

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 Интерполирование функций	4
1.1 Линейная интерполяция функции	4
1.2 Интерполяция алгебраическими полиномами	6
1.3 Интерполяционный полином в форме Лагранжа	7
1.4 Интерполяция функции заданной таблично обобщенным полиномом ..	9
1.5 Интерполяция функции заданной таблично алгебраическими полино- мами в форме Лагранжа	11
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	15

ВВЕДЕНИЕ

Численные методы являются основой решения комплексных задач, возникающих в ходе развития материаловедения и новейших областей техники и технологии. 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 внимание уделено 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 Интерполирование функций

Задача интерполирования состоит в том, чтобы по известным значениям функции $f(x)$ в отдельных точках отрезка восстановить её значения в остальных точках этого отрезка. Такая постановка задачи допускает множество решений.

Например, задача интерполирования возникает, в том случае, когда известны результаты измерения $y_i = f(x_i)$ некоторой физической величины f в ограниченном количестве точек x_i ($i = 0, 1, \dots, n$), а требуется оценить значения этой величины в других точках.

Интерполирование используется также, когда вычисление значений $f(x)$ трудоемко, например, значение искомой функции может быть определено как решение сложной задачи, в которой x играет роль параметра. При этом можно вычислить небольшую таблицу значений функции, но прямое нахождение функции при большом числе значений аргумента практически затруднительно или нецелесообразно.

1.1 Линейная интерполяция функции

При *линейной интерполяции* функция $f(x)$ на отрезке $x \in [a, b]$ заменяется обобщенным интерполяционным полиномом $p_n(x)$, который построен в виде линейной комбинации $(n + 1)$ аналитических функций $\{\phi_i(x)\}$

$$p_n(x) = c_0 \cdot \phi_0(x) + c_1 \cdot \phi_1(x) + \dots + c_n \cdot \phi_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i \cdot \phi_i(x), \quad (1)$$

таким образом, чтобы значения полинома $p_n(x)$ в определённых точках отрезка $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ (узлах сетки) совпадают со значениями функции в этих точках $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ (условия сопряжения):

$$\begin{cases} p_n(x_0) = y_0 \\ p_n(x_1) = y_1 \\ \dots\dots\dots \\ p_n(x_n) = y_n \end{cases}, \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \sum_{i=0}^n c_i \cdot \phi_i(x_0) = y_0 \\ \sum_{i=0}^n c_i \cdot \phi_i(x_1) = y_1 \\ \dots\dots\dots \\ \sum_{i=0}^n c_i \cdot \phi_i(x_n) = y_n \end{cases}. \quad (2)$$

Из условий (2), накладываемых на интерполяционный полином, форму-

лируется система линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов полинома c_0, c_1, \dots, c_n :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{y}, \quad (3)$$

где \mathbf{A} – квадратная матрица $(n + 1) \times (n + 1)$, \mathbf{c} и \mathbf{y} – вектор неизвестных коэффициентов полинома $p_n(x)$ и вектор значений функции $f(x)$ в заданных точках $\{x_i\}$, размерности $(n + 1) \times 1$:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \cdots & \phi_n(x_0) \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(x_n) & \phi_1(x_n) & \cdots & \phi_n(x_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Если среди узлов интерполяции $\{x_i\}$ нет совпадающих ($x_i \neq x_j$ для всех $i, j = 0, 1, \dots, n$) и определитель системы отличен от нуля $\det \mathbf{A} \neq 0$, то задача интерполяции имеет единственное решение, а система функций $\{\phi_i(x)\}$ называется чебышевской. Поэтому при линейной интерполяции необходимо строить обобщенный полином $p_n(x)$ на основе *чебышевской системы функций*.

Таким образом, для определения коэффициентов интерполяционного полинома (1) необходимо найти решение системы линейных уравнений (3), любыми аналитическими, приближенными или численными методами, например, методом Гаусса.

Интерполирование не всегда дает удовлетворительное решение задачи о приближении функции с *заданной точностью* на данном промежутке, так как совпадение функции $f(x)$ с полиномом $p_n(x)$ в точках x_i и x_{i+1} не гарантирует малость величины $\|f(x) - p_n(x)\|$ на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$.

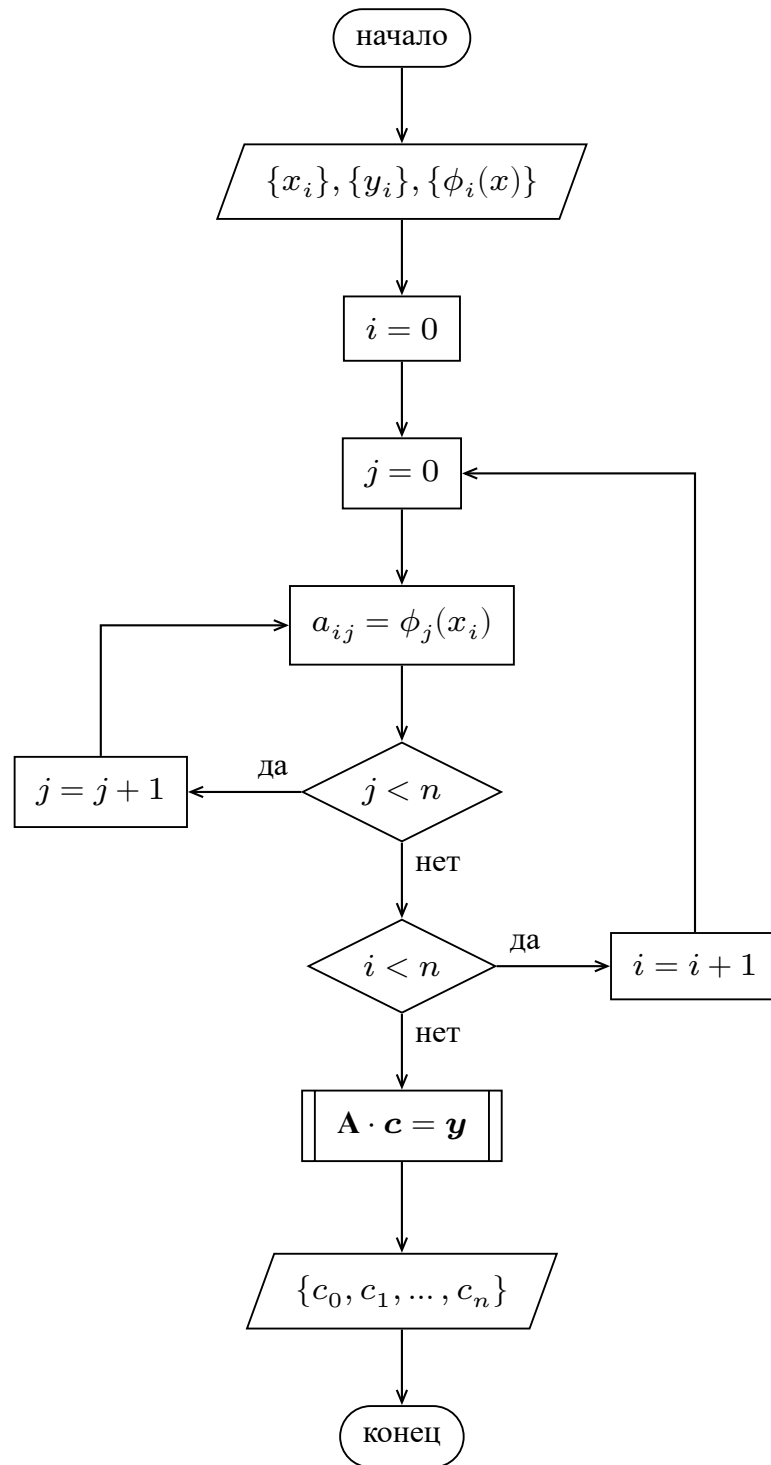


Рисунок 1 – Блок-схема алгоритма нахождения коэффициентов $\{c_i\}$

$$\text{обобщенного полинома } p_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i \cdot \phi_i(x)$$

1.2 Интерполяция алгебраическими полиномами

Задача интерполяции алгебраическими полиномами сводится к построению полинома степени n по чебышевской системе алгебраических функций

$$\{1, x, x^2, \dots, x^n\}:$$

$$p_n(x) = c_0 + c_1 \cdot x + c_2 \cdot x^2 + \dots + c_n \cdot x^n = \sum_{i=0}^n c_i \cdot x^i. \quad (4)$$

Определитель системы (3) представляет собой определителем Вандермонда, который отличен от нуля $\det \mathbf{A} \neq 0$, если среди точек $\{x_i\}$ нет совпадающих, т.е. $x_i \neq x_j$ для всех $i, j = 0, 1, \dots, n$:

$$\det \mathbf{A} = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix}.$$

Выражение для коэффициентов алгебраического полинома и вид самого полинома (4) можно записать различными способами. Наиболее распространенная запись интерполяционного многочлена в форме Лагранжа и в форме Ньютона.

1.3 Интерполяционный полином в форме Лагранжа

Интерполяционная формула Лагранжа позволяет представить многочлен $L_n(x)$ в виде линейной комбинации значений функции $y(x)$ в узлах интерполирования $\{x_i\}$:

$$L_n(x) = \lambda_0(x) \cdot y_0 + \lambda_1(x) \cdot y_1 + \cdots + \lambda_n(x) \cdot y_n = \sum_{i=0}^n \lambda_i(x) \cdot y_i \quad (5)$$

где $\lambda_0(x), \lambda_1(x), \dots, \lambda_n(x)$ – произвольные неизвестные функции.

Для определения неизвестных функций $\lambda_i(x)$ из условий интерполирования следует:

[illegible]

Итак, интерполяционный многочлен Лагранжа (5) имеет вид:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{\prod_{j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j \neq i}^n (x_i - x_j)} \cdot y_i \quad (6)$$

1.4 Интерполяция функции заданной таблично обобщенным полиномом

Известно множество данных (узлов интерполяции) $\{x_i\}$, в которых определены значения функции $y_i = f(x_i)$:

Таблица 1 – Таблично заданная функциональная зависимость

i	0	1	2	3
x_i	-0.76	-0.09	0.22	0.55
y_i	0.08	1.84	0.40	0.96

Построим обобщенный интерполяционный полином $p_3(x)$ для таблично заданной функции исходя из чебышевской системы функций $\{1, x, e^{-x}, e^x\}$:

$$p_4(x) = c_0 + c_1 \cdot x + c_2 \cdot e^{-x} + c_3 \cdot e^x$$

- 1) Составим расширенную матрица системы уравнений (3) для определения коэффициентов полинома $(c_0, c_1, c_2, c_3)^T$:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_0) & \phi_2(x_0) & \phi_3(x_0) & y_0 \\ \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \phi_3(x_1) & y_1 \\ \phi_0(x_2) & \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \phi_3(x_2) & y_2 \\ \phi_0(x_3) & \phi_1(x_3) & \phi_2(x_3) & \phi_3(x_3) & y_3 \end{array} \right), \quad \text{здесь} \quad \begin{cases} \phi_0(x) = 1 \\ \phi_1(x) = x \\ \phi_2(x) = e^{-x} \\ \phi_3(x) = e^x \end{cases}.$$

- 2) Воспользуемся данными таблицы 1 и заполним числовыми значения эле-

менты расширенной матрицы:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -0.76 & e^{0.76} & e^{-0.76} & 0.08 \\ 1 & -0.09 & e^{0.09} & e^{-0.09} & 1.84 \\ 1 & 0.22 & e^{-0.22} & e^{0.22} & 0.40 \\ 1 & 0.55 & e^{-0.55} & e^{0.55} & 0.96 \end{array} \right) \Leftrightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -0.76 & 2.138 & 0.468 & 0.08 \\ 1 & -0.09 & 1.094 & 0.914 & 1.84 \\ 1 & 0.22 & 0.803 & 1.246 & 0.40 \\ 1 & 0.55 & 0.577 & 1.733 & 0.96 \end{array} \right)$$

- 3) Решение системы линейных уравнений найдем методом Гаусса с выбором главного элемента в расширенной матрице (выделен цветом):

$$\mathbf{c} = (-0.393, -81.472, -37.288, 39.053)^T$$

Следовательно, обобщенный интерполяционный полином для функции заданной таблично можно записать в виде:

$$p_3(x) = -0.393 - 81.472 \cdot x - 37.288 \cdot e^{-x} + 39.053 \cdot e^x$$

- 4) В таблице 2 представлены данные расчета коэффициентов обобщенного интерполяционного полинома c_i , значений этого полинома в узлах сетки $p_3(x_i)$ и абсолютная погрешность интерполяции $\epsilon_i = \epsilon(x_i)$:

$$\epsilon_i = y_i - p_3(x_i).$$

Таблица 2 – Коэффициенты обобщенного интерполяционного полинома c_i , значения этого полинома в узлах сетки $p_3(x_i)$ и абсолютная погрешность интерполяции ϵ_i

i	0	1	2	3
x_i	-0.76	-0.09	0.22	0.55
y_i	0.08	1.84	0.4	0.96
c_i	-0.393	-81.472	-37.288	39.053
$p_3(x_i)$	0.057	1.832	0.422	0.973
ϵ_i	0.023	0.008	-0.022	-0.013

- 5) На рисунке 2 представлена диаграмма рассеяния (разброса) данных функции

заданной таблично $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и результаты вычислений обобщенного интерполяционного полинома $p_3(x)$ (сплошная линия).

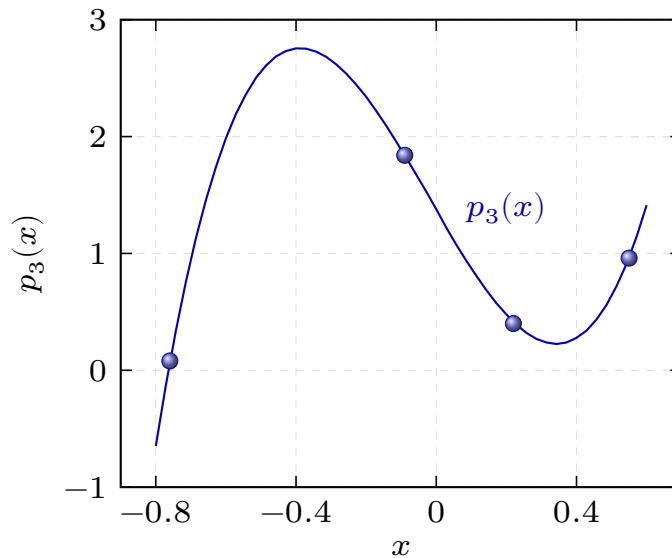


Рисунок 2 – График таблично заданной функции $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и обобщенного интерполяционного полинома $p_3(x)$ (сплошная линия)

Таблица 3 – Рассчётные значения обобщенного интерполяционного полинома в узлах сетки $p_3(x_i)$

i	0	1	2	47	48	49
x_i	-0.800	-0.771	-0.743	0.543	0.571	0.600
y_i	-0.654	-0.128	0.330	0.920	1.145	1.419

1.5 Интерполяция функции заданной таблично алгебраическими полиномами в форме Лагранжа

Построим интерполяционный полином в форме Лагранжа $L_3(x)$ на основе данных об узлах интерполяции $\{x_i\}$ и значений функции в этих узлах $\{y_i\}$:

$$L_3(x) = \sum_{i=0}^3 \frac{\prod_{j \neq i}^3 (x - x_j)}{\prod_{j \neq i}^3 (x_i - x_j)} \cdot y_i$$

1) Представим полином Лагранжа в развернутом виде:

$$L_3(x) = \frac{(x - x_1) \cdot (x - x_2) \cdot (x - x_3)}{(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2) \cdot (x_0 - x_3)} \cdot y_0 +$$

$$\frac{(x - x_0) \cdot (x - x_2) \cdot (x - x_3)}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2) \cdot (x_1 - x_3)} \cdot y_1 +$$

$$\frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_3)}{(x_2 - x_0) \cdot (x_2 - x_1) \cdot (x_2 - x_3)} \cdot y_2 +$$

$$\frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2)}{(x_3 - x_0) \cdot (x_3 - x_1) \cdot (x_3 - x_2)} \cdot y_3$$

2) Воспользуемся численными данными об узлах интерполяции $\{x_i\}$ и известными значениями интерпретируемой функции в этих узлах $\{y_i\}$ (таблица 1):

$$L_3(x) = \frac{(x - (-0.09)) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{(-0.76 - (-0.09)) \cdot (-0.76 - 0.22) \cdot (-0.76 - 0.55)} \cdot 0.08 +$$

$$\frac{(x - (-0.76)) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{(-0.09 - (-0.76)) \cdot (-0.09 - 0.22) \cdot (-0.09 - 0.55)} \cdot 1.84 +$$

$$\frac{(x - (-0.76)) \cdot (x - (-0.09)) \cdot (x - 0.55)}{(0.22 - (-0.76)) \cdot (0.22 - (-0.09)) \cdot (0.22 - 0.55)} \cdot 0.40 +$$

$$\frac{(x - (-0.76)) \cdot (x - (-0.09)) \cdot (x - 0.22)}{(0.55 - (-0.76)) \cdot (0.55 - (-0.09)) \cdot (0.55 - 0.22)} \cdot 0.96$$

3) Проведем необходимые арифметические действия:

$$L_3(x) = \frac{(x + 0.09) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{(-0.67) \cdot (-0.98) \cdot (-1.31)} \cdot 0.08 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{(0.67) \cdot (-0.31) \cdot (-0.64)} \cdot 1.84 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.55)}{(0.98) \cdot (0.31) \cdot (-0.33)} \cdot 0.40 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.22)}{(1.31) \cdot (0.64) \cdot (0.33)} \cdot 0.96$$

или

$$L_3(x) = \frac{(x + 0.09) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{-0.86} \cdot 0.08 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55)}{0.13} \cdot 1.84 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.55)}{-0.10} \cdot 0.40 +$$

$$\frac{(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.22)}{0.28} \cdot 0.96$$

Продолжая делать упрощения окончательно получим:

$$L_3(x) = (x + 0.09) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55) \cdot (-0.09) +$$

$$(x + 0.76) \cdot (x - 0.22) \cdot (x - 0.55) \cdot 13.84 +$$

$$(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.55) \cdot (-3.99) +$$

$$(x + 0.76) \cdot (x + 0.09) \cdot (x - 0.22) \cdot 3.47$$

- 4) Запишем выражение для интерполяционный полином Лагранжа в каноническом виде:

$$L_3(x) = 1.37 - 5.248 \cdot x + 0.912 \cdot x^2 + 13.23 \cdot x^3$$

- 5) В таблице 4 представлены данные расчета коэффициентов интерполяционного полинома Лагранжа c_i , значений этого полинома в узлах сетки $L_3(x_i)$ и абсолютная погрешность интерполяции $\epsilon_i = \epsilon(x_i)$:

$$\epsilon_i = y_i - L_3(x_i).$$

Таблица 4 – Коэффициенты интерполяционного полинома Лагранжа c_i , значения этого полинома в узлах сетки $L_3(x_i)$ и абсолютная погрешность интерполяции ϵ_i

i	x_i	y_i	c_i	$L_3(x_i)$	ϵ_i
0	-0.76	0.08	1.37	0.078	0.002
1	-0.09	1.84	-5.248	1.840	0.000
2	0.22	0.40	0.912	0.400	0.000
3	0.55	0.96	13.23	0.961	-0.001

6) На рисунке (3) представлена диаграмму рассеяния (разброса) данных функции заданной таблично $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и результаты вычислений интерполяционного полинома Лагранжа $L_3(x)$ (сплошная линия).

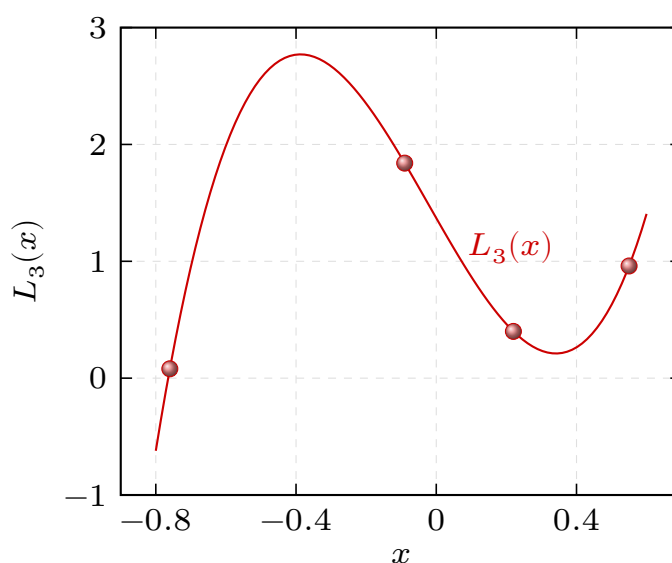


Рисунок 3 – График таблично заданной функции $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и интерполяционного полинома Лагранжа $L_3(x)$ (сплошная линия)

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: \[https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject\]\(https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject\)](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 доступа: 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