МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання самостійних робіт
з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці»
та «Обчислювальна математика» для студентів денної і заочної форм навчання спеціальностей
«Мікро- та наносистемна техніка» та «Електроніка»

Навчальне видання

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання самостійних робіт з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика» для студентів денної і заочної форм навчання спеціальностей «Мікро- та наносистемна техніка» та «Електроніка»

Укладачі: Людмила Вікторівна Крилик
Олена Олександрівна Селецька

Рукопис оформлено Л. Крилик

Редактор Т. Старічек

Оригінал-макет виготовлено О. Ткачуком

Підписано до друку 23.01.2018.
Формат 29,7×42¼. Папір офсетний.
Гарнітура Times New Roman.
Друк різографічний. Ум. друк. арк. 1,9.
Наклад 40 (1-й запуск 1-20) пр. Зам. № 2018-028.

Видавець та виготовлювач
інформаційний редакційно-видавничий центр.
ВНТУ, ГНК, к. 114.
Хмельницьке шосе, 95,
м. Вінниця, 21021.
Тел. (0432) 65-18-06.
press.vntu.edu.ua;
E-mail: kivc.vntu@gmail.com.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
серія ДК № 3516 від 01.07.2009 р.

Міністерство освіти і науки України
Вінницький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання самостійних робіт з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика» для студентів денної і заочної форм навчання спеціальностей «Мікро- та наносистемна техніка» та «Електроніка»

Вінниця
ВНТУ
2018

Рекомендовано до друку Методичною радою Вінницького національного технічного університету Міністерства освіти і науки України (протокол № 4 від 14.12.2017 р.)

Рецензенти:
Т. Б. Мартинюк, доктор технічних наук, професор
Н. І. Заболотна, кандидат технічних наук, доцент

Методичні вказівки до виконання самостійних робіт з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика» для студентів денної і заочної форм навчання спеціальностей «Мікро- та наносистемна техніка» та «Електроніка» / Уклад. : Л. В. Крилик, О. О. Селецька. – Вінниця : ВНТУ, 2018. – 33 с.

У методичних вказівках наведено основні теоретичні дані до виконання самостійних робіт з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика» і рекомендована література. Методичні вказівки розроблено відповідно до навчальних програм дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика».

ЗМІСТ

Тема 1. Нелінійні задачі……. 4
Тема 2. Задачі лінійної алгебри……..… 6
Тема 3. Методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь……..… 9
Тема 4. Методи розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних……..12
Тема 5. Інтерполяційні формули Гаусса, Стірлінга, Бесселя…….. 15
Тема 6. Сплайн-інтерполювання……16
Тема 7. Апроксимація функцій……... 20
Тема 8. Чисельне диференціювання функції, основане на інтерполяційних формулах Гаусса, Стірлінга, Бесселя…… 25
Тема 9. Квадратурні формули Чебишева та Гаусса……. 26
Тема 10. Формули Ньютона–Котеса вищих порядків…….. 30

ТЕМА 1. НЕЛІНІЙНІ ЗАДАЧІ

Мета: уточнення коренів нелінійних рівнянь.

До методів розв'язання нелінійних рівнянь та систем рівнянь зводиться багато практичних задач, наприклад, розрахунки нелінійних електричних кіл та систем керування, розв'язання нелінійних диференціальних рівнянь, аналіз стійкості систем шляхом оцінення їх власних значень та ін.

Якщо для найпростіших видів алгебраїчних рівнянь (не вище третього ступеня) існують точні аналітичні формули, то для трансцендентних рівнянь і будь-яких систем рівнянь таких методів взагалі не існує і потрібно користуватися тільки наближеними ітераційними методами та алгоритмами.

Розв'язання нелінійних рівнянь

Рівняння, до яких входять тільки степені аргументу з відповідними коефіцієнтами, називаються алгебраїчними.

Нелінійні рівняння, що містять тригонометричні або інші спеціальні функції, називаються трансцендентними.

Загальний вигляд алгебраїчного рівняння:

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0 = 0. \qquad (1.1)$$

Можна виділити важливі властивості алгебраїчних рівнянь, що спрощують визначення коренів. Розглянемо деякі теореми, як це прийнято в математиці, але наводимо їх без доведень, щоб не ускладнювати сприйняття матеріалу.

1. ***Основна теорема алгебри***. Алгебраїчне рівняння порядку n має n коренів, які можуть бути як дійсними, так і комплексними.

Кожен корінь розраховується відповідну кількість разів, що дорівнює його кратності. Кратність кореня x_0 дорівнює k, якщо

$$f'(x_0) = f''(x_0) = ... = f^{(k-1)}(x_0) = 0.$$

2. Якщо всі коефіцієнти a_i рівняння (1.1) дійсні, то всі комплексні корені утворюють комплексно-спряжені пари.

3.***Теорема Декарта***. Число додатних дійсних коренів дорівнює або менше за число змін знаків в послідовності коефіцієнтів (те ж твердження справедливе відносно числа від'ємних дійсних коренів при заміні в (1.1) x на $-x$).

4. ***Теорема Лагранжа***. Верхня межа додатних дійсних коренів визначається як

$$R = 1 + \sqrt[k]{\frac{B}{a_0}},\ a_0 > 0,$$

де k – номер першого від'ємного коефіцієнта;

B – найбільша абсолютна величина від'ємного коефіцієнта.

5. ***Теорема Гюа***. Якщо рівняння (1.1) має дійсні корені і дійсні коефіцієнти, то

$$a_k^2 > a_{k-1}a_{k+1}.$$

Нагадаємо, що прямі аналітичні методи існують лише для алгебраїчних рівнянь не вище третього порядку, а для трансцендентних рівнянь прямих методів взагалі не існує. При визначенні дійсних коренів чисельними методами потрібно враховувати дві теореми. Перша дозволяє відокремити корені, тобто встановити якомога тісніші інтервали $[\lambda, \beta]$, в яких знаходиться один і тільки один корінь рівняння, а друга – оцінити ступінь наближення.

ТЕОРЕМА 1. Якщо безперервна функція $f(x)$ набуває значення різних знаків на кінцях відрізка $[\lambda, \beta]$, тобто $f(\lambda)f(\beta) < 0$, то всередині цього відрізка міститься щонайменше один корінь рівняння $f(x) = 0$, тобто знайдеться хоча б одне число $\xi \in (\lambda, \beta)$ таке, що $f(\xi) = 0$.

ТЕОРЕМА 2. Нехай ξ – точний, а $\bar{x}$ – наближений корені рівняння $f(x) = 0$, які знаходяться на одному й тому ж відрізку $[\alpha, \beta]$, причому $|f'(x)| \geq m,\ \alpha \leq x \leq \beta$.

Тоді

$$|\bar{x} - \xi| \leq \frac{|f(\bar{x})|}{m}.$$

Існує ряд методів наближеного розв'язання нелінійних рівнянь, доцільність застосування кожного із яких визначається видом рівняння, його порядком, потрібною точністю та ін.

Потрібно також пам'ятати, що при визначенні великої кількості коренів знижувати степінь початкового нелінійного рівняння шляхом ділення на $(x - x_i)$ (де x_i – знайдений корінь) потрібно дуже обережно, оскільки це пов'язано з накопиченням похибки поширення, яка буде міститися в коефіцієнтах нового рівняння.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути питання:

- метод простої ітерації;
- метод Ньютона для системи з *n* рівнянь з *n* невідомими.

Рекомендована література

1. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.

2. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування : підручник / Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. – К. : ІВЦ Видавництво «Політехніка», 2004. – 220 с.

3. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.

4. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебное пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.

ТЕМА 2. ЗАДАЧІ ЛІНІЙНОЇ АЛГЕБРИ

Мета: обчислення визначників, елементів оберненої матриці та систем лінійних алгебраїчних рівнянь методами лінійної алгебри.

Методи розв'язання систем лінійних рівнянь можна поділити на прямі та ітераційні. До прямих, які дозволяють одержати точний розв'язок, відносять методи: визначників Крамера, Гаусса, прогонки. Ітераційні методи, що ґрунтуються на одержанні і уточненні послідовних наближень до точного розв'язку, ефективні в тому випадку, коли є багато нульових коефіцієнтів або високий порядок системи (метод Гаусса ефективний до порядку 10^4, ітераційні – до 10^6).

У загальному випадку задача формулюється таким чином: знайти значення $x_1, x_2, ..., x_n$, що задовольняють систему з n лінійних рівнянь

$$\begin{aligned} &a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = c_1, \\ &a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = c_2, \\ &..... \\ &a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n = c_n \end{aligned}$$

або в матричній формі $AX = C$,

де $$\mathrm{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}.$$

Необхідною і достатньою умовою існування розв'язку є нерівність нулю визначника A (лінійна незалежність рівнянь):

$$det\, A \neq 0.$$

Прямі методи. Широко відомий метод Крамера (визначників) детально розглянутий в стандартних курсах вищої математики не може бути застосований в більшості практичних задач через велику складність розрахунку визначників навіть при невеликому зростанні порядку системи. Тому в цьому розділі зосередимося на розгляді методу Гаусса, який, якщо й поступається ітераційним методам в певних практичних галузях, все ж таки є найбільш універсальним, а також методу прогонки, що використовується в задачах з діагональними матрицями.

Метод виключення Гаусса – Жордана дозволяє звести матрицю коефіцієнтів до діагонального вигляду. Єдиною його формальною відмінністю від попереднього методу є те, що замість $i > k$ підставляється $i \neq k$ (k-й ряд називається провідним). В методі Гаусса перетворення стосувалися тільки рівнянь, що стоять нижче провідного ряду. В методі Гаусса-Жордана перетворюються рівняння, які стоять і під провідним рядом, і над ним.

Цей метод полегшує одержання розв'язку, але супроводжується збільшенням обсягу обчислень.

Ітераційні методи особливо ефективні при великому порядку системи. Вони застосовуються в системах, попередньо зведених до вигляду:

$$\begin{aligned} x_1 &= b_{1,n}x_n + b_{1,n-1}x_{n-1} + \ldots + b_{1,1}x_1 + b_{1,0}, \\ x_2 &= b_{2,n}x_n + b_{2,n-1}x_{n-1} + \ldots + b_{2,1}x_1 + b_{2,0}, \\ x_n &= b_{n,n}x_n + b_{n,n-1}x_{n-1} + \ldots + b_{n,1}x_1 + b_{n,0}; \end{aligned}$$

або в матричній формі: $\mathrm{X} = \mathrm{B}\mathrm{X} + \mathrm{B}_0$,

де $$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \ldots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \ldots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \ldots & b_{nn} \end{bmatrix}, \; B_0 = \begin{bmatrix} b_{10} \\ b_{20} \\ \vdots \\ b_{n0} \end{bmatrix}.$$

Існує декілька основних різновидів ітераційних методів. Це методи Якобі (простої ітерації), Гаусса – Зейделя і послідовної верхньої релаксації, в основі яких лежить систематичне уточнення значень змінних, заданих на початку розрахунку.

В методі Якобі початкові значення змінних використовуються для обчислення нових значень $x_1, x_2, ..., x_n$ за допомогою наведених нижче рівнянь. Процес припиняється, коли всі нові значення виявляються достатньо близькими до початкових. В іншому випадку нові значення використовуються замість початкових. Ця процедура повторюється доти, доки не буде досягнуто збіжності або стане ясно, що процес розбіжний. В цьому методі заміна значень всіх змінних виконується одночасно (одночасне зміщення).

Система ітераційних рівнянь має вигляд:

$$
\begin{aligned}
x_1^{(m+1)} &= b_{11}x_1^{(m)} + b_{12}x_2^{(m)} + b_{13}x_3^{(m)} + \cdots + b_{1n}x_n^{(m)} + b_{10},\\
x_2^{(m+1)} &= b_{21}x_1^{(m)} + b_{22}x_2^{(m)} + b_{23}x_3^{(m)} + \cdots + b_{2n}x_n^{(m)} + b_{20},\\
&\vdots\\
x_n^{(m+1)} &= b_{n1}x_1^{(m)} + b_{n2}x_2^{(m)} + b_{n3}x_3^{(m)} + \cdots + b_{nn}x_n^{(m)} + b_{n0},
\end{aligned}
$$

де $x_i^{(m+1)}, x_i^{(m)}$ – значення x_i $(i = 1,..., n)$ на наступній $(m+1)$ і попередній (m) ітераціях, відповідно.

В методі Гаусса – Зейделя уточнене значення x_1 відразу ж використовується для обчислення x_2. Потім за новими значеннями x_1 і x_2 визначаються x_3 і т. д.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- обчислення визначників та елементів оберненої матриці методом Гаусса;
- методи квадратних коренів та Халецького.

Рекомендована література:

1. Вержбицкий В. М. Основы численных методов : учебник для вузов / Вержбицкий В. М. – М. : Высшая школа, 2002. – 840 с.
2. Турчак Л. И. Основы численных методов : учебное пособие / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. – М. : Физматлит, 2005. – 304 с.
3. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.
4. Шахов Ю.Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.

ТЕМА 3. МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗВИЧАЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

Мета: обчислення звичайних диференціальних рівнянь з використанням багатокрокових методів.

Звичайне диференціальне рівняння має нескінченну множину розв'язків. Для відшукання якого-небудь конкретного розв'язку потрібні додаткові умови. Ці умови можуть бути різними і приводити до різних задач. У випадку, коли додаткові умови задаються при одному значенні незалежної змінної, має місце задача Коші (задача з початковими умовами). Якщо умови задаються для двох або більше значень незалежної змінної, то задача стає крайовою. У задачі Коші додаткові умови називаються початковими, а у крайовій задачі – граничними. При розв'язанні цих задач використовуються різні методи і алгоритми.

Задачу Коші можна сформулювати таким чином.

Нехай дано диференціальне рівняння першого порядку

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \tag{3.1}$$

Потрібно знайти функцію на відрізку від $x = a$ до $x = b$, що задовольняє як рівняння (3.1), так і початкову умову $y(a) = y_0$ (при цьому завжди припускається, що існує єдиний розв'язок на всьому відрізку).

Задача, що полягає в розв'язанні звичайного диференціального рівняння при додаткових умовах, які поставлені при декількох значеннях незалежної змінної, називається крайовою.

Крайову задачу розглянемо на прикладі звичайного диференціального рівняння другого порядку:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right)$$

при граничних умовах $y(a) = A$, $y(b) = B$.

Постановки і методи розв'язання рівнянь більш високих порядків аналогічні.

Основою чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь слугує розкладання функції y в ряд Тейлора в околі початкової точки

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_0) + \ldots,$$

де h – відстань (крок) між початковою точкою x_0 і точкою $x_1=x_0 + h$, в якій відшуковується розв'язок.

В різних методах враховується різна кількість членів розкладання (в багатокрокових методах в поєднанні з інтерполяційними формулами), що визначає точність обчислень. При використанні цих методів на ЕОМ потрібно розрізняти похибки округлення через обмеженість кількості значущих цифр в ЕОМ; похибка зрізання (обмеження) – методична похибка, що пов'язана з апроксимацією розв'язків скінченними рядами замість нескінченних, наприклад, рядами Тейлора.

Внаслідок цих причин виникають два види похибок:

- локальна – сума похибок, що вносяться в обчислювальний процес на конкретному кроці;
- глобальна (сумарна) – різниця між точним і обчисленим значеннями, яка містить так звану похибку поширення внаслідок накопичення помилок на попередніх етапах обчислення.

Порядок методу дорівнює *p,* якщо існує таке позитивне число c, що

$$\Delta \le ch^{p+1},$$

де Δ – локальна помилка;

h – крок дискретизації.

Число *c* не залежить від номера кроку і його величини, а визначається похідними і довжиною інтервалу. При апроксимації розв'язання рядами Тейлора воно пов'язане зі степенем членів ряду, які відкидаються.

Методи розв'язання задачі Коші поділяють на однокрокові та багатокрокові.

В однокрокових методах для знаходження наступної точки на кривій $y = f(x)$ потрібна інформація лише про один попередній крок (методи Ейлера і Рунге – Кутта).

В багатокрокових методах (прогнозу і корекції) для знаходження наступної точки на кривій $y = f(x)$ потрібна інформація більш ніж про одну з попередніх точок. Щоб отримати достатньо точне чисельне значення часто використовується ітераційна процедура (наприклад, в методах Мілна – Адамса, Башфорта, Хеммінга).

Порівнюючи ефективність однокрокових і багатокрокових методів, виділяють такі особливості:

1. Багатокрокові методи потребують більшого обсягу пам'яті ЕОМ, тому що оперують більшою кількістю початкових даних.

2. При використанні багатокрокових методів існує можливість оцінення похибки на кроці, тому значення кроку обирається оптимальним, а в однокрокових – з деяким запасом, що знижує швидкодію.

3. При однаковій точності багатокрокові методи потребують меншого обсягу обчислень. Наприклад, в методі Рунге – Кутта четвертого порядку точності доводиться обчислювати чотири значення функції на кожному

кроці, а для забезпечення збіжності методу прогнозу і корекції того ж порядку точності – достатньо двох.

4. Однокрокові методи, на відміну від багатокрокових, дозволяють одразу почати розв'язування задачі («самостартування») і легко змінювати крок в процесі обчислень.

Перед початком розв'язування задачі необхідно провести перевірку на «жорсткість» і у випадку позитивного результату використати спеціальні методи. Якщо задача Коші дуже складна, то зазвичай перевага надається методу прогнозу і корекції, який має, до того ж, більш високу швидкодію. Початок розв'язування задачі при цьому проводиться за допомогою однокрокових методів. Якщо для обчислення чергового значення y_i потрібно більше двох ітерацій або якщо помилка зрізання дуже велика, то необхідно зменшити крок h. З іншого боку, при дуже малій похибці зрізання можна збільшити крок, тим самим підвищити швидкодію, але при цьому весь процес розв'язування потрібно починати спочатку. Інколи на практиці вимагається мінімізувати час підготовки задачі до розв'язання. Тоді доцільно використовувати методи Рунге – Кутта.

Насамкінець потрібно відзначити, що велике значення для ефективного розв'язання задачі мають досвід, інтуїція і кваліфікація користувача як при постановці задачі, так і в процесі вибору методу розробки алгоритму і програми для ЕОМ. При цьому часто зручно користуватись вже готовими програмними засобами, які є в наявності (наприклад, в пакетах MAPLE, MATHEMATIKA).

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- методи Хеммінга та Башфорта;
- «жорсткі» задачі;
- метод Адамса;
- метод Мілна.

Рекомендована література:

1. Фельдман Л. П. Чисельні методи в інформатиці : підручник / Фельдман Л. П., Петренко А. І., Дмитрієва О. А. – К. : Видавнича група BHV. – 2006. – 473 с.

2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.

3. Бахвалов Н. С. Численные методы / Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. – М. : БИНОМ «Лаборатория знаний», 2003. – 632 с.

5. Вержбицкий В. М. Основы численных методов : учебник для вузов / Вержбицкий В. М. – М. : Высшая школа, 2002. – 840 с.

6. Шахов Ю.Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.

7. Турчак Л. И. Основы численных методов : учебное пособие / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. – М. : Физматлит, 2005. – 304 с.

8. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.

ТЕМА 4. МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ

Мета: обчислення диференціальних рівнянь в частинних похідних з використанням методу сіток.

Наближені методи розв'язання найбільш широко розроблені для ДР з частинними похідними 2-го порядку з двома незалежними змінними. Такі рівняння можна записати в такому вигляді:

$$\begin{aligned} &A(x,y)\frac{\partial^2 z}{\partial x^2}+B(x,y)\frac{\partial^2 z}{\partial x\partial y}+C(x,y)\frac{\partial^2 z}{\partial y^2}+\\ &+a(x,y)\frac{\partial z}{\partial x}+b(x,y)\frac{\partial z}{\partial y}+c(x,y)Z=F(x,y), \end{aligned} \tag{4.1}$$

де Z – функція, яку необхідно знайти;

x, y – незалежні змінні.

Функції $A(x,y), B(x,y), C(x,y), a(x,y), b(x,y), c(x,y)$ – неперервні функції, які мають неперервні частинні похідні.

Введемо позначення:

$$Z_{xx}=\frac{\partial^2 z}{\partial x^2},\ Z_{xy}=\frac{\partial^2 z}{\partial x\partial y},\ Z_{yy}=\frac{\partial^2 z}{\partial y^2},\ Z_x=\frac{\partial z}{\partial x},\ Z_y=\frac{\partial z}{\partial y}.$$

Тоді (4.1) буде мати вигляд:

$$A(x,y)Z_{xx}+B(x,y)Z_{xy}+C(x,y)Z_{yy}=0, \tag{4.2}$$

якщо $a\equiv b\equiv c\equiv F\equiv 0$.

Рівняння (4.2) може набувати одної з трьох стандартних канонічних форм. Цими формами є ***еліптичні, параболічні і гіперболічні*** ДР з частинними похідними.

Тип рівняння визначається значеннями коефіцієнтів в (4.2) і пов'язаний зі знаком дискримінанта $\Delta=B^2(x,y)-4A(x,y)C(x,y)$:

$\Delta<0$ – еліптичний тип в точці (x,y);

$\Delta = 0$ – параболічний тип в точці (x, y);

$\Delta > 0$ – гіперболічний тип в точці (x, y).

Якщо коефіцієнти A, B і C сталі, не залежать від x і y, то канонічні рівняння є повністю еліптичними, параболічними або гіперболічними.

Класичними прикладами рівнянь з частинними похідними є рівняння Лапласа (канонічна еліптична форма), рівняння теплопровідності (канонічна параболічна форма), хвильове рівняння (канонічна гіперболічна форма).

Метод сіток (кінцевих різниць). Розглянемо випадок двох незалежних змінних. Нехай в площині xOy має місце деяка область G з границею Γ. Побудуємо на площині дві сім'ї паралельних прямих:

$$x = x_0 + ih \qquad (i = 0, \pm 1, \pm 2, ...)$$

$$y = y_0 + kl \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, ...).$$

Точки перетину цих прямих назвемо *вузлами.* Два вузли називаються *сусідніми*, якщо вони віддалені один відносно одного на відстань, що дорівнює кроку сітки h або l.

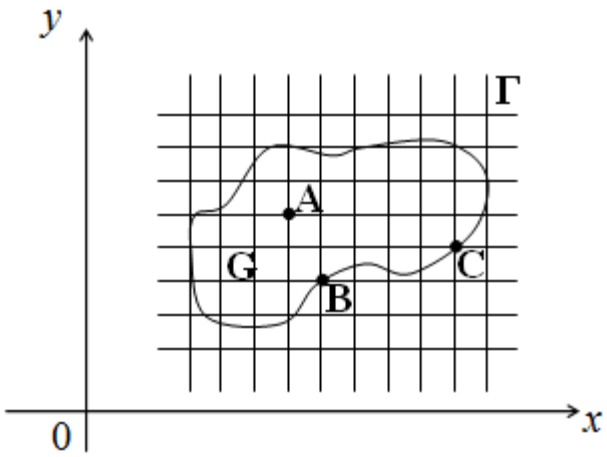

Рисунок 4.1 – Дві сім'ї паралельних прямих з точками перетину

Ті вузли, у яких всі чотири сусідніх вузли належать визначеній області вузлів, називаються *внутрішніми* (вузол A). Інші – *граничними* (вузли B, C).

Значення шуканої функції $u = u(x, y)$ в вузлах сітки позначимо $u_{ik} = u(x_0 + ih, y_0 + kl)$. В кожному внутрішньому вузлі $x_0 + ih, y_0 + kl$ замінимо частинні похідні відношеннями різниць:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ik} \approx \frac{u_{i+1,k} - u_{i-1,k}}{2h}, \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ik} \approx \frac{u_{i,k+1} - u_{i,k-1}}{2l}.$$

В граничних вузлах:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ik} \approx \frac{u_{i+1,k} - u_{ik}}{h}, \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ik} \approx \frac{u_{i,k+1} - u_{ik}}{l}.$$

Аналогічно замінимо частинні похідними 2-го порядку:

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ik} &\approx \frac{u_{i+1,k} - 2u_{ik} + u_{i-1,k}}{h^2},\\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ik} &\approx \frac{u_{i,k+1} - 2u_{ik} + u_{i,k-1}}{l^2}.\end{aligned}\right\}$$

Вказані заміни дозволять звести рішення рівнянь з частинними похідними до рішення системи рівнянь різниць.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- еліптичні рівняння (задача Діріхле для рівняння Лапласа);
- метод сіток для рівняння параболічного типу (рівняння теплопередачі).

Рекомендована література:

1. Вержбицкий В. М. Основы численных методов : учебник для вузов / Вержбицкий В. М. – М. : Высшая школа, 2002. – 840 с.

2. Формалев В. Д. Численные методы : учебник для вузов / В. Д. Формалев, Д. Л. Ревизников. – М. : Физмалит, 2006. – 400 с.

3. Фельдман Л. П. Чисельні методи в інформатиці : підручник / Фельдман Л. П., Петренко А. І., Дмитрієва О. А. – К. : Видавнича група BHV. – 2006. – 473 с.

4. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.

5. Бахвалов Н. С. Численные методы / Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. – М. : БИНОМ «Лаборатория знаний», 2003. – 632 с.

6. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.

ТЕМА 5. ІНТЕРПОЛЯЦІЙНІ ФОРМУЛИ ГАУССА, СТІРЛІНГА, БЕССЕЛЯ

Мета: оброблення експериментальних даних з використанням центральних інтерполяційних формул.

До обчислювальних задач аналізу зазвичай відносять методи інтерполяції і наближення функцій, які використовуються, зокрема, в чисельних процедурах для локальної апроксимації експериментальних даних.

Як відомо, інтерполяцію використовують для наближеного обчислення значень різних функцій. Якщо функція належить до класу алгебраїчних многочленів, то інтерполювання називають параболічним. Параболічне – найзручніше, оскільки многочлени, які прості за формою і не мають особливих точок, можуть набувати довільних значень. Їх легко обчислювати, диференціювати та інтегрувати, однак у деяких випадках доцільніше використовувати інші класи інтерполювальних функцій.

Щоб побудувати інтерполяційний многочлен Лагранжа, потрібно виконати значну обчислювальну роботу. Обсяг її дуже зростає тоді, коли необхідно підвищувати порядок многочлена: якщо до заданої системи вузлів інтерполювання $x_i \ \ (i = 0, 1, ..., n)$ додати ще хоч один вузол x_{n+1}, то для нової системи вузлів $x_i \ \ (i = 0, 1, ..., n+1)$ многочлен Лагранжа потрібно будувати заново.

Якщо немає потреби знати загальний вираз многочлена Лагранжа явно, а потрібно лише вміти обчислити його значення в точці x, то це можна зробити, використавши інтерполяційну схему Ейткіна, особливістю якої є однотипність обчислень.

Інтерполяційну схему Ейткіна застосовують і тоді, коли вузли інтерполювання не є рівновіддаленими, а також при оберненому інтерполюванні та екстраполюванні. Обчислення значення інтерполяційного многочлена за схемою Ейткіна має циклічний характер.

Якщо точка x, в якій потрібно знайти наближене значення таблично заданої функції $f(x)$, знаходиться на початку чи в кінці таблиці, застосовується відповідно перша чи друга формули Ньютона з таким вибором базової точки, щоб значення $|q|$ було якомога меншим.

Поряд з виведеними спеціально для початку і кінця таблиці першою і другою інтерполяційними формулами Ньютона, є ще декілька формул, розрахованих на їх застосування в центральній частині таблиці, тому вони називаються **центральними інтерполяційними формулами.**

Формули Гаусса застосовуються для інтерполювання в середині таблиці поблизу x_0. Крім того, перша формула Гаусса застосовується при $x > x_0$, а друга – при $x < x_0$.

Півсума першого і другого інтерполяційних многочленів Гаусса після перетворень приводить до формули, яка називається **інтерполяційною формулою Стірлінга**:

Зауваження. Якщо точка x знаходиться в середині таблиці, тоді завжди можна зафіксувати точку x_0 в таблиці центральних різниць так, щоб $q = \dfrac{x - x_0}{h}$ було за модулем меншим 0,25, і тоді застосовувати інтерполяційну формулу Стірлінга, чи щоб $q \in [0,25; 0,75]$ і використовувати формулу Бесселя.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- скінченні різниці та їх властивості;
- першу та другу інтерполяційні формули Ньютона.

Рекомендована література:

1. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування : підручник / Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. – К. : ІВЦ Видавництво «Політехніка», 2004. – 220 с.
2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.
3. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.
4. Шахов Ю. Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.
5. Крилик Л. В. Обчислювальна математика. Інтерполяція та апроксимація табличних даних : навчальний посібник / Крилик Л. В., Богач І. В., Прокопова М. О. – Вінниця : ВНТУ, 2013. – 111 с.

ТЕМА 6. СПЛАЙН-ІНТЕРПОЛЮВАННЯ

Мета: оброблення експериментальних даних з використанням сплайнів.

При інтерполюванні функцій з великою кількістю вузлів інтерполяційний поліном має високий степінь, що спричиняє коливання полінома на проміжках між вузлами інтерполювання. Щоб зменшити степінь інтерполяційного полінома, вузли інтерполювання можна розбити на групи і будувати інтерполяційні поліноми з меншою кількістю вузлів. Але в цьому разі на стиках між вузлами порушуються аналітичні властивості інтерполяційного полінома, з'являються точки розриву похідних. Позбутися цих

недоліків при інтерполюванні можна за допомогою ***сплайнів***. Сплайн на проміжку між вузлами інтерполювання є поліномом невисокого степеня. На всьому відрізку інтерполювання сплайн – це функція, склеєна з різних частин поліномів заданого степеня, в місцях сполучення яких перша та друга похідні неперервні. Для їх побудови необхідно задати коефіцієнти, які однозначно визначають поліном у проміжку між двома точками. Наочне уявлення про сплайни дають криві, побудовані за допомогою лекал, а також трамвайні та залізничні колії. Найпростіший приклад сплайнів – ламані.

Нехай маємо розбиття відрізка $[a,b]$ осі дійсних чисел сіткою вузлів

$$\Delta n : a = x_1 < x_2 < ... < x_i < ... < x_n = b, \qquad (6.1)$$

де n – натуральне число.

Означення. Функцію $q_m(x) = q_{m,k}(x, \Delta_n)$ називають ***поліноміальним сплайном степеня*** m ***дефекта*** k $(1 \le k \le m)$ з вузлами (6.1), якщо $q_m(x)$ на кожному з відрізків $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 1, 2, \ldots, n\text{-}1)$ є поліномом степеня не вище m; $q_m(x)$ є неперервною на $[a,b]$ функцією разом зі своїми похідними до $(m-k)$-го порядку включно.

Точки x_i $(i = 1, 2, \ldots, n-1)$ називають ***вузлами сплайна***. Похідна $(m-k+1)$-го порядку функції $q_m(x)$ може мати розриви у вузлах x_i $(i = 1, 2, \ldots, n-1)$.

З означення видно, що *дефект* характеризує *гладкість сплайна*. Чим більший дефект сплайна, тим менш гладкою функцією є сплайн, і навпаки. Так, сплайн $q_{1,1}(x)$ є поліномом першого степеня дефекту 1 і є ламаною лінією. Сплайн $q_{2,1}(x)$ є поліномом другого степеня дефекту 1. Це є неперервна на відрізку $[a,b]$ функція разом зі своєю *похідною* першого порядку. Цю функцію називають ***параболічним сплайном.***

Параболічний сплайн – це функція, склеєна з парабол. Так, параболічний сплайн $q_{2,2}(x)$ є неперервною на відрізку $[a,b]$ функцією. Похідні цієї функції у вузлах сплайна можуть мати розриви. Найбільше застосування мають сплайни, склеєні з поліномів третього степеня. Такі сплайни називають ***кубічними***.

Наприклад, у випадку, який показаний на рисунку 6.1, необхідно задати всі кубічні функції $q_1(x)$, $q_2(x), ..., q_m(x)$. В найзагальнішому випадку ці багаточлени мають такий вигляд:

$$q_i(x) = k_{1i} + k_{2i}x + k_{3i}x^2 + k_{4i}x^3, \quad i = 1, 2, ..., m, \qquad (6.2)$$

де k_{ji} – сталі, які визначені вказаними умовами $(j = 1, 2, 3, 4)$.

Перші ($2m$) умови потребують, щоб сплайни стикалися в заданих точках:

$$q_i(x_i) = y_i, \qquad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ m,$$
$$q_{i+1}(x_i) = y_i, \qquad i = 0, 1,\ \ldots,\ m-1.$$

Наступні *(2m-2)* умови потребують, щоб в місцях дотику сплайнів були однаковими перші та другі похідні

$$q'_{i+1}(x_i) = q'_i(x_i), \qquad i = 1,\ \ldots,\ m-1,$$
$$q''_{i+1}(x_i) = q''_i(x_i), \qquad i = 1,\ \ldots,\ m-1.$$

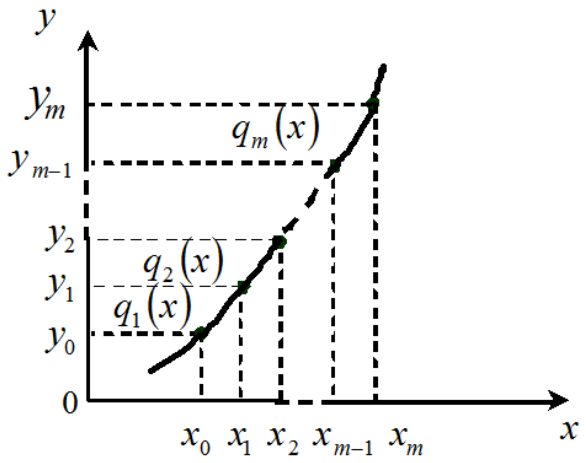

Рисунок 6.1 – Сплайн-інтерполяція

Система алгебраїчних рівнянь має розв'язок, якщо кількість рівнянь дорівнює кількості невідомих. Для цього необхідні ще два рівняння. Як правило, використовують такі додаткові умови:

$$q''_1(x_0) = 0; \qquad q''_m(x_m) = 0.$$

Отриманий таким чином сплайн називається «природним кубічним сплайном». При знайдених коефіцієнтах сплайна використовують цю кусково-гладку поліноміальну функцію для інтерполяції.

Якщо спеціально вибрати вигляд кубічних багаточленів, можна значно спростити задачу (зменшити кількість рівнянь). В випадку, коли окремі кубічні рівняння мають вигляд:

$$q_i(x) = ty_i + \bar{t}y_{i-1} + \Delta x_i[(k_{i-1} - d_i)t^2\bar{t} - (k_i - d_i)t\bar{t}^2, \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ m,$$

де $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $t = \dfrac{x - x_{i-1}}{\Delta x_i}$, $\bar{t} = 1 - t$, $\Delta y_i = y_i - y_{i-1}$, $\dfrac{\Delta y_i}{\Delta x_i} = d.$

Кожне з рівнянь $q_i(x)$ містить тільки два невідомих коефіцієнти. Після того, як перше рівняння записано, з кожним наступним рівнянням дода-

ється тільки один невідомий коефіцієнт. При цьому при $x = x_{i-1}$, $t = 0$, $\bar{t} = 1$, а при $x = x_i \quad t = 1, \quad \bar{t} = 0$.

Отже, всі умови, крім умов для других похідних, задовольняються. Другі похідні виражені для внутрішніх точок відношенням:

$$k_{i-1}\Delta x_{i+1} + 2k_i(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) + k_{i+1}\Delta x_i = 3(d_i\Delta x_{i+1} + d_{i+1}\Delta x_i),$$

а для двох зовнішніх:

$$2k_0 + k_1 = 3d_1 \qquad \text{та} \quad k_{m-1} + 2k_m = 3d_m.$$

Таким чином, система рівнянь, яку розв'язуємо, є лінійною, а її матриця – тридіагональною:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & \\ \Delta x_2 & 2(\Delta x_1 + \Delta x_2) & \Delta x_1 & \Delta x_2 & \\ 0 & \Delta x_3 & 2(\Delta x_2 + \Delta x_3) & 2(\Delta x_{m-1} + \Delta x_m) & \Delta x_{m-1} \\ & & \Delta x_m & 1 & 2 \end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} k_0 \\ k_1 \\ . \\ . \\ . \\ k_m \end{bmatrix} = 3 \begin{bmatrix} d_1 \\ d_1\Delta x_2 + d_2\Delta x_1 \\ d_2\Delta x_3 + d_3\Delta x_2 \\ \ldots\ldots\ldots \\ d_{m-1}\Delta x_m + d_m\Delta x_{m-1} \\ d_m \end{bmatrix}.$$

Методи розв'язування таких систем добре розроблені.

В багатьох випадках метод сплайнів є найбільш зручним, тому що це дозволяє отримати аналітичну кусково-поліноміальну функцію. Існують сплайни вищих порядків. Використання цього методу можливе і в інших галузях обчислювальної математики, наприклад, в чисельному інтегруванні і розв'язанні диференціальних рівнянь.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- інтерполювання кубічними сплайнами;
- похибки наближення кубічними сплайнами;
- наближення таблично заданих функцій за допомогою сплайн-інтерполяції.

Рекомендована література:

1. Фельдман Л. П. Чисельні методи в інформатиці : підручник / Фельдман Л. П., Петренко А. І., Дмитрієва О. А. – К. : Видавнича група BHV. – 2006. – 473 с.

2. Бахвалов Н. С. Численные методы / Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.– М. : БИНОМ «Лаборатория знаний», 2003. – 632 с.

3. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.

4. Турчак Л. И. Основы численных методов : учебное пособие / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. – М. : Физматлит, 2005. – 304 с.

5. Крилик Л. В. Обчислювальна математика. Інтерполяція та апроксимація табличних даних : навчальний посібник / Крилик Л. В., Богач І. В., Прокопова М. О. – Вінниця : ВНТУ, 2013. – 111 с.

ТЕМА 7. АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ

Мета: оброблення експериментальних даних з використанням апроксимації.

Апроксимація чи ***наближення*** – науковий метод, що полягає в заміні одних об'єктів іншими, близькими до вихідних, але простішими. Апроксимація дозволяє дослідити числові характеристики і якісні властивості об'єкта, зводячи задачу до вивчення простіших чи зручніших об'єктів (наприклад таких, характеристики яких легко обчислюються або властивості яких уже відомі). Прикладами апроксимації в математиці є заміна кривих ліній ламаними, ірраціональних чисел – раціональними, неперервних функцій – многочленами та багато інших.

Часто виникає необхідність замінити дискретну функцію $f(x)$ неперервною $\varphi(x)$. Наприклад, є набір точок, і необхідно знайти аналітичний вираз такої неперервної функції, яка б охоплювала усі задані точки. Але виконати таку задачу не дуже просто і шукана функція $\varphi(x)$ може мати занадто складний аналітичний вигляд. Через це, проводячи апроксимацію, допускають деяке незначне відхилення точок шуканої функції $\varphi(x)$ від заданих $f(x)$. Введення такого відхилення дозволяє значно спростити пошук аналітичної функції або спростити її вигляд. Також це дає можливість власноруч вибрати загальний вигляд функції для апроксимації: поліном, тригонометрична, експоненціальна чи показникова функція та багато інших (рисунок 7.1).

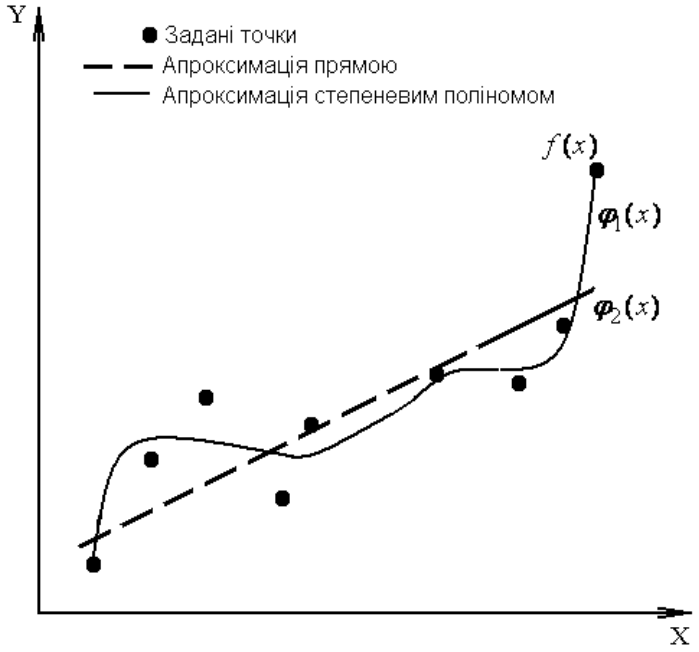

Рисунок 7.1 – Апроксимація функцій

Одним із способів проведення апроксимації є ***метод найменших квадратів*.** Це найпоширеніший метод. Перевагою його є те, що він має чітку математичну постановку. Відхилення розподіляються за нормальним законом.

Коефіцієнти шуканої функції $\varphi(x)$ підбираються таким чином, щоб сума квадратів відхилень (7.1) значень знайдених точок від заданих $f(x)$ була мінімальною (рисунок 7.2).

$$E = \sum_{i=1}^{n} (\varphi(x_i) - f(x_i))^2 = \min . \qquad (7.1)$$

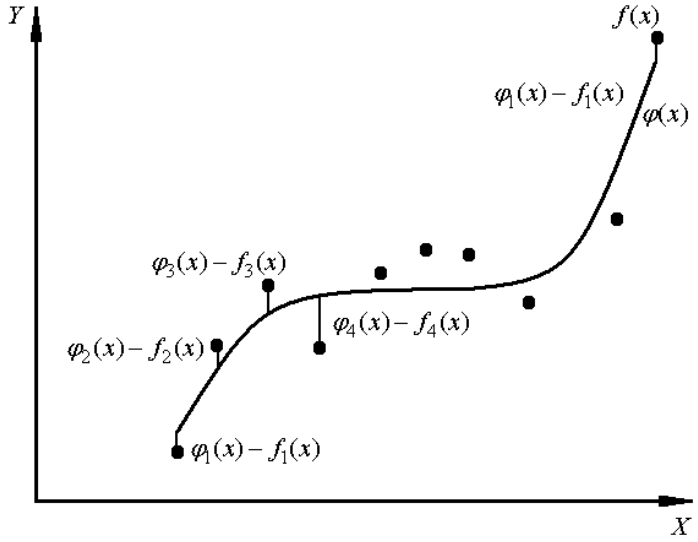

Рисунок 7.2 – Апроксимація функцій методом найменших квадратів

Нехай функція $\varphi(x)$ складається з суми деякої скінченної кількості функцій.

$$\varphi(x) = C_1 g_1(x) + C_2 g_2(x) + ... + C_m g_m(x), \qquad (7.2)$$

де $\varphi(x)$ – шукана функція;

$g_i(x)$ – проста функція;

C_i – невідомі коефіцієнти.

Прикладами шуканої функції можуть бути:

$$\varphi(x) = 5 + 7x + x^2 + 4x^4,$$
$$\varphi(x) = 3\sin(x) + 4\cos(x),$$
$$\varphi(x) = x^2 + tg(x) + \ln(x).$$

Тоді сума квадратів відхилень може бути знайдена:

$$E = \sum_{i=1}^{n} (C_1 g_1(x_i) + C_2 g_2(x_i) + ... + C_m g_m(x_i) - f(x_i))^2 = \min. \qquad (7.3)$$

Оскільки сума квадратів відхилень апроксимованої функції від заданої має бути мінімальною, то частинні похідні функції мають дорівнювати нулю:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E}{\partial C_1} = 0, \\ \dfrac{\partial E}{\partial C_2} = 0, \\ .... \\ \dfrac{\partial E}{\partial C_m} = 0. \end{cases} \qquad (7.4)$$

З врахуванням (7.3) отримаємо:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(\sum\limits_{i=1}^{n}(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))^2)}{\partial C_1}=0; \\ \dfrac{\partial(\sum\limits_{i=1}^{n}(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))^2)}{\partial C_2}=0; \\ .... \\ \dfrac{\partial(\sum\limits_{i=1}^{n}(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))^2)}{\partial C_m}=0. \end{cases} \quad (7.5)$$

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n}2g_1(x_i)(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))=0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n}2g_2(x_i)(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))=0, \\ .... \\ \sum\limits_{i=1}^{n}2g_n(x_i)(C_1g_1(x_i)+C_2g_2(x_i)+...+C_mg_m(x_i)-f(x_i))=0. \end{cases} \quad (7.6)$$

Перетворимо систему:

$$\begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n}g_1(x_i)^2 & \sum\limits_{i=1}^{n}g_1(x_i)g_2(x_i) & ... & \sum\limits_{i=1}^{n}g_1(x_i)g_m(x_i) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}g_2(x_i)g_1(x_i) & \sum\limits_{i=1}^{n}g_2(x_i)^2 & ... & \sum\limits_{i=1}^{n}g_2(x_i)g_m(x_i) \\ ... & ... & ... & ... \\ \sum\limits_{i=1}^{n}g_m(x_i)g_1(x_i) & \sum\limits_{i=1}^{n}g_m(x_i)g_2(x_i) & ... & \sum\limits_{i=1}^{n}g_m(x_i)^2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ ... \\ C_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n}f(x_i)g_1(x_i) \\ \sum\limits_{i=1}^{n}f(x_i)g_2(x_i) \\ ... \\ \sum\limits_{i=1}^{n}f(x_i)g_m(x_i) \end{bmatrix} \quad (7.7)$$

Елементи матриці в лівій частині та вектора-стовпця в правій визначаються табличними даними, тому отримана система k лінійних рівнянь з k невідомими може бути розв'язана. Вибір функції $g(x)$ потрібно здійснювати з урахуванням характеру табличних даних (періодичності, властивості симетрії, існування асимптотики тощо).

Іноді таблицю розбивають на декілька частин та добирають окрему апроксимувальну криву для кожної частини. Такий підхід задовольняє ті випадки, коли дані відповідають різним фізичним станам системи.

Залишкова середня квадратична похибка апроксимації оцінюється:

$$\Delta = \sqrt{\frac{E}{n+1}}, \tag{7.8}$$

де n – кількість точок;

E – сума квадратів відхилень точок заданої функції від шуканої.

Якщо при побудові апроксимувальної функції використовуються ортогональні поліноми, для яких

$$\sum g_j(x_i) g_k(x_i) = 0, \text{ якщо } \quad j \neq k,$$

то система (7.5) спрощується, і матриця стає діагональною. Коефіцієнти визначаються зі співвідношень:

$$C_j = \sum_{i=0}^{n} g_j(x_i) y_i \Big/ \sum_{i=0}^{n} g_j^2(x_i).$$

Це спрощує задачу, і тому в багатьох стандартних програмах підгонки кривих використовують ортогональні поліноми.

Отже, задача апроксимації зводиться до задачі розв'язання системи рівнянь (7.7).

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- метод найменших квадратів;
- інтерполювання функції.

Рекомендована література:

1. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування : підручник / Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. – К. : ІВЦ Видавництво «Політехніка», 2004. – 220 с.

2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.

3. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.

4. Шахов Ю. Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.

5. Крилик Л. В. Обчислювальна математика. Інтерполяція та апроксимація табличних даних : навчальний посібник / Крилик Л. В., Богач І. В., Прокопова М. О. – Вінниця : ВНТУ, 2013. – 111 с.

ТЕМА 8. ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ ФУНКЦІЇ, ОСНОВАНЕ НА ІНТЕРПОЛЯЦІЙНИХ ФОРМУЛАХ ГАУССА, СТІРЛІНГА, БЕССЕЛЯ

Мета: застосування центральних інтерполяційних формул для чисельного диференціювання функції.

При розв'язанні багатьох практичних задач виникає необхідність визначення похідних від функцій, що задаються масивами даних, отриманих з експерименту. В цьому випадку безпосереднє диференціювання може дати безглузді результати, оскільки не відокремлено шум, що дуже сильно впливає на похідну. Приклад зображено на рисунку 8.1, де $f(x)$ – корисний сигнал, $\tilde{f}(x)$ – виміряний сигнал (з шумом).

Зрозуміло, що похідна від $f(x)$ буде містити значну випадкову складову, що вносить велику похибку в визначення реальної похідної від *X*. Практичним шляхом розв'язання цієї проблеми є згладжування сигналу, що отриманий з експерименту, шляхом інтерполяції чи апроксимації, а далі диференціювання інтерполяційного полінома (чи апроксимувальної функції). При цьому для отримання похідних вищих порядків потрібно висувати умову їх збігання для сигналу та його інтерполяційного полінома. Похибка похідної інтерполяційної функції $P(x)$ дорівнює похідній від похибки цієї функції:

$$\Delta(x) = \tilde{f}(x) - P(x),$$

$$\Delta^*(x) = \tilde{f}'(x) - P'(x),$$

тобто внаслідок лінійності операцій диференціювання та віднімання маємо

$$\Delta^*(x) = \Delta'(x).$$

В довідниках існують спеціальні таблиці, що дозволяють знаходити з застосуванням різних різницевих інтерполяційних формул значення похідних. Взагалі такі формули нескладно отримати для будь-яких методів інтерполяції шляхом диференціювання інтерполяційних формул в загальному вигляді.

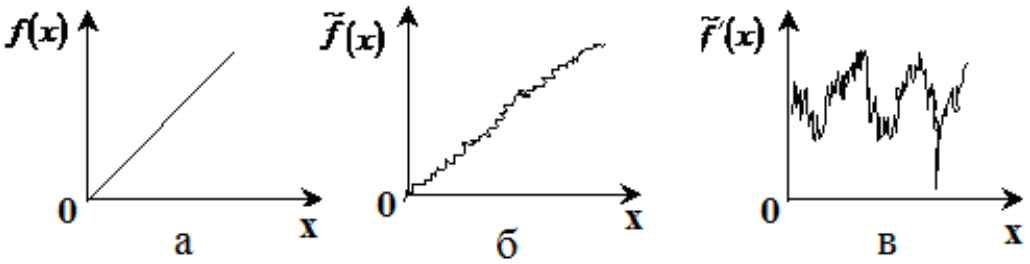

Рисунок 8.1 – Експериментальні характеристики корисного сигналу та сигналу з шумом

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- інтерполяційні формули Гаусса, Стірлінга, Бесселя.

Рекомендована література:

1. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування : підручник / Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. – К. : ІВЦ Видавництво «Політехніка», 2004. – 220 с.
2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.
3. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.
4. Шахов Ю. Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.
5. Крилик Л. В. Обчислювальна математика. Інтерполяція та апроксимація табличних даних : навчальний посібник / Крилик Л. В., Богач І. В., Прокопова М. О. – Вінниця : ВНТУ, 2013. – 111 с.
6. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.

ТЕМА 9. КВАДРАТУРНІ ФОРМУЛИ ЧЕБИШЕВА ТА ГАУССА

Мета: чисельне інтегрування функції з використання формул Чебишева та Гаусса.

Формула Ньютона–Лейбніца досить зручна для обчислення визначених інтегралів. Однак на практиці дуже рідко вдається обчислити точно визначений інтеграл чи проінтегрувати звичайне диференціальне рівняння. У багатьох випадках первісну функцію не можна знайти аналітично чи вона має досить складний і незручний для обчислень вигляд (навіть якщо вона є елементарною), що утруднює обчислення інтеграла за формулою Ньютона–Лейбніца, або воно взагалі стає неможливим. Часто на практиці підін-

тегральна функція задається таблично або графічно, що також унеможливлює використання аналітичних методів.

У всіх згаданих випадках для обчислення визначеного інтеграла використовують чисельні методи. Чисельне обчислення однорідних інтегралів називається механічною квадратурою, а коли розмірність інтеграла більше одиниці – механічною кубовою. Відповідно формули ***називають квадратурними*** та ***кубатурними***. Особливо важливе значення мають квадратурні формули – методи чисельного інтегрування функцій, в яких для знаходження наближеного значення визначеного інтеграла використовуються значення підінтегральної функції та її похідних у скінченній кількості точок, що належать переважно проміжку інтегрування.

До інтерполяційних квадратурних формул належать формули Ньютона–Котеса, Гаусса, Чебишева. Вузли цих формул рівновіддалені. Формули Ньютона–Котеса, Гаусса, Чебишева різняться степенями інтерполяційних многочленів. Щоб не мати справу з многочленами високих степенів, зазвичай розбивають проміжок інтегрування на окремі ділянки, а потім використовують формули Ньютона–Котеса, Гаусса, Чебишева з невисокими степенями на кожній ділянці, далі додають отримані результати. Це створює так звані складені формули.

Для виведення формул Ньютона–Котеса інтеграл зображається у вигляді

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + \Delta, \qquad (9.1)$$

де x_i – вузли інтерполяції;

A_i – коефіцієнти, які залежать від вигляду формули;

Δ – похибка квадратурної формули.

Формула (9.1) може бути зведена до вигляду

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \sum_{i=1}^{n} A_i f(t_i) \qquad (9.2)$$

заміною змінних

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t \ .$$

При виведенні ***формули Чебишева*** використовуються такі умови:

- коефіцієнти A_i однакові між собою;
- квадратурна формула (9.2) точна для всіх поліномів до степеня n включно.

При цих умовах формула (9.2) має вигляд:

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \frac{2}{n}\sum_{i-1}^{n} f(t_i). \qquad (9.3)$$

Для знаходження t_i використовуємо другу умову, згідно з якою формула (9.3) має бути точною для функції вигляду

$$f(t) = t^k, \quad k = 1,..., n.$$

Після підстановки цих функцій в (9.3) отримаємо систему рівнянь

$$\begin{cases} t_1 + t_2 + ... + t_n = 0; \\ t_1^2 + t_2^2 + ... + t_n^2 = \dfrac{n}{3}; \\ t_1^n + t_2^n + ... + t_n^n = \dfrac{n\left[1-(-1)^{n+1}\right]}{2(n+1)}. \end{cases} \qquad (9.4)$$

Система рівнянь (9.4) має розв'язок при $n < 8$ *та* $n = 9$. В цій обмеженій точності і полягає недолік формули Чебишева. Значення t_i для різних n наведено в [6].

Для довільного інтервалу (*a, b*) формула (9.3) набуває вигляду

$$I = \frac{b-a}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i),$$

де $$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t_i.$$

Формула Гаусса називається формулою найвищої алгебраїчної точності. Для формули вигляду (9.2) найвища точність може бути досягнута для поліномів степеня $(2n-1)$, які визначаються $2n$ сталими t_i і A_i (i = 1, 2, … n).

Завдання полягає у визначенні коефіцієнтів A_i і абсцис точок t_i.

Для знаходження цих сталих розглянемо виконання формули (9.2) для функцій вигляду

$$f(t) = t^k, k = 0,1,...,2n-1.$$

Враховуючи, що

$$\int_{-1}^{1} t^k dt = \begin{cases} 2/(k+1) \\ 0 \end{cases},$$

отримаємо систему рівнянь

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} A_i = 2; \\ \sum_{i=1}^{n} A_i t_i = 0; \\ \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^2 = 1; \\ \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^{2n-2} = \dfrac{2}{2n-1}; \\ \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^{2n-1} = 0. \end{cases} \qquad (9.5)$$

Ця система нелінійна, і її звичайне розв'язання пов'язано із значними обчислювальними труднощами. Але якщо використовувати систему для поліномів вигляду

$$f(t) = t^k P_n(t), \quad k = 0,1,...,n-1,$$

де $P_n(t)$ – поліном Лежандра, тоді її можна звести до лінійної відносно коефіцієнтів A_i з заданими точками t_i. Оскільки степені поліномів в співвідношенні не перевищують $2n-1$, має виконуватися система (9.5) і формула (9.2) набуває вигляду

$$\int_{-1}^{1} t^k P_n(t) dt = \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k P_n(t_i).$$

З врахуванням властивості ортогональності ліва частина виразу дорівнює 0, тоді

$$\sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k P_n(t_i) = 0,$$

що завжди забезпечується при будь-яких значеннях A_i в точках t_i, які відповідають кореням відповідних поліномів Лежандра.

Підставляючи ці значення t_i в систему (9.5) і враховуючи перші n рівнянь, можна визначити коефіцієнти A_i.

Формула (9.2), де t_i – нулі полінома Лежандра $P_n(t)$, а $A_i, i = 1,2,...,n$ визначаються із системи (9.4), називається *формулою Гаусса*.

Для довільного інтервалу (*a,b*) формула для методу Гаусса набуває вигляду

$$I = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i),$$

де $x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t_i$.

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- квадратурні формули Чебишева та Гаусса;
- оцінка похибки обчислень за формулами Чебишева та Гаусса.

Рекомендована література:

1. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування : підручник / Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. – К. : ІВЦ Видавництво «Політехніка», 2004. – 220 с.
2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.
3. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.
4. Колесницький О. К. Чисельні методи : навчальний посібник / Колесницький О. К, Арсенюк І. Р., Месюра В. І. – Вінниця : ВНТУ, 2017. – 130 с.
5. Вержбицкий В. М. Основы численных методов : учебник для вузов / Вержбицкий В. М. – М. : Высшая школа, 2002. – 840 с.
6. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.

ТЕМА 10. ФОРМУЛИ НЬЮТОНА–КОТЕСА ВИЩИХ ПОРЯДКІВ

Мета: чисельне інтегрування функції за допомогою правила трьох восьмих.

Замінивши підінтегральну функцію інтерполяційним поліномом третього степеня, аналогічно формулі Сімпсона, отримаємо ***квадратурну формулу Ньютона***

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3) + R_1(f), \qquad (10.1)$$

яку ще називають ***правилом трьох восьмих***.

Залишковий член формули Ньютона на частковому інтервалі (10.1) визначається як

$$R_1(f)=\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx-\frac{3h}{8}(y_0+3y_1+3y_2+y_3)=-\frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi)\quad \xi\in[x_0,x_3],$$

а на всьому відрізку інтегрування справедлива оцінка похибки

$$|R(f)|\le\frac{3h^4(b-a)}{80}\max_{[a,b]}|f^{(4)}(\xi)|\quad \xi\in[x_0,x_3], \tag{10.2}$$

тобто при однаковому кроці формула Ньютона, взагалі-то, менш точна, ніж формула Сімпсона.

Варто зауважити, що похибка формули Ньютона–Котеса з n+1 ординатами при досить гладкій функції $y=f(x)$ має порядок щонайменше

$$R(f)=O\left[h^{2E\left(\frac{n}{2}\right)+3}\right],$$

де $E\left(\frac{n}{2}\right)$ – ціла частина дробу $\frac{n}{2}$.

Звідси випливає, що квадратурні формули з непарним числом ординат є найточнішими.

Наведемо таблицю коефіцієнтів Котеса (табл. 10.1).

Таблиця 10.1 – Коефіцієнти Котеса

n	$\hat{H}_0$	$\hat{H}_1$	$\hat{H}_2$	$\hat{H}_3$	$\hat{H}_4$	$\hat{H}_5$	$\hat{H}_6$	$\hat{H}_7$	$\hat{H}_8$	N
1	1	1								2
2	1	4	1							6
3	1	3	3	1						8
4	7	32	12	32	7					90
5	19	75	50	50	75	19				288
6	41	216	27	272	27	216	41			840
7	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751		17280
8	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989	28350

Для зручності запису коефіцієнти Котеса для кожного n подані у вигляді дробів

$$H_i = \frac{\hat{H}_i}{N}$$

із спільним знаменником N. Для контролю відзначимо, що

$$\sum_{i=0}^{n} \hat{H}_i = N .$$

Слід звернути увагу на те, що коефіцієнти Котеса при великих n можуть бути від'ємними (наприклад, $n=8$).

Під час підготовки до цієї теми необхідно розглянути:

- квадратурні формули з рівновіддаленими вузлами.

Рекомендована література:

1. Шахов Ю.Н. Численные методы : учебное пособие / Ю. Н. Шахов, Е. И. Деза. – М. : Книжный дом «Либроком», 2012. – 248 с.
2. Квєтний Р. Н. Методи комп'ютерних обчислень : навчальний посібник / Квєтний Р. Н. – Вінниця : ВДТУ, 2001. – 148 с.
3. Киреев В. И. Численные методы в примерах и задачах : учебн. пособие / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.
4. Колесницький О. К. Чисельні методи : навчальний посібник / Колесницький О. К, Арсенюк І. Р., Месюра В. І. – Вінниця : ВНТУ, 2017. – 130 с.
5. Вержбицкий В. М. Основы численных методов : учебник для вузов /. Вержбицкий В. М. – М. : Высшая школа, 2002. – 840 с.
6. Копченова Н. В. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – М. : Лань, 2008. – 368 с.

Навчальне видання

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання самостійних робіт з дисциплін «Чисельні методи в мікро- та наносистемній техніці» та «Обчислювальна математика» для студентів денної і заочної форм навчання спеціальностей «Мікро- та наносистемна техніка» та «Електроніка»

Укладачі: Людмила Вікторівна Крилик
Олена Олександрівна Селецька

Рукопис оформлено Л. Крилик

Редактор Т. Старічек

Оригінал-макет виготовлено О. Ткачуком

Підписано до друку 23.01.2018.
Формат 29,7×42¼. Папір офсетний.
Гарнітура Times New Roman.
Друк різографічний. Ум. друк. арк. 1,9.
Наклад 40 (1-й запуск 1-20) пр. Зам. № 2018-028.

Видавець та виготовлювач
інформаційний редакційно-видавничий центр.
ВНТУ, ГНК, к. 114.
Хмельницьке шосе, 95,
м. Вінниця, 21021.
Тел. (0432) 65-18-06.
press.vntu.edu.ua;
E-mail: kivc.vntu@gmail.com.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
серія ДК № 3516 від 01.07.2009 р.