

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 дифференцирование	4
1.1 Численного дифференцирование функции заданной таблично	6
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	16

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 дифференцирование

Задача численного дифференцирования состоит в приближенном вычислении производных $y'(x)$ по заданным в конечном числе точек $\{x_i\}$ значениям этой функции $\{y_i\}$.

Численное дифференцирование применяется, если функцию $y(x)$ трудно или невозможно продифференцировать аналитически, например, если функция является таблично заданной, а также при решении дифференциальных уравнений разностными методами.

Многие формулы численного дифференцирования можно получить, используя интерполяционные формулы. Для этого достаточно заменить функцию $y(x)$ интерполяционным полиномом, например, алгебраическим полиномом в форме Лагранжа $L_n(x)$, и вычислить производные этого многочлена, используя его явное представление.

Рассмотрим произвольную сетку $\{x_i\}$ и проведем интерполирование функции $y(x)$ в узлах сетки $x_{i-1} < x_i < x_{i+1}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, приближенно полагая $y(x) \approx L_2(x)$ для $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$:

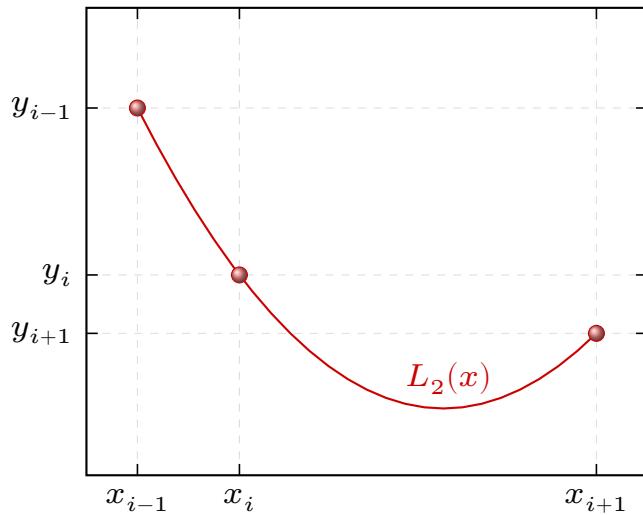


Рисунок 1 – График интерполяционного полинома Лагранжа $L_2(x)$
в пределах отрезка $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$

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

где $y_{i-1} = y(x_{i-1})$, $y_i = y(x_i)$, $y_{i+1} = y(x_{i+1})$ – значение функции $y(x)$ в узлах сетки.

Первая производная многочлена Лагранжа $L_2(x)$:

$$\begin{aligned}
L'_2(x) = & \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i) \cdot (x_{i-1} - x_{i+1})} \cdot y_{i-1} + \\
& + \frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1})} \cdot y_i + \\
& + \frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot (x_{i+1} - x_i)} \cdot y_{i+1}
\end{aligned}$$

Это выражение можно принять за приближенное значение первой производной $y'(x)$ в любой точке отрезка $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Например, в точке $x = x_i$ первая производная от функции $y(x)$ приближенно равна:

$$\begin{aligned}
y'(x_i) \approx L'_2(x_i) = & \frac{x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i) \cdot (x_{i-1} - x_{i+1})} \cdot y_{i-1} + \\
& + \frac{(x_i - x_{i-1}) + (x_i - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1})} \cdot y_i + \\
& + \frac{x_i - x_{i-1}}{(x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot (x_{i+1} - x_i)} \cdot y_{i+1}
\end{aligned}$$

Вторую производную полинома Лагранжа можно принять за приближенное значение второй производной от функции $y(x)$ в любой точке отрезка

$[x_{i-1}, x_{i+1}]$:

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

На равномерной сетке $\{x_i\}$, расстояние между соседними узлами которой одинаково, выражения для первой и второй производной в точке $x = x_i$ упрощаются:

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \quad y''(x_i) \approx \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2},$$

где $h = (x_i - x_{i-1}) = (x_{i+1} - x_i)$ – шаг сетки.

Для приближенного вычисления производных более высоких порядков $y^{(n)}(x)$ уже недостаточно полинома Лагранжа второго порядка $L_2(x)$. Поэтому необходимо использовать полиномы более высокого порядка, что приводит к увеличению числа узлов аппроксимации.

Следует отметить, что порядок погрешности аппроксимации производных от функции $y(x)$ зависит как от порядка интерполяционного полинома, так и от расположения узлов сетки $\{x_i\}$.

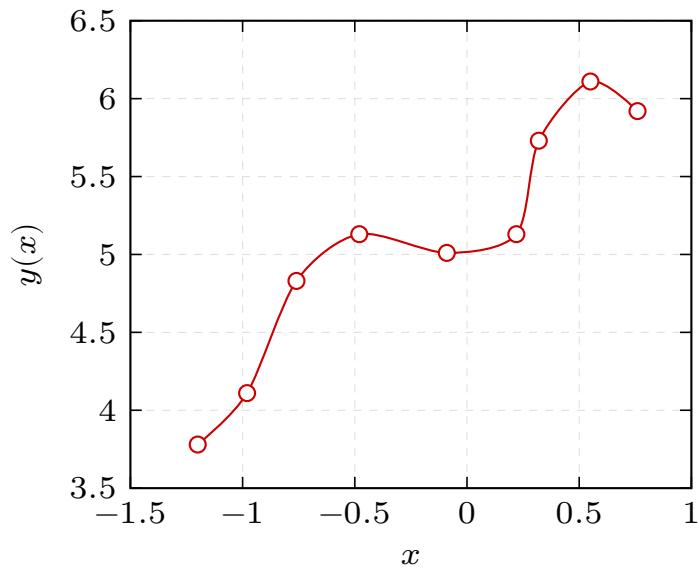
1.1 Численное дифференцирование функции заданной таблично

Известно множество данных (узлов сетки) $\{x_i\}$ в которых определены значения функции $\{f(x_i)\}$:

Таблица 1 – Таблично заданная функциональная зависимость $y_i = f(x_i)$

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i	-1.2	-0.98	-0.76	-0.48	-0.09	0.22	0.32	0.55	0.76
y_i	3.78	4.11	4.83	5.13	5.01	5.13	5.73	6.11	5.92

1) Построим график функции $y(x)$, используя данные таблицы 1.

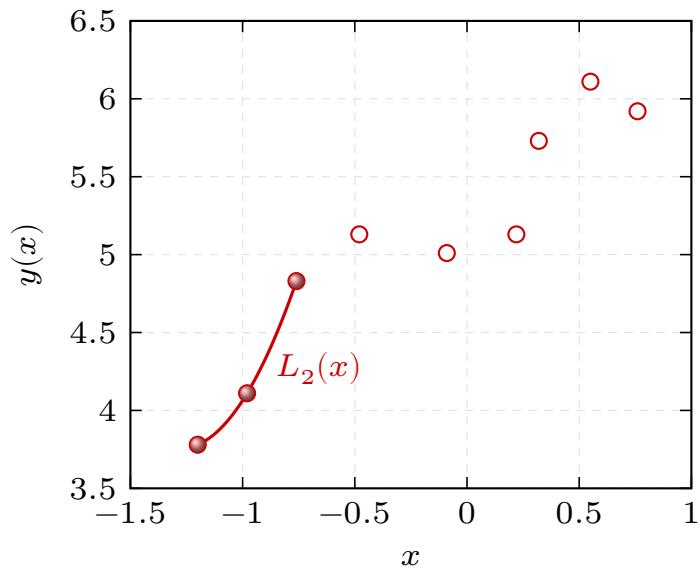


2) Аппроксимируем функцию $y(x)$ в узлах $\{x_0, x_1, x_2\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - (-0.98))(x - (-0.76))}{(-1.20 - (-0.98))(-1.20 - (-0.76))} \cdot 3.78 + \\ &+ \frac{(x - (-1.20))(x - (-0.76))}{(-0.98 - (-1.20))(-0.98 - (-0.76))} \cdot 4.11 + \\ &+ \frac{(x - (-1.20))(x - (-0.98))}{(-0.76 - (-1.20))(-0.76 - (-0.98))} \cdot 4.83 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_0, x_2]$ имеет вид:

$$L_2(x) = 4.028925620 \cdot x^2 + 10.28305785 \cdot x + 10.31801653$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_1 = -0.98$:

$$y'_1 = y'(x_1) = y'(-0.98) \approx L'_2(-0.98) = 2.386363635$$

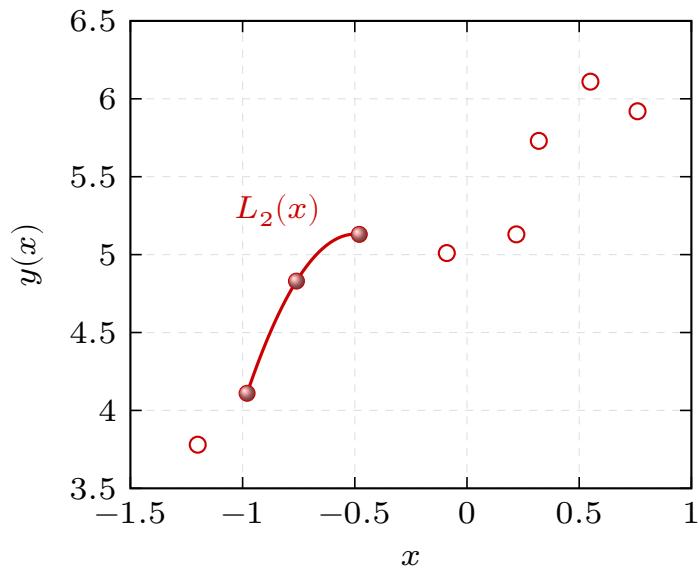
$$y''_1 = y''(x_1) = y''(-0.98) \approx L''_2(-0.98) = 8.057851240$$

- 3) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_1, x_2, x_3\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - (-0.76))(x - (-0.48))}{(-0.98 - (-0.76))(-0.98 - (-0.48))} \cdot 4.11 + \\ &+ \frac{(x - (-0.98))(x - (-0.48))}{(-0.76 - (-0.98))(-0.76 - (-0.48))} \cdot 4.83 + \\ &+ \frac{(x - (-0.98))(x - (-0.76))}{(-0.48 - (-0.98))(-0.48 - (-0.76))} \cdot 5.13 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_1, x_3]$ имеет вид:

$$L_2(x) = -4.402597390 \cdot x^2 - 4.387792189 \cdot x + 4.038218187$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_2 = -0.76$:

$$y'_2 = y'(x_2) = y'(-0.76) \approx L'_2(-0.76) = 2.304155844$$

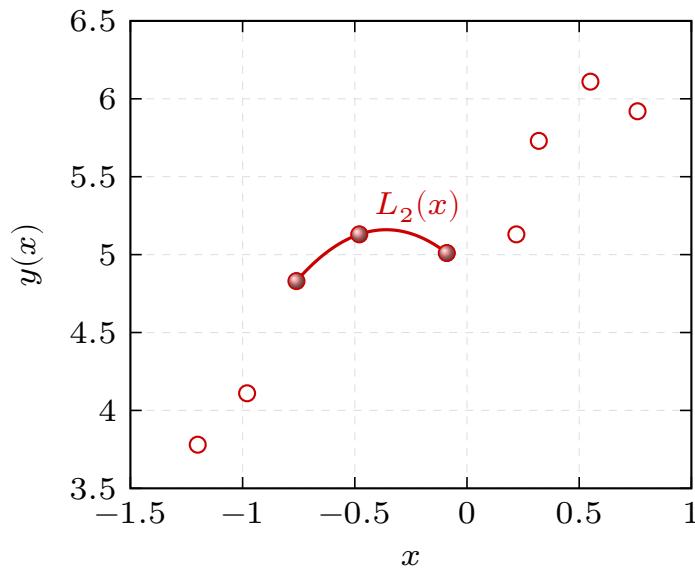
$$y''_2 = y''(x_2) = y''(-0.76) \approx L''_2(-0.76) = -8.805194780$$

- 4) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_2, x_3, x_4\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - (-0.48))(x - (-0.09))}{(-0.76 - (-0.48))(-0.76 - (-0.09))} \cdot 4.83 + \\ &+ \frac{(x - (-0.76))(x - (-0.09))}{(-0.48 - (-0.76))(-0.48 - (-0.09))} \cdot 5.13 + \\ &+ \frac{(x - (-0.76))(x - (-0.48))}{(-0.09 - (-0.76))(-0.09 - (-0.48))} \cdot 5.01 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_2, x_4]$ имеет вид:

$$L_2(x) = -2.058389370 \cdot x^2 - 1.480974249 \cdot x + 4.893385272$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_3 = -0.48$:

$$y'_3 = y'(x_3) = y'(-0.48) \approx L'_2(-0.48) = 0.495079546$$

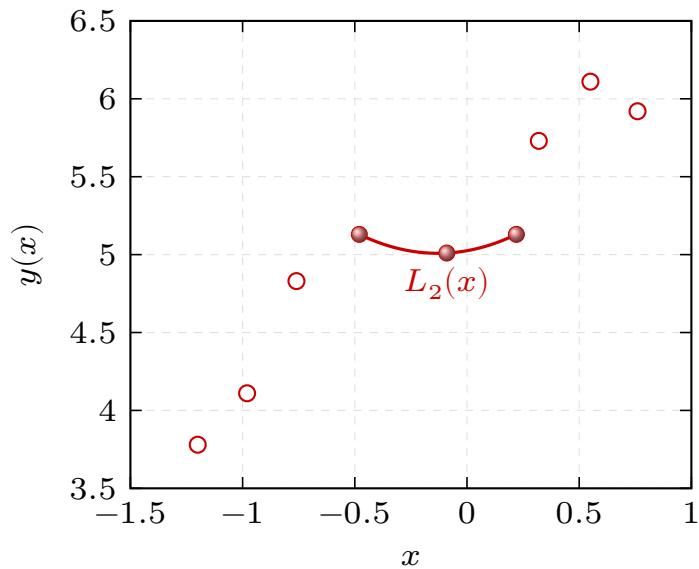
$$y''_3 = y''(x_3) = y''(-0.48) \approx L''_2(-0.48) = -4.116778740$$

- 5) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_3, x_4, x_5\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - (-0.09))(x - 0.22)}{(-0.48 - (-0.09))(-0.48 - 0.22)} \cdot 5.13 + \\ &+ \frac{(x - (-0.48))(x - 0.22)}{(-0.09 - (-0.48))(-0.09 - 0.22)} \cdot 5.01 + \\ &+ \frac{(x - (-0.48))(x - (-0.09))}{(0.22 - (-0.48))(0.22 - (-0.09))} \cdot 5.13 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_3, x_5]$ имеет вид:

$$L_2(x) = 0.9925558300 \cdot x^2 + 0.2580645177 \cdot x + 5.025186105$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_4 = -0.09$:

$$y'_4 = y'(-0.09) \approx L'_2(-0.09) = 0.0794044683$$

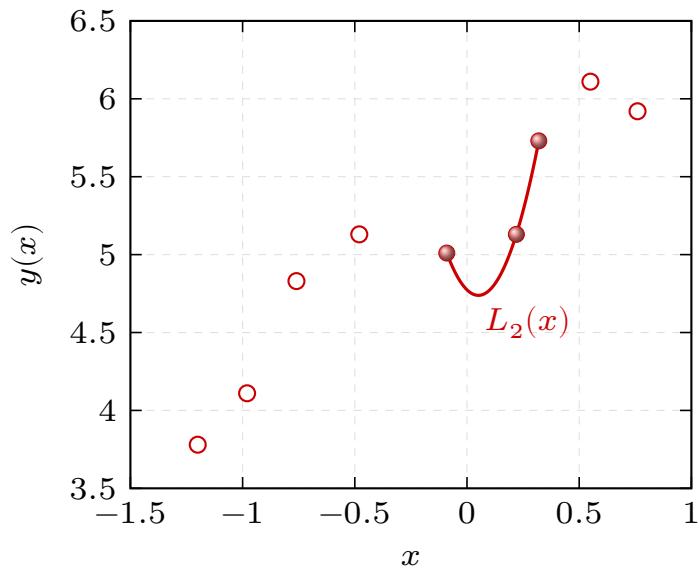
$$y''_4 = y''(-0.09) \approx L''_2(-0.09) = 1.985111660$$

- 6) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_4, x_5, x_6\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - 0.22)(x - 0.32)}{(-0.09 - 0.22)(-0.09 - 0.32)} \cdot 5.01 + \\ &+ \frac{(x - (-0.09))(x - 0.32)}{(0.22 - (-0.09))(0.22 - 0.32)} \cdot 5.13 + \\ &+ \frac{(x - (-0.09))(x - 0.22)}{(0.32 - (-0.09))(0.32 - 0.22)} \cdot 5.73 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_4, x_6]$ имеет вид:

$$L_2(x) = 13.69000778 \cdot x^2 - 1.392604236 \cdot x + 4.773776556$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_5 = 0.22$:

$$y'_5 = y'(x_5) = y'(0.22) \approx L'_2(0.22) = 4.630999187$$

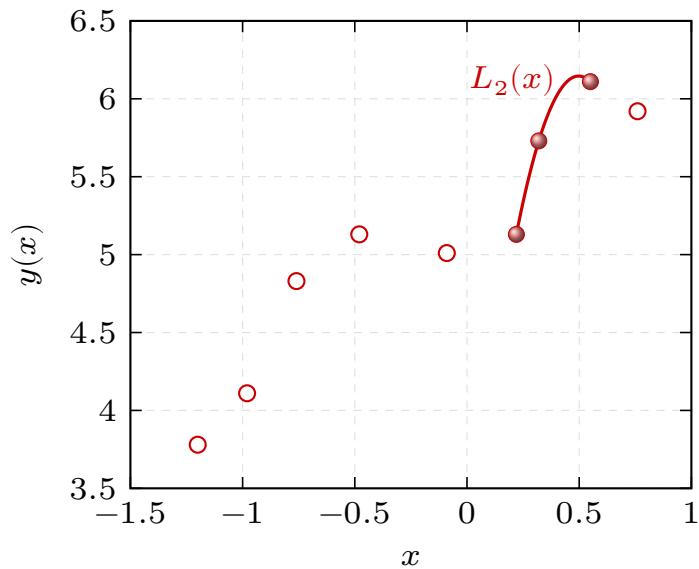
$$y''_5 = y''(x_5) = y''(0.22) \approx L''_2(0.22) = 27.38001556$$

- 7) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_5, x_6, x_7\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - 0.32)(x - 0.55)}{(0.22 - 0.32)(0.22 - 0.55)} \cdot 5.13 + \\ &+ \frac{(x - 0.22)(x - 0.55)}{(0.32 - 0.22)(0.32 - 0.55)} \cdot 5.73 + \\ &+ \frac{(x - 0.22)(x - 0.32)}{(0.55 - 0.22)(0.55 - 0.32)} \cdot 6.11 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_5, x_7]$ имеет вид:

$$L_2(x) = -13.17523062 \cdot x^2 + 13.11462456 \cdot x + 2.882463758$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_6 = 0.32$:

$$y'_6 = y'(x_6) = y'(0.32) \approx L'_2(0.32) = 4.682476963$$

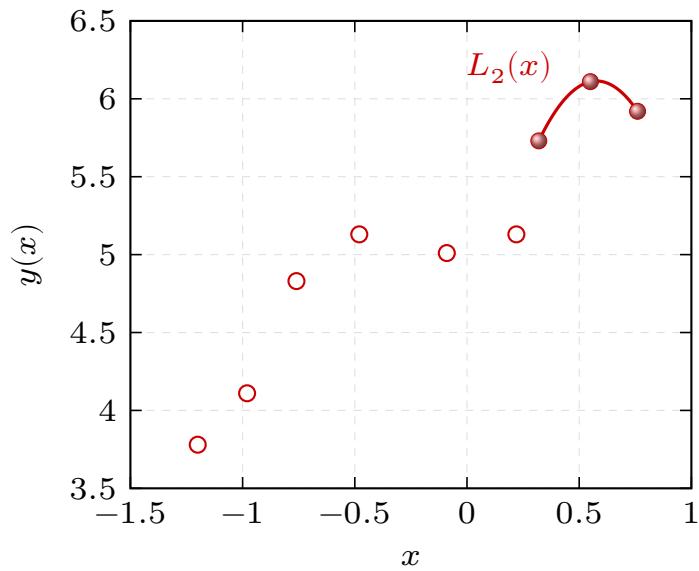
$$y''_6 = y''(x_6) = y''(0.32) \approx L''_2(0.32) = -26.35046124$$

- 8) Аппроксимация функции $y(x)$ в узлах $\{x_6, x_7, x_8\}$ полиномом Лагранжа второго порядка $L_2(x)$, используя данные таблицы 1:

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - 0.55)(x - 0.76)}{(0.32 - 0.55)(0.32 - 0.76)} \cdot 5.73 + \\ &+ \frac{(x - 0.32)(x - 0.76)}{(0.55 - 0.32)(0.55 - 0.76)} \cdot 6.11 + \\ &+ \frac{(x - 0.32)(x - 0.55)}{(0.76 - 0.32)(0.76 - 0.55)} \cdot 5.92 \end{aligned}$$

Проводя элементарные алгебраические преобразования полином Лагранжа в пределах отрезка $[x_6, x_8]$ имеет вид:

$$L_2(x) = -5.811217790 \cdot x^2 + 6.707933391 \cdot x + 4.178530017$$



Определим первую и вторую производную функции $y(x)$ в точке $x_7 = 0.55$:

$$y'_7 = y'(x_7) = y'(0.55) \approx L'_2(0.55) = 0.315593822$$

$$y''_7 = y''(x_7) = y''(0.55) \approx L''_2(0.55) = -11.62243558$$

- 9) Таким образом, определены значения первой $y'(x)$ и второй $y''(x)$ производной функции $y(x)$ в каждом внутреннем узле сетки:

Таблица 2 – Значения первой и второй производных функции $y(x)$ во внутренних узлах сетки $\{x_i\}$

i	1	2	3	4	5	6	7
x_i	-0.98	-0.76	-0.48	-0.09	0.22	0.32	0.55
y'_i	2.39	2.30	0.50	0.08	4.63	4.68	0.32
y''_i	8.06	-8.81	-4.12	1.99	27.38	-26.35	-11.62

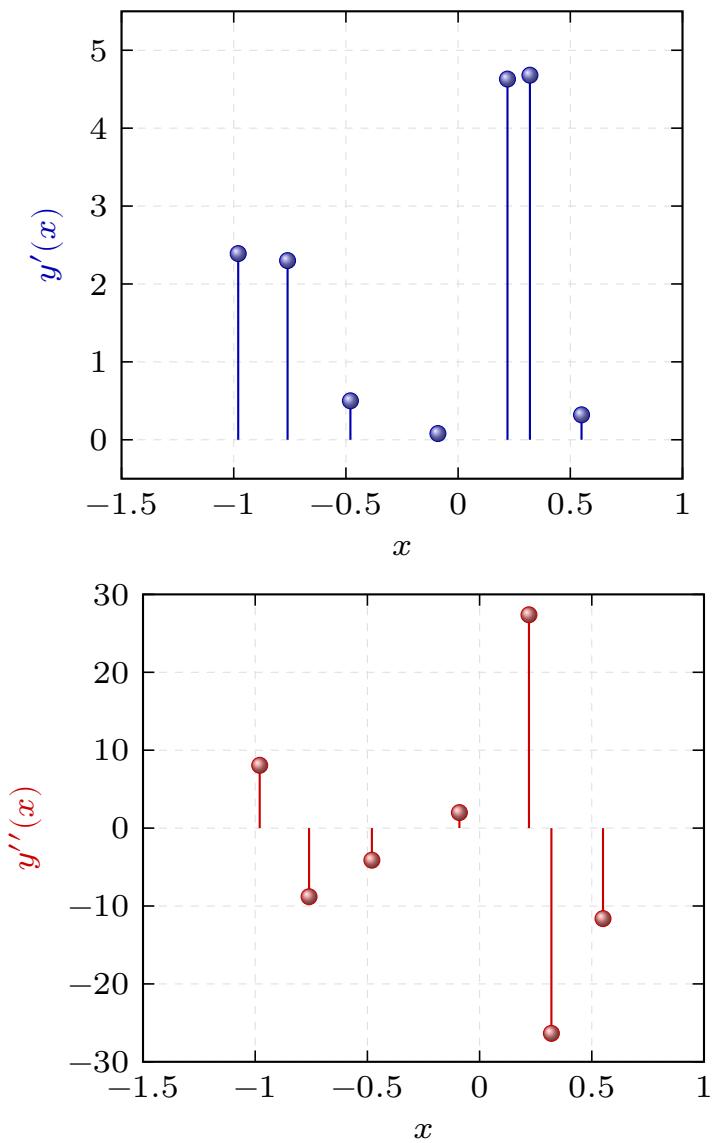


Рисунок 2 – Графики первой $y'(x)$ и второй $y''(x)$ производной от функции $y(x)$, заданной таблично

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