метод Симпсона* для нахождения численное значение интеграла от функции $f(x)$, заданной таблично на отрезке $x \in [x_0, x_4]$. Разделим всё множество узлов сетки $\{x_i\}$, в которых известны значения функции $\{y_i\}$, на основные и вспомогательные узлы:

Таблица 2 – Таблично заданная функциональная зависимость

i	0	$1 - 1/2$	1	$1 + 1/2$	2
x_i	-3.31	0.31	1.32	2.47	3.50
y_i	2.45	4.03	-3.61	4.50	3.10

Разобьем весь отрезок интегрирования на частичные отрезки:

$$[x_0, x_2] = [x_0, x_1] \cup [x_1, x_2].$$

В пределах первого частичного отрезка $[x_0, x_1]$ построим интерполяционный полином Лагранжа $L_2(x)$ по узлам сетки $x_0 = -3.31$, $x_{1-1/2} = 0.31$, $x_1 = 1.32$:

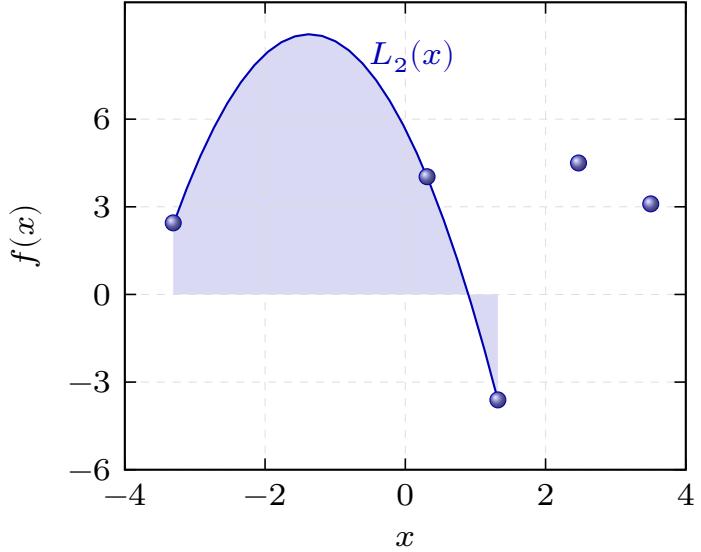
$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - 0.31)(x - 1.32)}{((-3.31) - 0.31)((-3.31) - 1.32)} \cdot 2.45 + \\ &+ \frac{(x - (-3.31))(x - 1.32)}{(0.31 - (-3.31))(0.31 - 1.32)} \cdot 4.03 + \\ &+ \frac{(x - (-3.31))(x - 0.31)}{(1.32 - (-3.31))(1.32 - 0.31)} \cdot (-3.61) \end{aligned}$$

После алгебраических преобразований запишем интерполяционный полином в каноническом виде:

$$L_2(x) = 5.66 - 4.74 \cdot x - 1.73 \cdot x^2$$

Определим интеграл от интерполяционного полинома $L_2(x)$ на первом частичном отрезке:

$$I_1 = \int_{x_0}^{x_1} L_2(x) dx = \int_{-3.31}^{1.32} (5.66 - 4.74 \cdot x - 1.73 \cdot x^2) dx = 25.88$$



В пределах второго частичного отрезка $[x_1, x_2]$ построим интерполяционный полином Лагранжа $L_2(x)$ по узлам сетки $x_1 = 1.32$, $x_{1+1/2} = 2.47$, $x_2 = 3.50$:

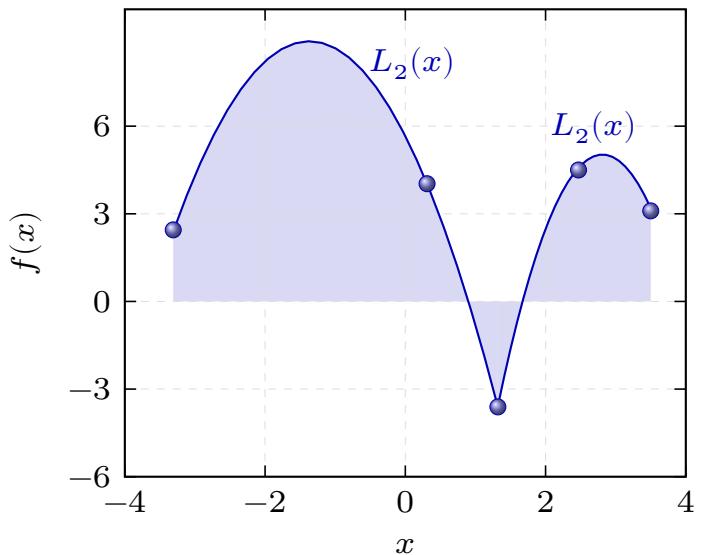
$$\begin{aligned}
 L_2(x) = & \frac{(x - 2.47)(x - 3.50)}{(1.32 - 2.47)(1.32 - 3.50)} \cdot (-3.61) + \\
 & + \frac{(x - 1.32)(x - 3.50)}{(2.47 - 1.32)(2.47 - 3.50)} \cdot 4.50 + \\
 & + \frac{(x - 1.32)(x - 2.47)}{(3.50 - 1.32)(3.50 - 2.47)} \cdot 3.10
 \end{aligned}$$

После тривиальных алгебраических преобразований:

$$L_2(x) = -25.56 + 21.76 \cdot x - 3.87 \cdot x^2$$

Определим интеграл от интерполяционного полинома $L_2(x)$ на втором частичном отрезке:

$$I_2 = \int_{x_1}^{x_2} L_2(x) dx = \int_{1.32}^{3.50} (-25.56 + 21.76 \cdot x - 3.87 \cdot x^2) dx = 6.13$$



Определим интеграл всем отрезке $[x_0, x_2]$ воспользовавшись свойством аддитивности интеграла:

$$I = I_1 + I_2 = 25.88 + 6.13 = 32.01$$

- 5) Сравнивая численные значения определенного интеграла рассчитанные по методам прямоугольников, трапеций и Симпсона, можно сделать вывод о том, что рассчитанные значения различаются.

Таблица 3 – Численные значения интегралов

Метод интегрирования	Значение интеграла
Левых прямоугольников	13.43
Правых прямоугольников	19.31
Трапеций	16.37
Симпсона	32.01

Значение определенного интеграла от функции заданной таблично, рассчитанное по методу Симпсона является наибольшим, а значение рассчитанное по методу левых прямоугольников – наименьшее.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Самарский А. А. Введение в численные методы. – Лань, 2009. – 288 с.
- 2 Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: учебное пособие для вузов // М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. 1989. – 432 с.
- 3 Самарский А. А. и др. Задачи и упражнения по численным методам: Учебное пособие // М.: Эдиториал УРСС, 2000. – 208 с.
- 4 Калиткин Н. Н. Численные методы. 2 изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.
- 5 Калиткин Н. Н. Численные методы: Учебное пособие. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. – 511 с.
- 6 Демидович, Б.П. Численные методы анализа: приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова ; под ред. Б.П. Демидович. – Изд. 3-е, перераб. – Москва : Главная редакция физико-математической литературы, 1967. – 368 с.
- 7 Список математических символов \LaTeX –URL: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject
- 8 Бояршинов, М. Г. Вычислительные методы алгебры и анализа: учебное пособие / М. Г. Бояршинов. – Саратов : Вузовское образование, 2020. – 225 с. – ISBN 978-5-4487-0687-5. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/93065.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим до-ступа: для авторизир. пользователей. - DOI: <https://doi.org/10.23682/93065>
- 9 Олейникова, С. А. Численные методы решения оптимизационных задач: учебное пособие / С. А. Олейникова. – Воронеж : Воронежский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2021. – 114 с. – ISBN 978-5-7731-0960-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118626.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 10 Гарифуллин, М. Ф. Численные методы интегрирования дифференциальных уравнений / М. Ф. Гарифуллин. – Москва : Техносфера,

2020. – 192 с. – ISBN 978-5-94836-597-8. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/99103.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 11 Ахмадиев, Ф. Г. Математическое моделирование и методы оптимизации: учебное пособие / Ф. Г. Ахмадиев, Р. М. Гильфанов. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 178 с. – ISBN 978-5-4497-1383-4. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/116448.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 12 Рутта, Н. А. Методы и модели принятия оптимальных решений в экономике: учебное пособие для бакалавров / Н. А. Рутта. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 87 с. – ISBN 978-5-4497-1534-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118015.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей