

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет»

А. В. Моисеев

**ОСНОВНЫЕ МЕТОДЫ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ**

Компьютерный практикум

Утверждено в качестве учебного пособия
Учёным советом Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего профессионального образования
«Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет»

Комсомольск-на-Амуре
2012

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.19я73
М748

Рецензенты:

Ученый совет УРАН «Институт машиноведения и металлургии
Дальневосточного отделения РАН»,
ученый секретарь доктор технических наук И. Г. Сапченко;
А. Н. Анисимов, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры
информатики ФГБОУ ВПО «Амурский гуманитарно-педагогический
государственный университет»

Моисеев, А. В.

М748 Основные методы вычислительной математики. Компьютерный
практикум : учеб. пособие / А. В. Моисеев. – Комсомольск-на-Амуре :
ФГБОУ ВПО «КнАГТУ», 2012. – 95 с.
ISBN 978-5-7765-0963-6

В пособии изложены основные теоретические положения курса «Математические методы в инженерных расчетах», приведены методические указания к лабораторным работам по основным разделам курса, контрольные вопросы, индивидуальные задания к лабораторным работам, примеры реализации математических методов в пакетах прикладных компьютерных программ.

Учебное пособие предназначено для студентов направления 240100 – «Химическая технология» и специальности 240403 – «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов» всех форм обучения.

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.19я73

ISBN 978-5-7765-0963-6

© ФГБОУ ВПО «Комсомольский-
на-Амуре государственный
технический университет»,
2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ И ТРАНСЦЕНДЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ	7
1.1. Локализация корней	7
1.2. Уточнение корней	9
1.2.1. Метод половинного деления	9
1.2.2. Метод простых итераций	12
1.2.3. Метод хорд	15
1.2.4. Метод секущих	16
1.2.5. Вычислительный блок <i>Given/Find</i>	18
1.3. Задания к лабораторной работе 1	19
1.4. Контрольные вопросы	19
2. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	20
2.1. Графический метод	20
2.2. Метод Ньютона-Рафсона	22
2.3. Вычислительный блок <i>Given/Find</i>	24
2.4. Функция <i>Minimize</i>	25
2.5. Задания к лабораторной работе 2	25
2.6. Контрольные вопросы	27
3. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ	27
3.1. Интерполяционный многочлен Лагранжа	27
3.2. Линейная интерполяция	30
3.3. Сплайн-интерполяция	31
3.4. Полиномиальная сплайн-интерполяция	35
3.5. Обратное интерполирование	36
3.6. Задания к лабораторной работе 3	38
3.7. Контрольные вопросы	41
4. АППРОКСИМАЦИЯ	41
4.1. Линейная регрессия. Метод наименьших квадратов	48
4.2. Полиномиальная регрессия	53
4.3. Другие типы регрессии	58
4.4. Регрессия общего вида	60
4.5. Задания к лабораторной работе 4	62
4.6. Контрольные вопросы	64
5. ПОИСК ЭКСТРЕМУМОВ ФУНКЦИИ	64
5.1. Метод сканирования	66
5.2. Метод локализации экстремума	67
5.3. Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи	69

....5.4. Метод «золотого сечения»	72
....5.5. Поиск локального экстремума с помощью средств MathCAD	74
5.6. Поиск условного экстремума функции	75
5.7. Поиск экстремума функции, заданной таблично	76
5.8. Задания к лабораторной работе 5	78
5.9. Контрольные вопросы	80
6. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ	81
6.1. Численное дифференцирование	81
6.1.1. Разностные формулы	82
6.1.2. Метод неопределенных коэффициентов	87
6.1.3. Дифференцирование встроенными средствами MathCAD	84
6.2. Численное интегрирование	85
6.2.1. Формулы прямоугольников	85
6.2.2. Формула трапеций	87
6.2.3. Формула Симпсона	88
6.2.4. Метод неопределенных коэффициентов	90
6.2.5. Интегрирование с помощью встроенных средств MathCAD	90
6.3. Задания к лабораторной работе 6	91
6.4. Контрольные вопросы	94
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	94
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	95

ВВЕДЕНИЕ

Процесс решения задач техники и технологии с помощью методов математического моделирования состоит из нескольких этапов, изображенных на рис. 1.

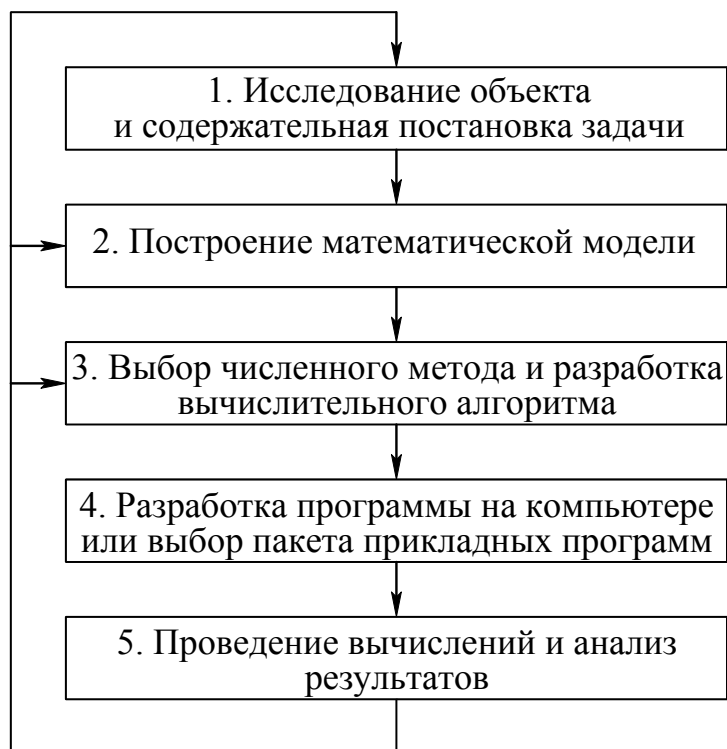


Рис. 1. Процесс решения задачи

На первом этапе проводится *исследование объекта* и формулируется *содержательная* (физическая, химическая и т.п.) *постановка задачи*. Для того, чтобы задачу можно было описать количественно, необходимо проведение качественного и количественного анализа свойств объекта и выделение основных параметров, оказывающих на них наибольшее влияние.

Следующим этапом является математическая постановка задачи, в процессе которой осуществляется *построение математической модели*. Под математической моделью понимают систему математических соотношений, которым должна удовлетворять система основных параметров задачи или объекта. Главное требование, предъявляемое к математической модели – *адекватность* (соответствие) исследуемому объекту. Другое немаловажное требование – чтобы модель была не слишком сложной, доступной для математической обработки.

На следующем этапе необходимо найти методы решения математической модели (рис. 2). В наиболее простых случаях удастся построить

аналитическое решение задачи. Такие решения позволяют не только количественно, но и качественно проанализировать исследуемые параметры. Однако в большинстве случаев невозможно отыскать аналитическое решение и приходится применять *численные методы*. И аналитические и численные методы разделяются на *точные* и *приближенные*. К точным методам относятся такие методы, которые позволяют получить решение задачи с любой, заранее заданной точностью. Приближенные методы не дают такой возможности. В этих случаях при построении решения должна быть произведена *оценка погрешности*, или *остаточного члена*. Численные методы делятся на две группы. К первой относятся алгоритмы – *прямые методы*, позволяющие за заранее определенное число арифметических действий получить решение задачи. Вторую группу составляют *методы последовательных приближений* – *итерационные методы*.

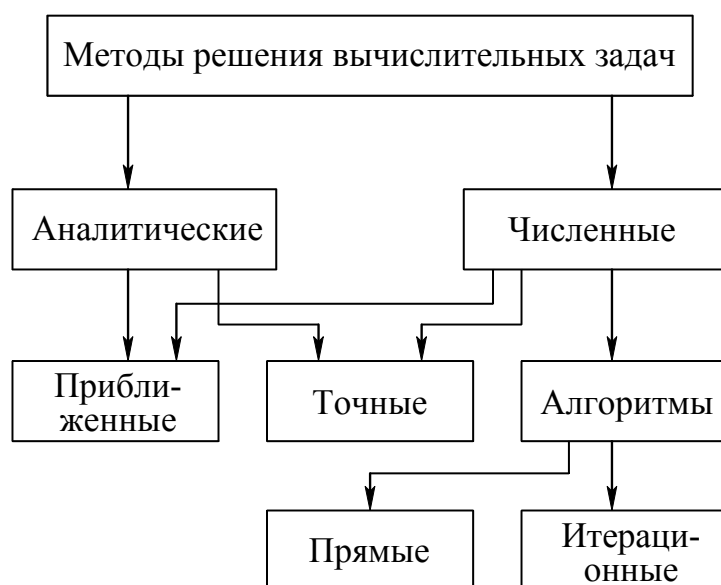


Рис. 2. Методы решения вычислительных задач

Четвертым этапом является *разработка программы решения задачи* на компьютере, её тестирование и отладка. В случае, если рассматриваемая математическая задача исследована и для её решения разработаны стандартные программы, остается лишь выбрать наиболее подходящую для данной ситуации.

На заключительном этапе выполняют вычислительные эксперименты и проводят анализ результатов. Если результаты не удовлетворяют поставленным условиям, требуется совершенствование алгоритма или метода решения задачи, её математической модели, а в некоторых случаях – корректировка содержательной постановки.

В настоящее время численные методы являются мощным математическим средством решения многих научно-технических проблем. Это связано как с невозможностью в большинстве случаев получить точное аналитическое решение, так и со стремительным развитием компьютерной техники. Существуют многочисленные стандартные программы и объектно-ориентированные пакеты прикладных программ. Однако научным и инженерно-техническим работникам важно понимать сущность основных математических методов и алгоритмов, поскольку зачастую интерпретация результатов расчетов нетривиальна и требует специальных знаний особенностей применяемых методов.

1. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ И ТРАНСЦЕНДЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим уравнение $f(x)=0$, где функция $f(x)$ определена и непрерывна в некотором конечном или бесконечном интервале $a < x < b$.

Корнем уравнения (нулем функции) $f(x)=0$ называется значение ξ , обращающее функцию $f(x)$ в нуль, т.е. такое, что $f(\xi)=0$.

Уравнение $f(x)=0$ называется *алгебраическим*, если функция $f(x)$ является многочленом $f(x)=a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$. В противном случае уравнение называется *трансцендентным*.

Решение уравнения состоит из двух этапов:

- 1) локализация корней;
- 2) уточнение корней.

1.1. Локализация корней

Наиболее удобен графический метод локализации корней. Он состоит в построении графика функции на некотором интервале и идентификации окрестностей точек пересечения графика с осью абсцисс. Для реализации метода в прикладном пакете MathCAD необходимо воспользоваться следующим алгоритмом:

- 1) Задать решаемое уравнение как функцию пользователя, т.е.

$$f(x)=\dots,$$

перенеся все члены уравнения в одну часть.

- 2) Задать численные значения начала и конца интервала, на котором будут отыскиваться корни (задается произвольно).

3) Задать шаг изменения аргумента функции пользователя (чем меньше шаг, тем детальней изобразится график и тем большая точность метода будет обеспечена).

4) Задать изменение значения аргумента, используя границы интервала и шаг.

5) Отобразить график.

Пример 1.1. Локализовать корни уравнения $\sin 5x + x^2 - 1 = 0$ на отрезке $[-3; 3]$ с шагом 1 и 0,1.

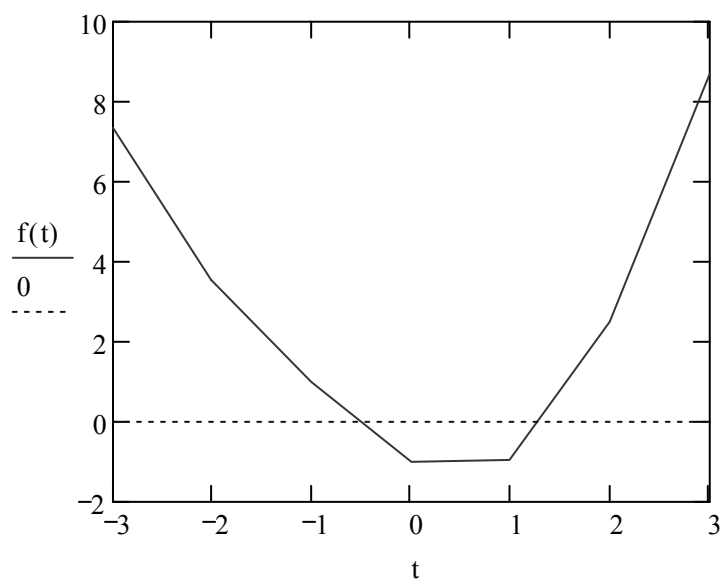
$f(x) := \sin(5 \cdot x) + x^2 - 1$ 'Уравнения как функция пользователя

$a := -3$ 'Левая граница интервала

$b := 3$ 'Правая граница интервала

$h := 1$ 'Шаг изменения аргумента

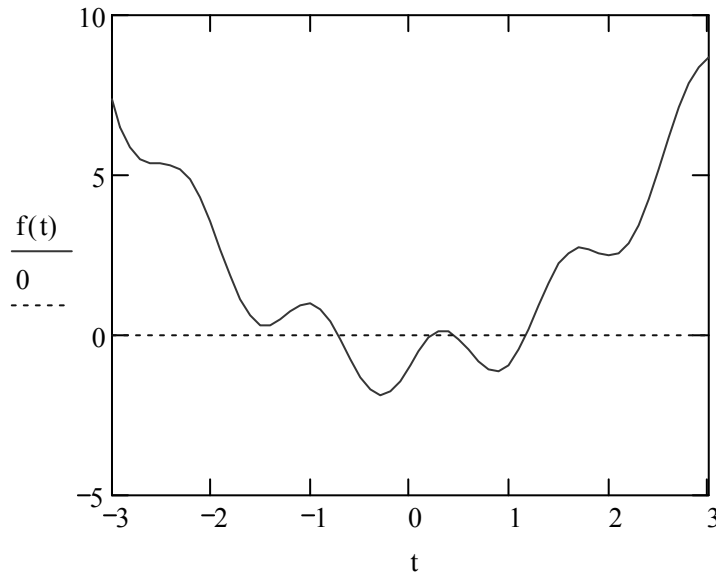
$t := a, a + h.. b$ 'Изменение значения аргумента



При шаге изменения аргумента $h = 1$ графический метод показывает, что уравнение имеет два корня в интервалах $[-1; 0]$ и $[1; 2]$.

$h := 0.1$ 'Шаг изменения аргумента

$t := a, a + h.. b$ 'Изменение значения аргумента



При шаге изменения аргумента $h = 0,1$ графический метод показывает, что уравнение имеет четыре корня в интервалах $[-1; 0]$, $[0; 1]$, $[1; 2]$.

Таким образом, сужение шага изменения аргумента приводит к повышению процедуры локализации корней.

1.2. Уточнение корней

После нахождения интервала, содержащего корень, применяют итерационные методы уточнения корня с заданной точностью. Для этого используется несколько методов. К наиболее часто применимым относятся:

- 1) метод половинного деления (метод бисекций, метод дихотомии);
- 2) метод простых итераций;
- 3) метод хорд;
- 4) метод секущих.

1.2.1. Метод половинного деления

В основе метода половинного деления лежит деление отрезка $[a; b]$, на котором локализован корень, пополам в соответствии с итерационной формулой

$$x^{(k)} = \frac{a + b}{2}, \quad (1.1)$$

$$k = 1, 2, 3, \dots$$

На каждой итерации отрезок $[a; b]$ уменьшается в два раза и выбирается та его половина, на концах которой функция имеет *противоположные знаки* (рис. 1.1).

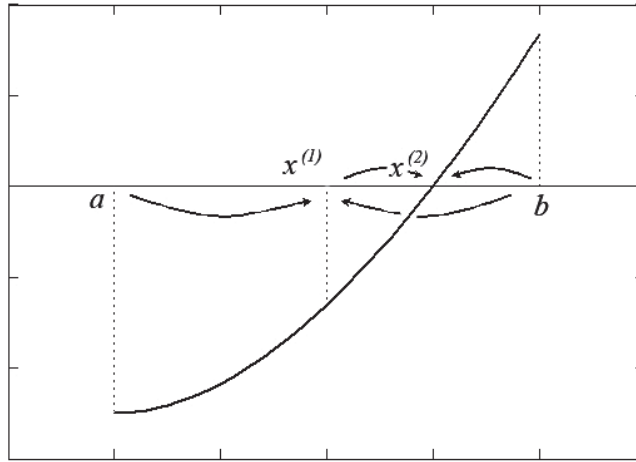


Рис. 1.1. Метод половинного деления

Если $f(a) \cdot f(x^{(k)}) > 0$, то $a = x^{(k)}$; если $f(b) \cdot f(x^{(k)}) > 0$, то $b = x^{(k)}$; если $f(x^{(k)}) = 0$, то $x^{(k)}$ – корень уравнения.

Процесс деления каждого нового отрезка продолжается до тех пор, пока длина отрезка не станет сравнимой с заданной точностью, т.е.

$$|b - a| \leq \varepsilon.$$

Более строгое изложение алгоритма метода половинного деления таково:

- 1) Вычислить $x = \frac{a+b}{2}$ и $f(x)$.
- 2) Если $f(x) = 0$, то перейти к п. 5.
- 3) Если $f(x) \cdot f(a) < 0$, то $b = x$, иначе $a = x$.
- 4) Если $|b - a| > \varepsilon$, то перейти к п. 1.
- 5) Вывести значение x .

Пример 1.2. Уточнить методом половинного деления с точностью до 0,01 корень уравнения $\sin 5x + x^2 - 1 = 0$, принадлежащий отрезку $[-1; 0]$.

Реализация метода половинного деления в программе Excel такова (рис. 1.2).

	A	B	C	D	E	F
1	a	-1				
2	b	0				
3						
4	k	a	b	x	f(a)f(x)	b-a
5	1	=B1	=B2	=(B6+C6)/2	=SIN(5*D6)+(D6^2)-1	=ABS(C6-B6)
6	2	=ЕСЛИ(E6>0; D6; B6)	=ЕСЛИ(E6<0; D6; C6)	=(B7+C7)/2	=SIN(5*D7)+(D7^2)-1	=ABS(C7-B7)

Рис. 1.2. Решение в программе Excel

Необходимо заполнить ячейки с A5 до F5 и с A6 до F6. Далее выделить диапазон от A6 до F6, подвести указатель к левому нижнему углу диапазона и, удерживая левую кнопку мыши, протянуть на несколько строк вниз. Результат вычислений приведен на рис. 1.3.

	A	B	C	D	E	F
1	a	0				
2	b	1				
3						
4	k	a	b	x	f(a)f(x)	b-a
5		-1	0	-0,5	-1,34847	1
6		-1	-0,5	-0,75	0,134061	0,5
7		-0,75	-0,5	-0,625	-0,62597	0,25
8		-0,75	-0,625	-0,6875	-0,23574	0,125
9		-0,75	-0,6875	-0,71875	-0,04649	0,0625
10		-0,75	-0,71875	-0,73438	0,045084	0,03125
11		-0,734375	-0,71875	-0,72656	-0,00041	0,015625
12		-0,734375	-0,72656	-0,73047	0,022417	0,007813

Рис. 1.3. Решение в программе Excel

В ячейке F11 длина интервала составляет $0,007813 < \varepsilon = 0,01$, значит процесс уточнения корня можно прекратить и корень равен $x \approx -0,73$.

Для реализации метода половинного деления в среде MathCAD можно использовать программу, текст которой представлен ниже.

```

biseq(f,a,b,ε) :=
| fa ← f(a)
| while b - a > ε
|   | x ← (a + b) / 2
|   | fx ← f(x)
|   | break if fx = 0
|   | b ← x if fa · fx < 0
|   | a ← x otherwise
| x

```

Решение примера 1.2 будет иметь вид.

$f(x) := \sin(5 \cdot x) + x^2 - 1$ 'Уравнение как функция пользователя

$a := -1$ 'Левая граница интервала

$b := 0$ 'Правая граница интервала

$\varepsilon := 0.01$ 'Погрешность уточнения корня

$\text{biseq}(f, a, b, \varepsilon) = -0.727$ 'Уточненное значение корня трансцендентного уравнения

1.2.2. Метод простых итераций

Для уравнения $f(x)=0$ метод простых итераций состоит в следующем.

1) Исходное уравнение преобразуется к виду

$$x = \varphi(x). \quad (1.2)$$

2) Выбирается исходное приближение x_0 (один из концов интервала $[a; b]$ или точка внутри него) и вычисляются последующие приближения по итерационной формуле

$$\begin{aligned} x_k &= \varphi(x_{k-1}), \\ k &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.3)$$

3) Итерационный процесс завершается, когда будет выполнено условие

$$|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon.$$

Графическая интерпретация способа представлена на рис. 1.2.

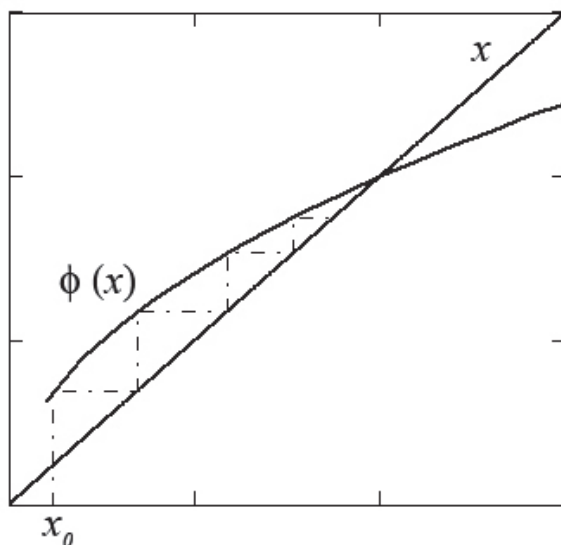


Рис. 1.2. Метод простых итераций

Преобразование функции $f(x)$ к функции $\varphi(x)$ может быть различным. При выборе вида функции $\varphi(x)$ следует руководствоваться следующими условиями:

- 1) Корень уравнения $x = \varphi(x)$ принадлежит отрезку $[a; b]$.
- 2) Все значения функции $\varphi(x)$ принадлежат отрезку $[a; b]$.
- 3) Для всех значений x , принадлежащих отрезку $[a; b]$, $|\varphi'(x)| < 1$.

При выполнении этих условий итерационная последовательность сходится при любом $x_0 \in [a; b]$. Различают три вида сходимости:

- 1) $|\varphi'(x)| < 0,1$ – хорошая сходимость;
- 2) $|\varphi'(x)| < 0,5$ – удовлетворительная сходимость;
- 3) $|\varphi'(x)| < 1,0$ – плохая сходимость.

Пример 1.3. Методом простых итераций решить уравнение $\lg x - x^2 + 3 = 0$ с точностью до 0,001 на интервале $[1,5; 2]$.

В соответствии с уравнением (1.2) можно преобразовать исходную функцию к видам:

а) $x = \sqrt{\lg x + 3} = \varphi(x);$

б) $x = \frac{\lg x + 3}{x} = \varphi(x);$

в) $x = 10^{x^2-3} = \varphi(x).$

Проверим выполнение условий сходимости.

ORIGIN := 1

$f(x) := \lg(x) - x^2 + 3$

' Исходное уравнение

$\phi 1(x) := \sqrt{\lg(x) + 3}$

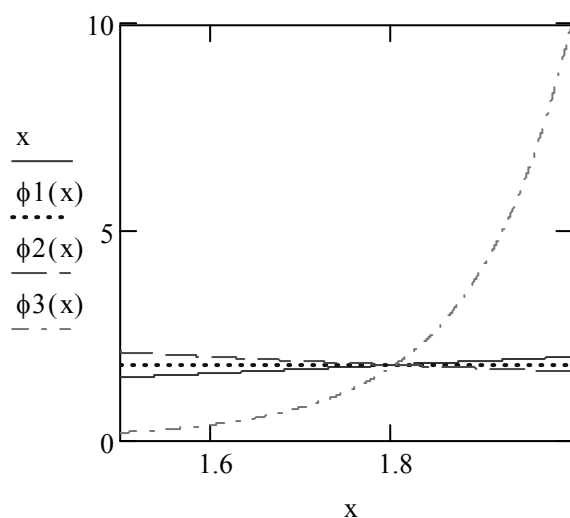
$\phi 2(x) := \frac{\lg(x) + 3}{x}$

' Преобразованные уравнения

$\phi 3(x) := 10^{x^2-3}$

a := 1.5 b := 2

' Интервал поиска корня



Видно, что точка пересечения линии $y = x$ и графиков функций $\varphi_i(x)$ лежит в пределах интервала $[1,5; 2]$, значит первое условие выполнено.

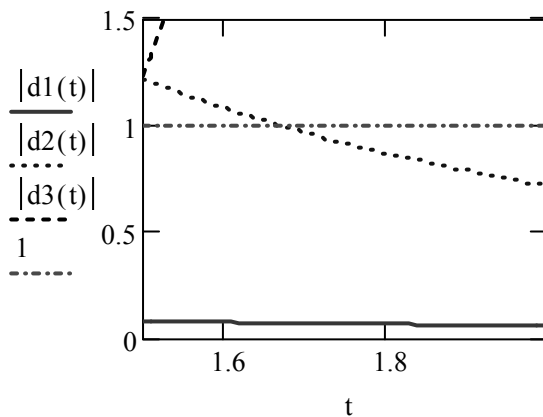
$$d1(t) := \frac{d}{dt} \phi 1(t)$$

$$d2(t) := \frac{d}{dt} \phi 2(t)$$

' Уравнения для производных

$$d3(t) := \frac{d}{dt} \phi 3(t)$$

$$t := 1.5, 1.51 \dots 2$$



Отсюда видно, что для преобразования a абсолютное значение производной на всем отрезке $[1,5; 2]$ меньше единицы, а для преобразований b и c это условие не выполняется.

Для уточнения корня уравнения методом простых итераций выберем преобразование $a) x = \sqrt{\lg x + 3}$.

Текст программы для метода простых итераций:

$$\text{iter}(\phi, x_0, \varepsilon) := \left| \begin{array}{l} x_1 \leftarrow \phi(x_0) \\ \text{while } |x_1 - x_0| > \varepsilon \\ \quad \left| \begin{array}{l} x_0 \leftarrow x_1 \\ x_1 \leftarrow \phi(x_0) \end{array} \right. \\ x_1 \end{array} \right.$$

$\varepsilon := 0.001$

' Точность определения корня

$x_0 := 2$

' Начальное приближение

$\text{iter}(\phi_2, x_0, \varepsilon) = 1.805$

' Уточненное значение корня

1.2.3. Метод хорд

Метод хорд заключается в замене кривой $y = f(x)$ отрезком прямой, проходящей через точки $[a; f(a)]$ и $[b; f(b)]$. Абсцисса точки пересечения прямой с осью OX принимается за очередное приближение (рис. 1.3).

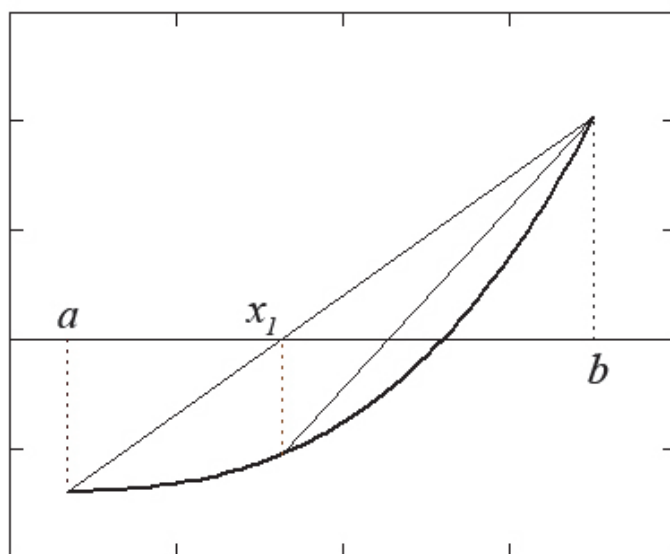


Рис. 1.3. Метод хорд

Расчетная формула для определения нового приближения корня имеет вид

$$x_k = a - \frac{f(a)(b - a)}{f(b) - f(a)}. \quad (1.4)$$

После каждой итерации длина отрезка, на котором производится уточнение корня, уменьшается, причем оставляется та его часть, на концах которой функция имеет разные знаки.

Алгоритм метода хорд таков:

- 1) Пусть $k = 0$.
- 2) Следующий номер итерации $k = k + 1$. Очередное приближение корня определяется по формуле (1.4). Далее вычисляется $f(x_k)$.
- 3) Если $f(x_k) = 0$, то перейти к п. 5. Если $f(x_k)f(b) > 0$, то $b = x_k$, иначе $a = x_k$.

4) Если $|x_k - x_{k-1}| > \varepsilon$, то перейти к п. 2.

5) Вывести значение корня x_k .

Для реализации метода хорд в среде MathCAD можно использовать программу, текст которой представлен ниже.

```
hord(f,a,b,ε) := | x0 ← a
                  | x1 ← b
                  | while |x1 - x0| > ε
                  |   | x0 ← x1
                  |   | x1 ← a - f(a) · (b - a) / (f(b) - f(a))
                  |   | fx1 ← f(x1)
                  |   | break if fx1 = 0
                  |   | b ← x1 if fx1 · f(b) > 0
                  |   | a ← x1 otherwise
                  | x1
```

Пример 1.4. Уточнить корень уравнения $x^3 - 2x^2 + 3x - 5 = 0$ на отрезке $[1,8; 1,9]$ с точностью 0,005.

$$f(x) := x^3 - 2 \cdot x^2 + 3 \cdot x - 5$$

'Уравнение как функция пользователя

$$a := 1.8$$

'Левая граница интервала

$$b := 1.9$$

'Правая граница интервала

$$\varepsilon := 0.005$$

'Погрешность уточнения корня

$$\text{hord}(f,a,b,\varepsilon) = 1.844$$

'Уточненное значение корня трансцендентного уравнения

1.2.4. Метод секущих

В основе метода касательных Ньютона лежит уточнение корня за счет принятия в качестве каждого нового приближения точки пересечения с осью абсцисс касательной, проведенной к графику функции в точке предыдущего приближения. Для построения касательной необходимо вычислять производную функции в данной точке. Метод секущих является производным от метода касательных путем замены производной на приближенную разностную формулу.

Алгоритм метода секущих таков:

1) Задать начальное приближение x_0 и погрешность ε . Вычислить

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)\varepsilon}{f(x_0 + \varepsilon) - f(x_0)}.$$

2) Для $n = 1, 2, \dots$, пока выполняется условие $|x_n - x_{n-1}| > \varepsilon$, вычислять x_{n+1} по формуле

$$x_{n+1} = \frac{f(x_n)x_{n-1} - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Для реализации метода секущих в среде MathCAD можно использовать программу, текст которой представлен ниже

$$\text{secant}(f, x0, \varepsilon) := \left| \begin{array}{l} x1 \leftarrow x0 - \frac{f(x0) \cdot \varepsilon}{f(x0 + \varepsilon) - f(x0)} \\ x2 \leftarrow \frac{f(x1) \cdot x0 - f(x0) \cdot x1}{f(x1) - f(x0)} \\ x0 \leftarrow x1 \\ x1 \leftarrow x2 \\ \text{while } |x1 - x0| > \varepsilon \\ \quad \left| \begin{array}{l} x2 \leftarrow \frac{f(x1) \cdot x0 - f(x0) \cdot x1}{f(x1) - f(x0)} \\ x0 \leftarrow x1 \\ x1 \leftarrow x2 \end{array} \right. \\ x2 \end{array} \right.$$

Пример 1.5. Уточнить методом хорд точностью до 0,001 корень уравнения $\sin 5x + x^2 - 1 = 0$, принадлежащий отрезку $[-1; 0]$.

При использовании этого метода необходимо самостоятельно задавать первое приближение, причем это приближение должно быть достаточно близким к предполагаемому значению корня, исходя из результатов этапа отделения (локализации) корней.

$f(x) := \sin(5 \cdot x) + x^2 - 1$ "Уравнение как функция пользователя"

$x0 := -0.7$ "Начальное приближение"

$\varepsilon := 0.001$ "Погрешность уточнения корня"

$\text{secant}(f, x0, \varepsilon) = -0.727$ "Уточненное значение корня трансцендентного уравнения"

Другим способом реализации метода секущих является использование встроенной функции MathCAD – *root*.

Синтаксис функции *root* имеет вид

$$\text{root}(f(x), x, a, b),$$

где $f(x)$ – функция пользователя;

x – переменная, по которой производится решение уравнения;

a, b – границы интервала, на котором решается уравнение.

С применением функции *root* решение будет выглядеть следующим образом:

$f(x) := \sin(5 \cdot x) + x^2 - 1$	'Уравнение как функция пользователя
$a := -1$	'Левая граница интервала
$b := 0$	'Правая граница интервала
$\text{root}(f(x), x, a, b) = -0.727$	'Уточненное значение корня трансцендентного уравнения

1.2.5. Вычислительный блок *Given/Find*

Для численного решения уравнений в среде MathCAD применяется вычислительный блок *Given/Find*, состоящий из ключевого слова *Find*, самого уравнения, записанного при помощи логических операторов панели **Boolean (Булевы операторы)**, а также встроенной функции *Find*.

Перед вычислительным блоком *Given/Find* должны быть заданы начальные значения всех неизвестных. Начальное значение переменной необходимо задавать, ориентируясь на информацию о локализации корней.

Пример 1.6. Уточнить с помощью вычислительного блока *Given/Find* корень уравнения $\sin 5x + x^2 - 1 = 0$, принадлежащий отрезку $[-1; 0]$.

$x := -1$	'Начальное значение искомой переменной
<i>Given</i>	'Ключевое слово
$\sin(5 \cdot x) + x^2 - 1 = 0$	'Решаемое уравнение
<i>Find</i> (x) = -0.727	'Решение уравнения

1.3. Задания к лабораторной работе 1

1) Графическим способом локализовать корни уравнения на интервале длиной не более 0,1.

2) Для каждого интервала проверить условие применимости метода простых итераций.

3) Уточнить любой из корней на интервале длиной не более 0,1 всеми методами с точностью до 0,001.

4) Ответить на контрольные вопросы.

Варианты заданий приведены в табл. 1.1.

Таблица 1.1

Задания к лабораторной работе 1

Вариант	Уравнение	Вариант	Уравнение
1	$\cos 3x - x^3 = 0$	11	$x^{\frac{1}{3}} + 2\operatorname{tg} x = 1$
2	$\operatorname{tg} x + x = 1$	12	$e^{2x} \cdot \operatorname{tg} x - x = 1$
3	$\sin(e^x) + 3x = 0$	13	$x^5 - 2\cos x = 0$
4	$\operatorname{tg}^2 x + x = 1$	14	$\cos^2 x - x^4 = 0$
5	$xe^{-x} + 3x - 5 = 0$	15	$\ln(1 + x^2) - x^3 = 1$
6	$3^{3-x} - \cos x = 0$	16	$\frac{\sin x}{e^x} + x^2 - 1 = 0$
7	$e^{-\cos x} - x^3 = 0$	17	$\frac{x}{1 + x^4} = \ln x$
8	$x^4 - \sin^2 x + x - 1 = 0$	18	$x^5 - 2\cos x + 1 = 0$
9	$e^x(x - 5) + 3 = 0$	19	$e^{-\sin x} + 3x = 0$
10	$e^{2x} \cdot \ln x - x = 0$	20	$(7 - x^2)\ln x = 2 - x$

1.4. Контрольные вопросы

1) В чем состоит отличие алгебраического уравнения от трансцендентного?

2) В чем состоят сущность и физический смысл процедуры локализации корней?

3) Обладает ли метод половинного деления гарантированной сходимостью?

4) К какому виду нужно преобразовать уравнение в методе итераций?

5) Можно ли воспользоваться методом итераций при невыполнении условия сходимости?

2. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Система n нелинейных уравнений с n неизвестными имеет вид

$$f_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ 1 \leq k \leq n.$$

Решить систему нелинейных уравнений – значит найти такую совокупность значений x_i , $i = 1, 2, \dots, n$, которая удовлетворяет всем уравнениям системы.

2.1. Графический метод

Система двух нелинейных уравнений

$$\begin{cases} f_1(x, y) = 0, \\ f_2(x, y) = 0, \end{cases}$$

может быть приближенно решена графически. Для этого необходимо привести её к виду

$$\begin{cases} y = y_1(x), \\ y = y_2(x), \end{cases}$$

построить графики функций $y = y_1(x)$, $y = y_2(x)$ и найти координаты пересечения точек графиков.

Пример 2.1. Решить графически систему уравнений

$$\begin{cases} x - y^2 = 0, \\ \cos x - y = 0. \end{cases}$$

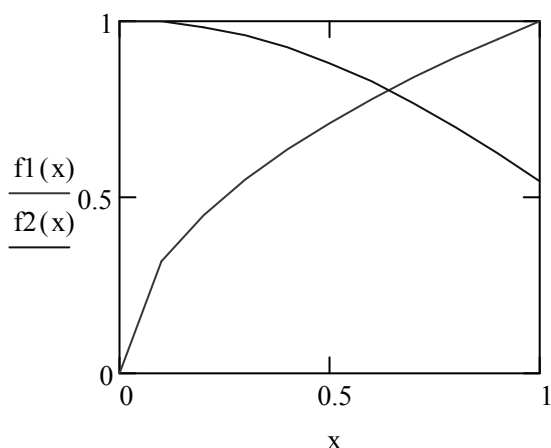
Преобразуем систему

$$\begin{cases} y = \sqrt{x}, \\ y = \cos x. \end{cases}$$

f1(x) := $\sqrt{x}$ 'Первое уравнение системы

f2(x) := $\cos(x)$ 'Второе уравнение системы

x := 0, 0.1 .. 1 'Изменение аргумента



Варьируя изменение аргумента, получаем графическое изображение точки пересечения графиков функций.

Используя инструмент *Trace* на панели **Graph**, определим координаты точки пересечения:

- 1) Выделить график, щелкнув на любой его области левой кнопкой мыши.
- 2) На панели **Graph** нажать кнопку *Trace* (с изображением карандаша).
- 3) В открывшемся окне **X-Y Trace** снять галочку в окошке *Track data points*.
- 4) Подвести на графике перекрестье пунктирных линий к точке пересечения графиков функций, в окошке *X-Value* отобразится значение абсциссы точки пересечения, а в окошке *Y-Value* – ординаты точки пересечения.
- 5) С помощью кнопок *Copy X*, *Copy Y* можно скопировать значения в буфер обмена (рис. 2.1).

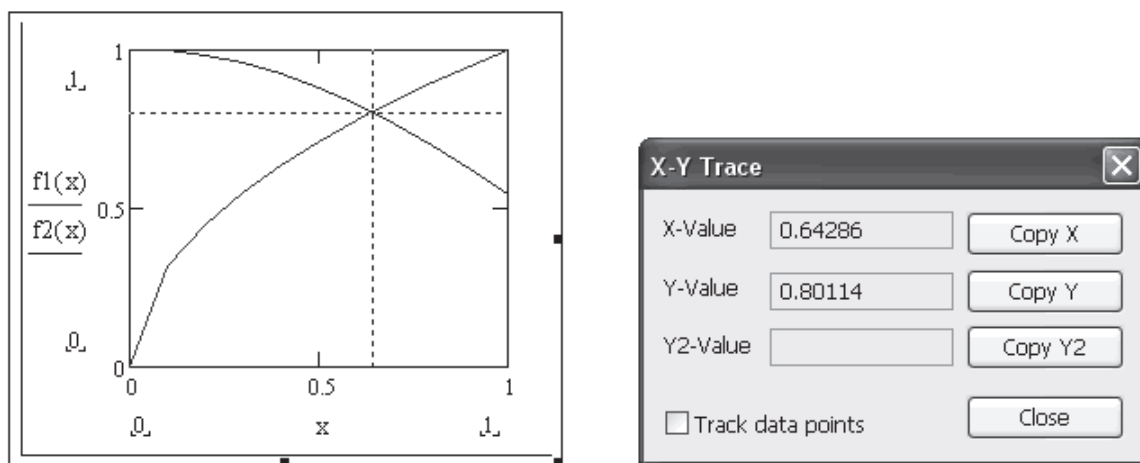


Рис. 2.1. Инструмент Trace

2.2. Метод Ньютона-Рафсона

Одним из ключевых понятий этого метода является *матрица Якоби*. Пусть имеется система функций $f_i(x_1, \dots, x_n)$, $i = 1, \dots, m$, имеющих в некоторой точке x все частные производные первого порядка. Матрица J , составленная из частных производных этих функций в точке x , называется *матрицей Якоби* данной системы

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Пусть для системы нелинейных уравнений $f_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$, $1 \leq k \leq m$, в некоторой ε -окрестности точного решения не равен нулю определитель матрицы Якоби (якобиан), т.е.

$$|J| \neq 0. \quad (2.1)$$

Тогда существует начальное приближение

$$\bar{x}^0 = \begin{pmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ \dots \\ x_n^0 \end{pmatrix},$$

принадлежащее ε -окрестности точного решения, что метод сходится к точному решению.

Уравнение для определения очередного приближения имеет вид

$$\bar{x}^{k+1} = \bar{x}^k - J^{-1}(\bar{x}^k) \cdot f(\bar{x}^k), \quad (2.2)$$

где $\bar{x}^{k+1} = \begin{pmatrix} x_1^{k+1} \\ x_2^{k+1} \\ \dots \\ x_n^{k+1} \end{pmatrix}$ – вектор значений очередных приближений; $J^{-1}(\bar{x}^k)$ – об-

ратная матрица Якоби; $f(\bar{x}^k)$ – вектор значений функций при данных приближениях.

В качестве критерия окончания решения используется условие:

$$\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{k+1} - x_i^k| \leq \varepsilon. \quad (2.3)$$

Алгоритм метода Ньютона-Рафсона таков:

- 1) Выбирается вектор начальных приближений $\bar{x}^0$.
- 2) Вычисляется матрица Якоби J и якобиан $|J|$ (2.1).
- 3) Вычисляется обратная матрица Якоби J^{-1} .
- 4) Вычисляется вектор очередных приближений по формуле (2.2).
- 5) Выполняется проверка условия (2.3).

Пример 2.2. Методом Ньютона-Рафсона решить систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} x^3 + y - 4 = 0, \\ x + y^3 - 28 = 0 \end{cases}$$

с точностью 0,001 при заданном векторе начальных приближений $\bar{x}^0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$.

ORIGIN := 1

f1(x,y) := $x^3 + y - 4$ ' Система уравнений

f2(x,y) := $x + y^3 - 28$

D := $\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ ' Вектор начальных приближений

B(x,y) := $\begin{pmatrix} f1(x,y) \\ f2(x,y) \end{pmatrix}$

J(x,y) := $\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} B(x,y)_1 & \frac{\partial}{\partial y} B(x,y)_1 \\ \frac{\partial}{\partial x} B(x,y)_2 & \frac{\partial}{\partial y} B(x,y)_2 \end{pmatrix}$ ' Матрица Якоби

NewtRaf(D,ε) := $\begin{cases} C \leftarrow D - J(D_1, D_2)^{-1} \cdot B(D_1, D_2) \\ \text{while } |C_1 - D_1| > \varepsilon \vee |C_2 - D_2| > \varepsilon \\ \quad \begin{cases} D \leftarrow C \\ C \leftarrow D - J(D_1, D_2)^{-1} \cdot B(D_1, D_2) \end{cases} \end{cases}$

NewtRaf(D, 0.001) = $\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$

Таким образом, решение системы уравнений $x = 1, y = 3$.

2.3. Вычислительный блок Given/Find

Для получения решения необходимо выбрать начальное приближение из ближайшей окрестности решения системы уравнений (так называемой ε -окрестности). Сделать это можно графическим методом, как указывалось выше.

Пример 2.3. Решить систему уравнений

$$\begin{cases} x - y^2 = 0, \\ \cos x - y = 0. \end{cases}$$

Используя график из предыдущего примера, примем начальные приближения $x = 0,6$, $y = 0,8$.

ORIGIN := 1

$f1(x, y) := x - y^2$ 'Первое уравнение системы

$f2(x, y) := \cos(x) - y$ 'Второе уравнение системы

$x := 0.6$ $y := 0.8$ 'Начальные приближения

Given 'Ключевое слово

$f1(x, y) = 0$

$f2(x, y) = 0$

$z := \text{Find}(x, y)$ 'Функция Find

$z = \begin{pmatrix} 0.642 \\ 0.801 \end{pmatrix}$ 'Вектор, содержащий решение системы

$x := z_1$ $x = 0.642$ 'Значение переменной x

$y := z_2$ $y = 0.801$ 'Значение переменной y

$f1(x, y) = 1.616 \times 10^{-10}$ 'Проверка правильности решения

$f2(x, y) = -7.031 \times 10^{-11}$

2.4. Функция Minimize

Решение системы уравнений

$$\begin{cases} f_1(x, y) = 0, \\ f_2(x, y) = 0 \end{cases}$$

можно свести к решению эквивалентной задачи – поиску минимума функции

$$f(x, y) = [f_1(x, y)]^2 + [f_2(x, y)]^2.$$

Функция *Minimize* позволяет найти точку минимума. Для поиска минимума в среде MathCAD необходимо векторно представить аргумент функции, т.е. заменить x на x_1 , а y – на x_2

$$f(x) = [f_1(x_1, x_2)]^2 + [f_2(x_1, x_2)]^2.$$

Пример 2.4. Решить систему уравнений

$$\begin{cases} x - y^2 = 0, \\ \cos x - y = 0. \end{cases}$$

Используя график из примера 2.1, примем начальные приближения $x = 0,6$, $y = 0,8$.

ORIGIN := 1

$f(x) := [x_1 - (x_2)^2]^2 + (\cos(x_1) - x_2)^2$ 'Функция, подлежащая минимизации

$x := \begin{pmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{pmatrix}$ 'Начальные приближения

$x := \text{Minimize}(f, x)$ 'Функция минимизации

$x = \begin{pmatrix} 0.642 \\ 0.801 \end{pmatrix}$ 'Решение системы

$f(x) = 0$ 'Проверка правильности решения

2.5. Задания к лабораторной работе 2

- 1) Решить систему нелинейных уравнений графически.
- 2) Уточнить корни системы нелинейных уравнений методом Ньютона-Рафсона с точностью до 0,001.

3) Решить систему нелинейных уравнений встроенными средствами MathCAD.

4) Ответить на контрольные вопросы.

Варианты заданий приведены в табл. 2.1.

Таблица 2.1

Задания к лабораторной работе 2

Вариант	Уравнение	Вариант	Уравнение
1	$\begin{cases} x^2 + \cos y = 1, \\ y - \operatorname{tg} x = 1. \end{cases}$	11	$\begin{cases} \frac{1}{y} + \ln 2x = 3, \\ 2 \sin x - y^{0,5} = 1. \end{cases}$
2	$\begin{cases} x^2 + y^2 = 1, \\ x - \operatorname{tg} y = 0. \end{cases}$	12	$\begin{cases} (\log_5 x + y)^2 = 1, \\ \sqrt[3]{y} + 2e^x = 8. \end{cases}$
3	$\begin{cases} x^2 - \cos y = 1, \\ y - \lg x = 1. \end{cases}$	13	$\begin{cases} y^2 - \sin 2x = 3, \\ (x + y)^6 \ln x = 0. \end{cases}$
4	$\begin{cases} x^2 = \sin y, \\ y = \operatorname{ctg} x. \end{cases}$	14	$\begin{cases} y(1 - 2x^2) + x^3 = 1, \\ ye^x + 2 = \lg x. \end{cases}$
5	$\begin{cases} x^2 + \log_2 y = 1, \\ y - \ln x = 1. \end{cases}$	15	$\begin{cases} \sqrt{x+1} + y^3 = \sin x, \\ \frac{1}{e^y} - \sqrt{x} = e^x. \end{cases}$
6	$\begin{cases} (1 + x^2) \cos y = 1, \\ y + \lg x = 1. \end{cases}$	16	$\begin{cases} 2 \operatorname{tg} x + e^y = 2, \\ \ln x^2 + y^2 = 1. \end{cases}$
7	$\begin{cases} (1 - x^2)y = 1, \\ y + e^x = 1. \end{cases}$	17	$\begin{cases} \arccos x - \log_2 y = 1, \\ 2e^{2x} - \frac{1}{e^y} = 1. \end{cases}$
8	$\begin{cases} \sin x^2 + y = 1, \\ y^2 - \ln x = 1. \end{cases}$	18	$\begin{cases} (1 - y^2) \sin x = \cos x, \\ \ln x + \ln y = 2. \end{cases}$
9	$\begin{cases} x^2 + y = 1, \\ 2y \cdot e^x = 1. \end{cases}$	19	$\begin{cases} 1 - \sqrt{x - y^2} = 0, \\ \cos x + e^{-y} = 1. \end{cases}$
10	$\begin{cases} e^{-x} + y = 2, \\ x - e^{y-2} = 0. \end{cases}$	20	$\begin{cases} y^{0,5} - x \cos x^2 = 2, \\ \sin y + \ln x = 1. \end{cases}$

2.6. Контрольные вопросы

- 1) В чем состоит суть графического метода решения систем нелинейных уравнений?
- 2) Дайте определение матрицы Якоби и якобиана.
- 3) Назовите и дайте описание способов вычисления определителей матрицы.
- 4) Что такое обратная матрица и как она вычисляется?

3. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Задачей интерполяции является поиск функции $F(x)$, значения которой в узлах интерполяции совпадают со значениями интерполируемой функции $f(x)$. Графически решение задачи интерполяции заключается в построении интерполирующей функции, проходящей через все узлы интерполяции.

Узлами интерполяции называются точки x_i , в которых известны значения функции $f(x)$.

В расчетной практике с интерполяцией приходится сталкиваться:

- при работе с табличными данными;
- получении аналитического представления экспериментальных данных;
- замене сложной функции более простой;
- приближенном дифференцировании и интегрировании;
- численном решении дифференциальных уравнений.

3.1. Интерполяционный многочлен Лагранжа

Пусть дана система точек $x_0, x_1, \dots, x_n$, принадлежащих некоторому отрезку $[a; b]$, и известны соответствующие значения функции $y_i = f(x_i)$. Требуется построить многочлен $L_n(x)$, имеющий в заданных узлах те же значения, что и функция $f(x_i)$, т.е. удовлетворяющий условиям $L_n(x_i) = y_i$.

Решение такой задачи реализуется в виде

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n p_i(x) f(x_i), \quad (3.1)$$

где

$$p_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}.$$

Если принять, что

$$\prod_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n),$$

$$D_i = (x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n),$$

то формула Лагранжа примет вид

$$L_n(x) = \prod_{n+1}(x) \sum_{i=0}^n \frac{y_i}{D_i}. \quad (3.2)$$

Интерполяционный многочлен Лагранжа можно использовать как при равномерном расположении узлов интерполяции, так и при неравномерном.

Вычисления по формуле Лагранжа удобно проводить с использованием таблицы, составляемой по определенным правилам (табл. 3.1)

Заполнение таблицы начинается с заполнения диагонали, вычисляя тем самым сомножители произведения $\prod_{n+1}(x)$. Далее построчно вычисляются сомножители произведений D_i . Заполняются ячейки над и под диагональю путем вычитания из аргумента с индексом, равным i для данной строки, аргумента с индексом, равным цифре, стоящей в заголовке столбца. В столбец D_i вносятся построчные произведения из сомножителей в столбцах с 0 по 5. В последнем столбце делится соответственно значение функции в данном узле интерполяции на произведение D_i . Суммируются значения частных.

Таблица 3.1

Таблица к формуле Лагранжа

i	x_i	y_i	0	1	2	3	4	D_i	y_i/D_i
0	2	4	$x - x_0$	$x_0 - x_1$	$x_0 - x_2$	$x_0 - x_3$	$x_0 - x_4$	D_0	y_0/D_0
1	2,5	5	$x_1 - x_0$	$x - x_1$	$x_1 - x_2$	$x_1 - x_3$	$x_1 - x_4$	D_1	y_1/D_1
2	3	5,5	$x_2 - x_0$	$x_2 - x_1$	$x - x_2$	$x_2 - x_3$	$x_2 - x_4$	D_2	y_2/D_2
3	3,5	5,7	$x_3 - x_0$	$x_3 - x_1$	$x_3 - x_2$	$x - x_3$	$x_3 - x_4$	D_3	y_3/D_3
4	4	5,8	$x_4 - x_0$	$x_4 - x_1$	$x_4 - x_2$	$x_4 - x_3$	$x - x_4$	D_4	y_4/D_4
	$\prod_{n+1}(x) =$								$\sum y_i/D_i$

Результат интерполяции вычисляется как произведение

$$f(x) = \prod_{n+1}(x) \cdot \sum y_i/D_i.$$

Для реализации процесса составления такой таблицы в среде MathCAD предлагается следующая программа:

$\text{Lagr}(x, y, x_0) :=$

$\text{Lagr}(x, y, x_0) :=$	for $i \in 1 \dots \text{rows}(x)$ $a_{i,1} \leftarrow i - 1$ $a^{\langle 2 \rangle} \leftarrow x$ $a^{\langle 3 \rangle} \leftarrow y$ for $i \in 1 \dots \text{rows}(x)$ $a_{i,i+3} \leftarrow x_0 - x_i$ $n \leftarrow 2$ for $j \in 4 \dots \text{rows}(x) + 2$ <table border="0" style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;"> <tr> <td style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;">for $i \in n \dots \text{rows}(x)$</td> <td style="padding-left: 10px;">$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n-1}$</td> </tr> <tr> <td style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;">$n \leftarrow n + 1$</td> <td></td> </tr> </table> $n \leftarrow 1$ for $j \in 5 \dots \text{rows}(x) + 3$ <table border="0" style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;"> <tr> <td style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;">for $i \in 1 \dots n$</td> <td style="padding-left: 10px;">$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n+1}$</td> </tr> <tr> <td style="border-left: 1px solid black; padding-left: 10px;">$n \leftarrow n + 1$</td> <td></td> </tr> </table> $a_{\text{rows}(x)+1, \text{rows}(x)+3} \leftarrow \prod_{i=1}^{\text{rows}(x)} a_{i,i+3}$ for $i \in 1 \dots \text{rows}(x)$ $a_{i, \text{rows}(x)+4} \leftarrow \prod_{j=4}^{\text{rows}(x)+3} a_{i,j}$ for $i \in 1 \dots \text{rows}(x)$ $a_{i, \text{rows}(x)+5} \leftarrow \frac{y_i}{a_{i, \text{rows}(x)+4}}$ $a_{\text{rows}(x)+1, \text{rows}(x)+5} \leftarrow \sum a^{\langle \text{rows}(x)+5 \rangle}$ $a_{\text{rows}(x)+2, \text{rows}(x)+5} \leftarrow a_{\text{rows}(x)+1, \text{rows}(x)+3} \cdot a_{\text{rows}(x)+1, \text{rows}(x)+5}$ a	for $i \in n \dots \text{rows}(x)$	$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n-1}$	$n \leftarrow n + 1$		for $i \in 1 \dots n$	$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n+1}$	$n \leftarrow n + 1$	
for $i \in n \dots \text{rows}(x)$	$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n-1}$								
$n \leftarrow n + 1$									
for $i \in 1 \dots n$	$a_{i,j} \leftarrow x_i - x_{n+1}$								
$n \leftarrow n + 1$									

Пример 3.1. Вычислить значение функции, заданной таблично, в точке $x = 2,3$ с помощью интерполяционной формулы Лагранжа.

i	0	1	2	3	4
x_i	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0
y_i	4	5	5,5	5,7	5,8

$x := (2.0 \ 2.5 \ 3.0 \ 3.5 \ 4.0)^T$ 'Узлы интерполяции

$y := (4 \ 5 \ 5.5 \ 5.7 \ 5.8)^T$ 'Значения функции в узлах интерполяции

$x0 := 2.3$ 'Точка, в которой производится интерполяция

Lagr(x,y,x0) =

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	2	4	0.3	-0.5	-1	-1.5	-2	0.45	8.889
2	1	2.5	5	0.5	-0.2	-0.5	-1	-1.5	0.075	66.667
3	2	3	5.5	1	0.5	-0.7	-0.5	-1	-0.175	-31.429
4	3	3.5	5.7	1.5	1	0.5	-1.2	-0.5	0.45	12.667
5	4	4	5.8	2	1.5	1	0.5	-1.7	-2.55	-2.275
6	0	0	0	0	0	0	0	0.086	0	54.519
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4.671

В правой нижней ячейке помещено интерполированное значение функции, при $x = 2,3$ оно равно 4,671.

3.2. Линейная интерполяция

Это самый простой вид интерполяции, представляющий искомую зависимость $A(x)$ в виде ломаной линии, соединяющей узлы интерполяции отрезками прямой.

Для построения линейной интерполяции служит встроенная функция *linterp*. Её синтаксис выглядит следующим образом:

$$linterp(x,y,t),$$

где x – вектор действительных данных аргумента;

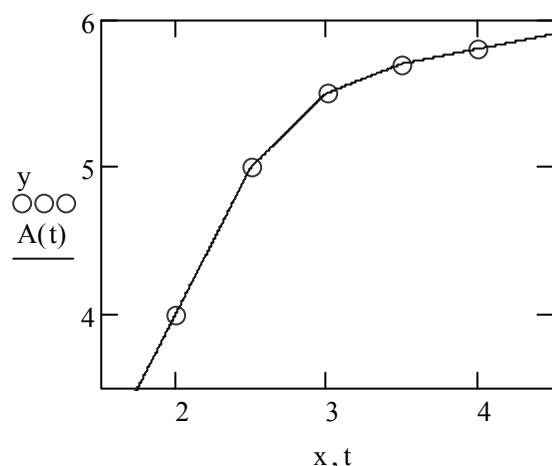
y – вектор действительных данных значений функции при соответствующих значениях аргумента;

t – точка, в которой вычисляется значение интерполирующей функции.

Важным замечанием является то, что элементы вектора x должны быть расположены в порядке возрастания.

Пример 3.2. Вычислить значение функции из примера 3.1 в точке $x = 2,3$ с помощью функции линейной интерполяции.

$x := (2.0 \ 2.5 \ 3.0 \ 3.5 \ 4.0)^T$	'Узлы интерполяции
$y := (4 \ 5 \ 5.5 \ 5.7 \ 5.8)^T$	'Значения функции в узлах интерполяции
$x0 := 2.3$	'Точка, в которой производится интерполяция
$A(t) := \text{linterp}(x, y, t)$	'Задание функции интерполяции
$A(x0) = 4.6$	'Значение функции в заданной точке



3.3. Сплайн-интерполяция

В большинстве практических случаев желательно соединить экспериментальные точки не ломаной линией, а гладкой кривой. Для этих целей используется сплайн-интерполяция.

Сплайн – гладкая кривая, проходящая через заданные точки (x_i, y_i) . *Интерполяция сплайнами* заключается в том, что на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ используется многочлен определенной степени. Наиболее часто применяется многочлен третьей степени.

Интерполяция кубическими сплайнами представляет собой локальную интерполяцию, когда на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ применяется кубическая кривая, удовлетворяющая условиям непрерывности функции и её первой производной в узлах интерполяции.

Общий вид интерполяционного многочлена третьей степени таков

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \quad (3.3)$$

$$x_{i-1} \leq x \leq x_i,$$

$$i = 1, 2, \dots, n.$$

Алгоритм интерполяции с помощью кубического сплайна:

1) Исходные данные: значения функции $y_0, y_1, \dots, y_n$ в узлах $x_0, x_1, \dots, x_n$ ($x_0 < x_1 < \dots < x_n$).

2) Вычислить значения h_i и g_i :

$$h_i = x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.4)$$

$$g_i = 3 \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - 3 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.5)$$

3) Вычислить коэффициенты α_i и β_i :

$$\alpha_2 = \frac{-h_2}{2(h_1 + h_2)}, \quad (3.6)$$

$$\beta_2 = \frac{g_1}{2(h_1 + h_2)}. \quad (3.7)$$

$$\alpha_i = \frac{-h_i - \alpha_{i-1}h_{i-1}}{2(h_{i-1} + h_i)}, \quad i = 3, \dots, n-1, \quad (3.8)$$

$$\alpha_n = 0.$$

$$\beta_i = \frac{g_{i-1} - \beta_{i-1}h_{i-1}}{2(h_{i-1} + h_i)}, \quad i = 3, \dots, n. \quad (3.9)$$

4) Вычислить коэффициенты c_i :

$$c_{n+1} = 0,$$

$$c_i = \alpha_i c_{i+1} + \beta_i, \quad i = n, n-1, \dots, 2, \quad (3.10)$$

$$c_1 = 0.$$

5) Вычислить коэффициенты a_i, b_i, d_i :

$$a_i = y_{i-1}, \quad (3.11)$$

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}, \quad (3.12)$$

$$b_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - (2c_i + c_{i+1}) \frac{h_i}{3}, \quad (3.13)$$

$$i = 1, \dots, n.$$

6) Вычислить значение функции с помощью сплайна. Для этого необходимо найти такое значение i , что данное значение аргумента x принадлежит отрезку $[x_{i-1}, x_i]$ и вычислить

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3. \quad (3.14)$$

Пример 3.3. Построить кубический сплайн для функции $f(x) = \sin(\pi x)$ на отрезке $[0; 2]$, используя разбиение отрезка на 10 частей. Найти значение в точке $x = 0,48$.

Решим задачу с применением пакета Excel.

В диапазоне A1:M1 обозначим столбцы как показано на рис. 3.1.

В ячейках A2:A12 запишем значения индекса i от 0 до 10.

Так как шаг изменения аргумента $h = \frac{2}{10} = 0,2$, то в ячейку C3 запишем 0,2. Далее необходимо навести указатель мыши на правый нижний угол ячейки C3 для появления черного креста, нажать левую кнопку и, удерживая её, протянуть до ячейки C12.

В ячейку B2 запишем 0. В ячейку C3 введем формулу $=B2 + C3$. Затем аналогично предыдущему протянем до ячейки B12, заполнив таким образом столбец для аргумента x .

В ячейку D2 запишем формулу $=\text{SIN}(3,1415926*B2)$ и аналогично протянем до ячейки D12, заполнив столбец для значений функции y .

В соответствии с формулой (3.5) в ячейку E3 запишем $=3*(D4-D3)/C4 - 3*(D3-D2)/C3$. Протянем до ячейки E11.

Для вычисления коэффициентов прогонки в ячейку F4 запишем формулу (3.6) $=-C4/(2*(C3+C4))$, в ячейку F5 – формулу (3.8) $=(-C5-F4*C4)/(2*(C4+C5))$, протянем до ячейки F11, в ячейку F12 вносим 0.

В ячейку G4 запишем формулу (3.7) $=E3/(2*(C3+C4))$, в ячейку G5 – формулу (3.9) $=(E4-G4*C4)/(2*(C4+C5))$. Протянем до ячейки G12.

Вычислим коэффициенты c_i . В ячейку H13 запишем 0. В ячейку H12 запишем формулу (3.10) $=F12*H13+G12$. Протянем вверх до ячейки H4. В ячейку H3 запишем 0.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	i	x	h	y	g	α	β	c	a	b	d	$x-x(i-1)$	S(x)
2	0	0,000		0,000									
3	1	0,200	0,20	0,588	-3,37			0,000	0,000	3,139	-4,990		
4	2	0,400	0,20	0,951	-5,45	-0,25	-4,21	-2,994	0,588	2,540	-3,113		
5	3	0,600	0,20	0,951	-5,45	-0,19	-5,76	-4,862	0,951	0,967	0,128	0,080	0,997
6	4	0,800	0,20	0,588	-3,37	-0,20	-5,37	-4,785	0,951	-0,986	3,163		
7	5	1,000	0,20	0,000	0,00	-0,20	-2,87	-2,887	0,588	-2,561	4,985		
8	6	1,200	0,20	-0,588	3,37	-0,20	0,72	0,104	0,000	-3,157	4,929		
9	7	1,400	0,20	-0,951	5,45	-0,20	4,03	3,061	-0,588	-2,548	2,975		
10	8	1,600	0,20	-0,951	5,45	-0,20	5,80	4,846	-0,951	-0,965	-0,100		
11	9	1,800	0,20	-0,588	3,37	-0,20	5,36	4,787	-0,951	0,987	-3,195		
12	10	2,000	0,20	0,000		0,00	2,87	2,870	-0,588	2,556	-4,783		
13								0,000					

Рис. 3.1. Решение в программе Excel

Вычислим коэффициенты сплайна. В ячейку I3 запишем формулу (3.11) =D2. Протянем до ячейки I12.

В ячейку J3 запишем формулу (3.13) =(D3-D2)/C3-(2*H3+H4)*C3/3. Протянем до ячейки J12.

В ячейку K3 запишем формулу (3.12) =(H4-H3)/(3*C3). Протянем до ячейки K12.

Точка $x = 0,48$ попадает в интервал $[0,4; 0,6]$, следовательно нужно использовать строку с $i = 3$. Поэтому в ячейку L5 запишем формулу =0,48-B4. В ячейку M5 запишем формулу (3.14) =I5+J5*L5+H5*L5^2+K5*L5^3.

Получим значение 0,997. Точное значение $\sin(0,48\pi) = 0,998$.

Для сплайн-интерполяции используется встроенная функция *interp*, синтаксис которой имеет вид

$$\text{interp}(s,x,y,t),$$

где s – вектор вторых производных, созданный одной из сопутствующих функций *lspline*, *pspline*, *cspline*;

x – вектор действительных данных аргумента;

y – вектор действительных данных значений функции при соответствующих значениях аргумента;

t – точка, в которой вычисляется значение интерполирующей функции.

Векторная переменная s задается одной из трех функций:

1) *lspline*(x,y) – вектор значений коэффициентов линейного сплайна;

2) *pspline*(x,y) – вектор значений коэффициентов квадратичного сплайна;

3) *cspline*(x,y) – вектор коэффициентов кубического сплайна.

Пример 3.4. Вычислить значение функции, заданной таблично, в точке 3,5, используя все виды сплайн-интерполяции.

x_i	0	1	2	3	4	5	6
y_i	4,1	2,4	3,0	4,3	3,6	5,2	5,9

$x := (0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6)^T$ 'Узлы интерполяции

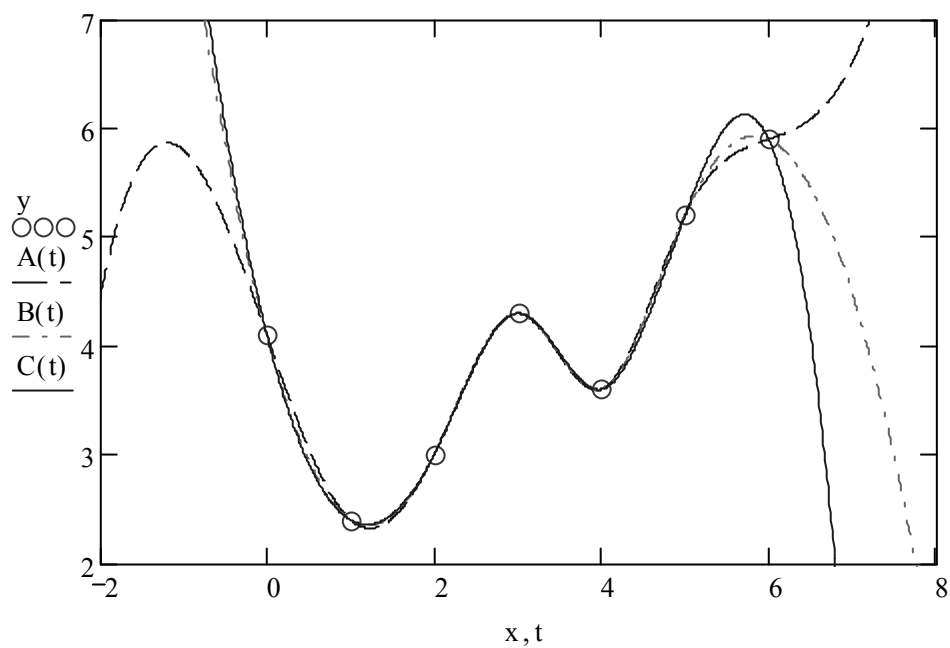
$y := (4.1 \ 2.4 \ 3 \ 4.3 \ 3.6 \ 5.2 \ 5.9)^T$ 'Значения функции в узлах

$x0 := 3.5$

$s1 := \text{lspline}(x, y)$ 'Для линейного сплайна

$s2 := \text{pspline}(x, y)$ 'Для квадратичного сплайна

$s3 := \text{cspline}(x, y)$	'Для кубического сплайна
$A(t) := \text{interp}(s1, x, y, t)$	$A(x0) = 3.912$
$B(t) := \text{interp}(s2, x, y, t)$	$B(x0) = 3.921$
$C(t) := \text{interp}(s3, x, y, t)$	$C(x0) = 3.937$



Выбор вспомогательных функций существенно влияет на поведение $A(t)$ вблизи граничных точек рассматриваемого интервала и особенно сильно изменяет результат экстраполяции данных за его пределами.

3.4. Полиномиальная сплайн-интерполяция

Такой тип интерполяции является более сложным и отличается тем, что интерполяция исходной функции производится несколькими *В-сплайнами*, которые сшиваются не в точках x_i (узлах интерполяции), а в заданных пользователем точках u_i . Сплайны могут быть полиномами 1, 2 или 3-й степени.

Для задания полиномиальной сплайн-интерполяции используется функция *interp*, векторная переменная которой определяется функцией *bspline*, синтаксис которой таков

$$\text{bspline}(x, y, u, n),$$

где x – вектор действительных данных аргумента;

y – вектор действительных данных значений функции при соответствующих значениях аргумента;

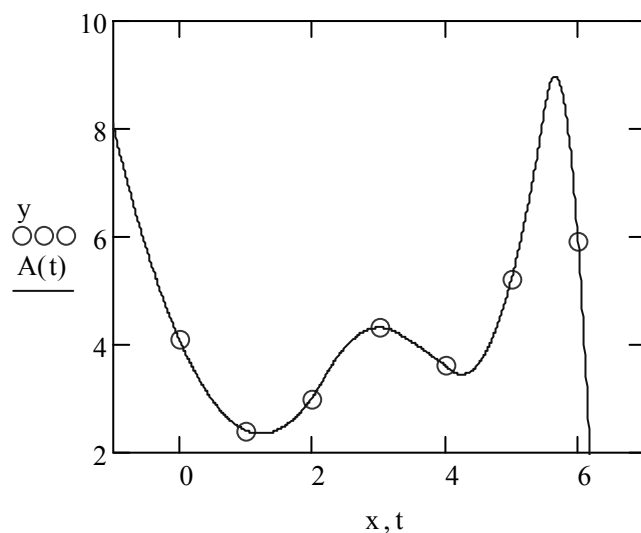
u – вектор значений аргумента, в которых производится сшивка В-сплайнов;

n – порядок полиномов сплайн-интерполяции.

Размерность вектора u должна быть на 1, 2 или 3 меньше размерности векторов x и y . Первый элемент вектора u должен быть меньше или равен первому элементу вектора x , а последний элемент вектора u – больше или равен последнему элементу вектора x .

Пример 3.5. Вычислить значение функции из примера 3.3 в точке 3,5, используя полиномиальную сплайн-интерполяцию.

```
x := (0 1 2 3 4 5 6)T           'Узлы интерполяции
y := (4.1 2.4 3 4.3 3.6 5.2 5.9)T 'Значения функции в узлах
x0 := 3.5
u := (-0.5 2.2 3.3 4.1 5.5 7)T   'Точки сшивки
s := bspline(x,y,u,2)             'Векторная переменная
A(t) := interp(s,x,y,t)
A(x0) = 4.036
```



3.5. Обратное интерполирование

Задача обратного интерполирования заключается в том, чтобы по значениям монотонной функции $f(x)$, заданной таблично, определить соответствующее значение аргумента x .

Для реализации обратного интерполирования в среде MathCAD используются те же функции, что и для прямого интерполирования с той разницей, что при записи той или иной функции необходимо поменять местами обозначения аргумента и функции. То есть, если по значению функции y_i необходимо определить значение аргумента x_i с помощью, например, линейной интерполяции, запись будет таковой

$$A(t) := \text{linterp}(y, x, t).$$

Для других типов интерполяции запись будет соответствовать синтаксису для прямой интерполяции.

Важным замечанием является то, что значения функции должны идти в возрастающем порядке.

Пример 3.6. Найти значение аргумента, при котором функция принимает значение $y = 1$. Применить линейную и сплайн-интерполяции. Значения функции при некоторых значениях аргумента приведены в таблице.

x	2,5	3,2	4,4	4,7	5,1	6,0
y	7,3	5,5	2,1	0,8	0,7	0,1

ORIGIN := 1

$x := (2.5 \ 3.2 \ 4.4 \ 4.7 \ 5.1 \ 6)^T$ ' Значения аргумента

$y := (7.3 \ 5.5 \ 2.1 \ 0.8 \ 0.7 \ 0.1)^T$ ' Значения функции

$y := \text{reverse}(y)$ ' Обращение векторов

$x := \text{reverse}(x)$

$t := y_1, y_1 + 0.1 \dots y_{\text{last}}(y)$ ' Аргумент интерполяционной функции

$s1 := \text{lspline}(y, x)$

$s2 := \text{pspline}(y, x)$

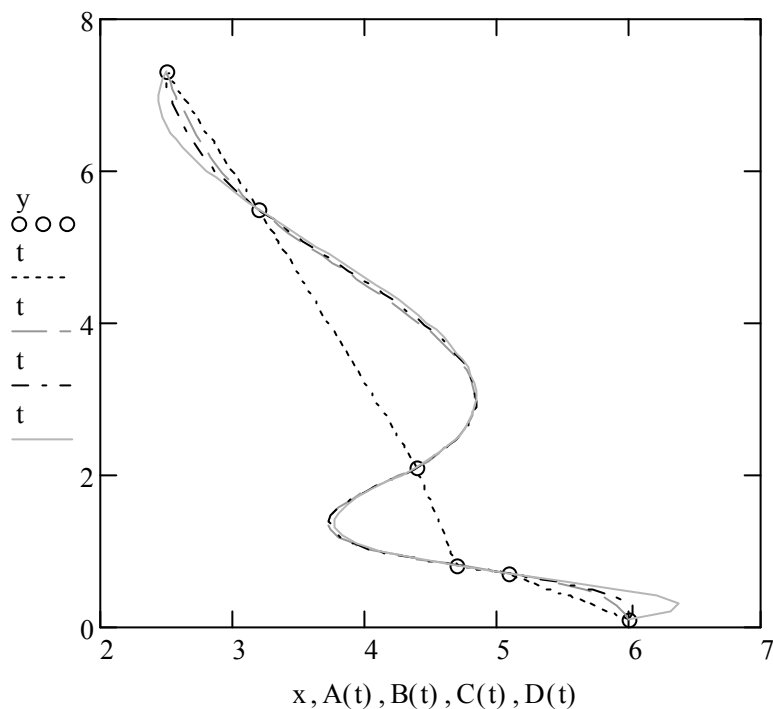
$s3 := \text{cspline}(y, x)$

$A(t) := \text{linterp}(y, x, t)$ $A(1) = 4.654$

$B(t) := \text{interp}(s1, y, x, t)$ $B(1) = 4.096$

$C(t) := \text{interp}(s2, y, x, t)$ $C(1) = 4.104$

$D(t) := \text{interp}(s3, y, x, t)$ $D(1) = 4.128$



3.6. Задания к лабораторной работе 3

1) По данным значениям плотности при соответствующих температурах (табл. 3.2) вычислить плотность вещества при температуре t' , используя интерполяционный многочлен Лагранжа и все виды интерполяции. Сравнить результаты.

Таблица 3.2

Варианты задания 1

Вари- ант	Вещество	Плотность, кг/м ³						<i>t'</i>
		при температуре, °C						
		20	40	60	80	100	120	
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>
1	Азотная кислота	1513	1478	1443	1408	1373	1338	41
2	Анилин	1022	1004	987	969	952	933	27
3	Ацетон	791	768	746	719	693	665	62
4	Бензол	879	858	836	815	793	769	63
5	Бутанол	810	795	781	766	751	735	45
6	Вода	998	992	983	972	958	943	81
7	Гексан	660	641	622	602	591	559	112
8	Дихлорэтан	1254	1224	1194	1163	1133	1102	62
9	Изопропанол	785	768	752	735	718	700	41
10	Муравьиная кислота	1220	1195	1171	1147	1121	1096	25

Продолжение табл. 3.2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
11	Нитробензол	1203	1183	1163	1143	1123	1103	27
12	Октан	702	686	669	653	635	617	63
13	Пропанол	804	788	770	752	733	711	85
14	Сероуглерод	1263	1233	1200	1165	1125	1082	91
15	Толуол	866	847	828	808	788	766	72
16	Хлорбензол	1107	1085	1065	1041	1021	995	55
17	Хлороформ	1489	1450	1411	1380	1326	1280	63
18	Четыреххлористый углерод	1594	1556	1517	1471	1434	1390	47
19	Этилацетат	901	876	851	825	797	768	115
20	Этанол	789	772	754	735	716	693	51

2) Построить кубический сплайн для функции $y = f(x)$ на отрезке $[a; b]$, используя разбиение отрезка на n частей. Найти значение в точке x^* и сравнить его с точным значением. Исходные данные приведены в табл. 3.3.

Таблица 3.3

Варианты задания 2

Вариант	Исходные данные			
	$f(x)$	$[a; b]$	n	x^*
1	2	3	4	5
1	$\cos^2(\pi x)$	$[-1; 1]$	12	-0,78
2	$2\sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$	$[-2; 2]$	14	1,12
3	$\frac{2\cos x \sin x}{e^x}$	$[-3; 3]$	12	-2,41
4	$\frac{x^4}{16}$	$[-2; 2]$	12	1,47
5	$\frac{\cos x^3}{\ln x}$	$[2; 6]$	10	3,52
6	$\cos(\pi x)$	$[-3; 3]$	14	2,18
7	$\frac{\sin x^2}{e^x}$	$[-3; 3]$	10	-0,57
8	$\frac{\sin x}{1+x^2}$	$[-3; 3]$	12	1,92
9	$\frac{2x}{1+x^2}$	$[-4; 4]$	14	3,21

Продолжение табл. 3.3

1	2	3	4	5
10	$\cos^3(\pi x)$	[-1; 1]	10	-0,77
11	$\frac{x^3}{1+x^2}$	[-2; 2]	12	1,64
12	$\frac{\cos x^3}{1+x^2}$	[-2; 2]	14	-1,41
13	$2\sin\left(\frac{\pi x}{3}\right)$	[-3; 3]	10	-2,02
14	$\cos\left(\frac{x}{5}\right)$	[-5; 5]	12	3,26
15	$\ln(1+x^2)$	[-2; 2]	14	0,27
16	$\ln(1+x^3)$	[0; 3]	10	1,72
17	$\sin\left(\frac{x^2}{10}\right)$	[-3; 3]	12	2,21
18	$\frac{\sin x^2}{\ln x}$	[2; 6]	14	4,56
19	$\frac{x^4}{1+x^2}$	[-2; 2]	10	-1,15
20	$\frac{x^3}{27}$	[-3; 3]	12	2,11

3) По данным значениям зависимости динамической вязкости от температуры определить, при какой температуре вязкость вещества будет равна μ' . Для решения задачи использовать линейную и все виды сплайн-интерполяции. Исходные данные приведены в табл. 3.4.

Таблица 3.4

Варианты задания 3

Вариант	Вещество	Динамическая вязкость, сП						μ'
		20	30	40	50	60	80	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Анилин	4,40	3,12	2,30	1,80	1,50	1,0	2,21
2	Ацетон	0,32	0,29	0,27	0,25	0,23	0,20	0,28
3	Бензол	0,65	0,56	0,49	0,44	0,39	0,32	0,45
4	Бутанол	2,95	2,28	1,78	1,41	1,14	0,76	1,50
5	Вода	1,00	0,80	0,66	0,55	0,47	0,36	0,60
6	Гексан	0,32	0,29	0,26	0,24	0,22	0,19	0,25

Продолжение табл. 3.4

1	2	3	4	5	6	7	8	9
7	Дихлорэтан	0,84	0,74	0,65	0,56	0,51	0,42	0,71
8	Диэтиловый эфир	0,24	0,22	0,19	0,18	0,17	0,14	0,16
9	Изопропанол	2,39	1,76	1,33	1,03	0,80	0,52	1,20
10	Муравьиная кислота	1,78	1,46	1,22	1,03	0,89	0,68	1,50
11	Нитробензол	2,01	1,69	1,44	1,24	1,09	0,87	1,35
12	Октан	0,54	0,48	0,43	0,39	0,35	0,29	0,41
13	Сероуглерод	0,37	0,32	0,29	0,27	0,25	0,21	0,28
14	Толуол	0,59	0,52	0,47	0,42	0,38	0,32	0,45
15	Уксусная кислота	1,22	1,04	0,90	0,79	0,70	0,56	0,82
16	Хлорбензол	0,80	0,71	0,64	0,57	0,52	0,44	0,60
17	Хлороформ	0,57	0,51	0,47	0,43	0,39	0,33	0,45
18	Четыреххлористый углерод	0,97	0,84	0,74	0,65	0,59	0,47	0,70
19	Этилацетат	0,45	0,40	0,36	0,33	0,29	0,25	0,38
20	Этанол	1,19	1,00	0,83	0,70	0,59	0,44	0,90

4) Ответить на контрольные вопросы

3.7. Контрольные вопросы

- 1) Что такое интерполяция и какие задачи она решает?
- 2) В чем отличие интерполяции от экстраполяции?
- 3) Каковы основные свойства многочлена Лагранжа?
- 4) Объясните суть линейной и сплайн-интерполяции.
- 5) Как проводится обратное интерполирование?

4. АППРОКСИМАЦИЯ

Задачи математической регрессии (аппроксимации) имеют смысл приближения выборки данных (x_i, y_i) некоторой функцией $f(x)$, определенным образом минимизирующей совокупность ошибок $|f(x_i) - y_i|$.

Как правило, регрессия очень эффективна, когда заранее известен (или, по крайней мере, хорошо угадывается) закон распределения данных.

Процесс аппроксимации набора данных включает в себя два этапа:

- 1) выбор вида функциональной зависимости (формулы, уравнения, модели);
- 2) определение численных значений параметров для выбранного типа функциональной зависимости.

Если нет каких-либо теоретических соображений для выбора вида функциональной зависимости, то выбор основывается на сравнении графика исследуемой зависимости с графиками известных функций (линейной, гиперболической, показательной, логарифмической и пр.). Однако внешнее сходство графиков может оказаться обманчивым и во избежание ошибок рекомендуется проверять возможность применения той или иной функциональной зависимости для аппроксимации набора данных методом *выравнивания*.

Ниже приведены некоторые простейшие формулы с соответствующими графиками, на вид которых можно ориентироваться, а также формулы для выравнивания.

1) Функция

$$y = ax^b, \quad (4.1)$$

графики которой приведены на рис. 4.1.

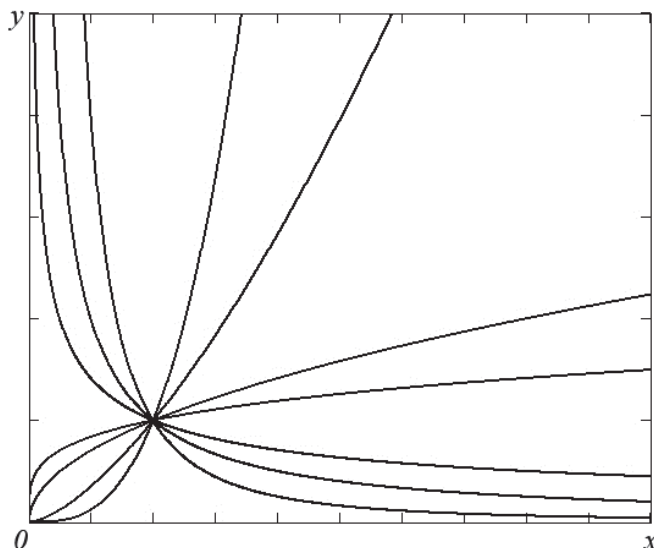


Рис. 4.1. Графики функции $y = ax^b$

Выравнивание функции $y = ax^b$ производится следующими заменами

$$X = \lg x,$$

$$Y = \lg y.$$

Тогда функция принимает вид

$$Y = \lg a + bX.$$

Коэффициенты определяются с помощью линейной регрессии по методу наименьших квадратов (см. раздел 4.1).

2) Функция

$$y = ae^{bx}, \quad (4.2)$$

графики которой приведены на рис. 4.2.

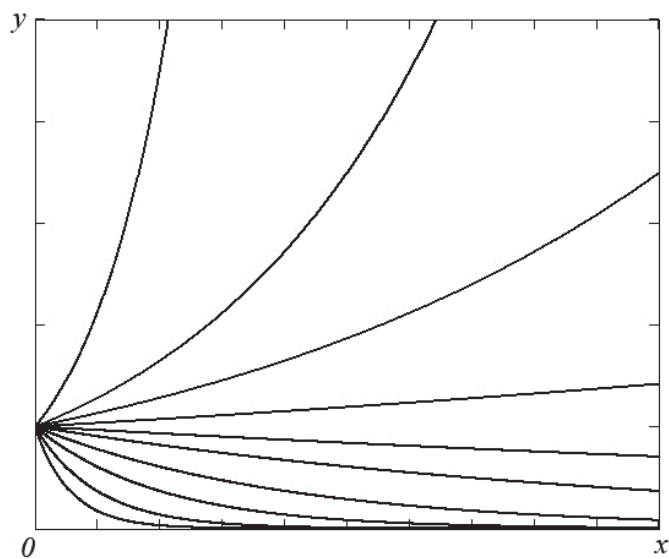


Рис. 4.2. Графики функции $y = ae^{bx}$

Выравнивание функции $y = ae^{bx}$ производится заменой
 $Y = \ln y$.

Тогда функция принимает вид

$$Y = \ln a + bx.$$

Коэффициенты определяются с помощью линейной регрессии по методу наименьших квадратов (см. раздел 4.1).

3) Функция

$$y = ax^b + c, \tag{4.3}$$

графики которой приведены на рис. 4.3.

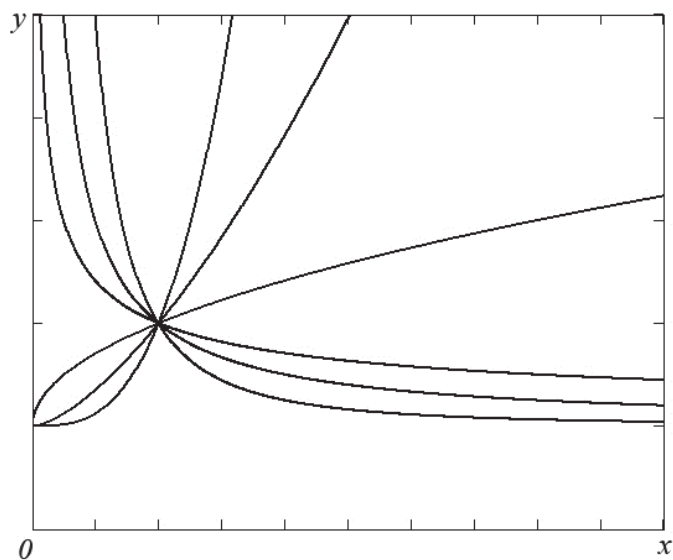


Рис. 4.3. Графики функции $y = ax^b + c$

Если коэффициент b задан или заранее известен, то выравнивают

$$X = x^b$$

и функция принимает вид

$$y = aX + c.$$

Если коэффициент b неизвестен, то сначала необходимо определить коэффициент c . Для этого на графике выбирают три точки с абсциссами x_1 , x_2 и $x_3 = \sqrt{x_1 x_2}$ (x_1 и x_2 выбирают произвольно) и ординатами соответственно y_1 , y_2 и y_3 . Принимают, что

$$c = \frac{y_1 y_2 - y_3^2}{y_1 + y_2 - 2y_3}.$$

После определения коэффициентов a и b нужно перезадавать c равным среднему значению

$$c^* = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - ax^b)}{n}$$

и снова определить коэффициенты a и b .

Коэффициенты определяются с помощью линейной регрессии по методу наименьших квадратов (см. раздел 4.1).

4) Функция

$$y = ae^{bx} + c, \quad (4.4)$$

графики которой приведены на рис. 4.4.

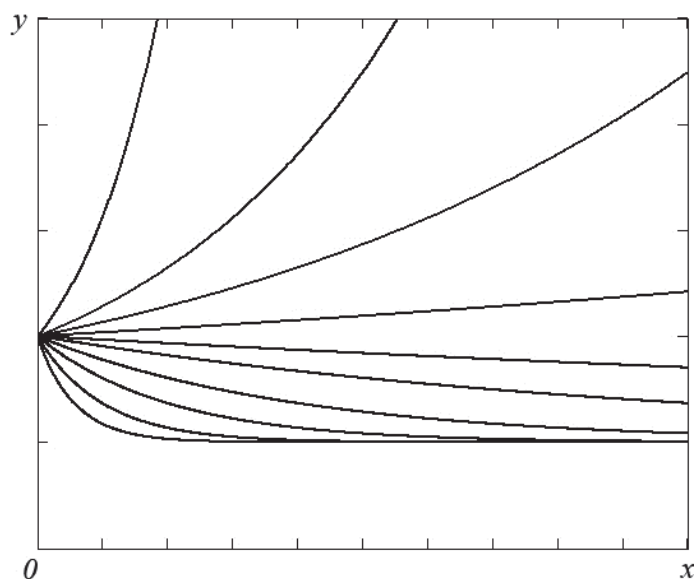


Рис. 4.4. Графики функции $y = ae^{bx} + c$

Сначала необходимо определить коэффициент c . Для этого на графике выбирают три точки с абсциссами x_1 , x_2 и $x_3 = \frac{x_1 + x_2}{2}$ (x_1 и x_2 выбирают произвольно) и ординатами соответственно y_1 , y_2 и y_3 . Принимают, что

$$c = \frac{y_1 y_2 - y_3^2}{y_1 + y_2 - 2y_3}.$$

Далее выравнивают

$$Y = \ln(y - c),$$

тогда функция принимает вид

$$Y = \ln a + bx.$$

После определения коэффициентов a и b нужно перезадавать c равным среднему значению

$$c^* = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - ae^{bx})}{n}$$

и снова определить коэффициенты a и b .

Коэффициенты определяются с помощью линейной регрессии по методу наименьших квадратов (см. раздел 4.1).

5) Функция

$$y = ax^2 + bx + c, \tag{4.5}$$

графики которой приведены на рис. 4.5.

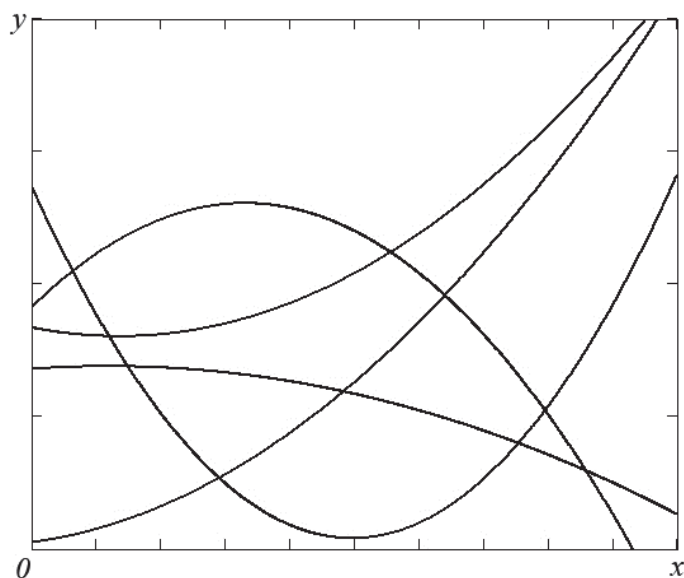


Рис. 4.5. Графики функции $y = ax^2 + bx + c$

Для определения коэффициентов уравнения $y = ax^2 + bx + c$ не требуется выравнивания. Коэффициенты определяются с помощью метода наименьших квадратов для полиномиальной модели (см. раздел 4.2).

6) Функция

$$y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}, \quad (4.6)$$

графики которой приведены на рис. 4.6.

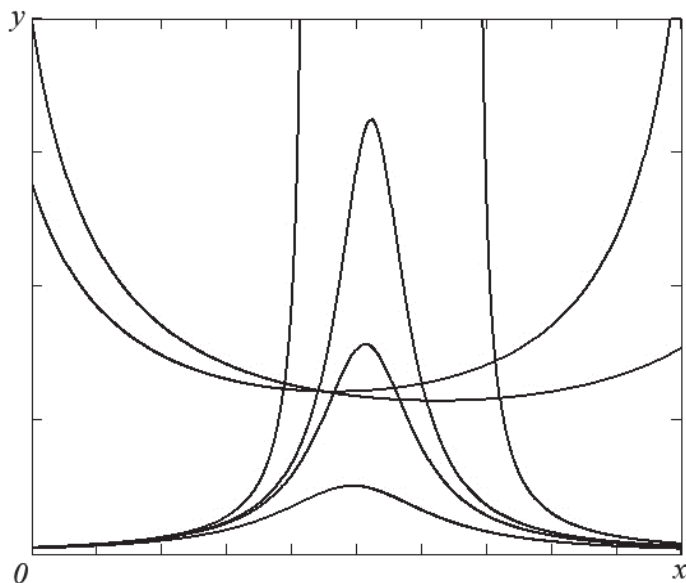


Рис. 4.6. Графики функции $y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}$

В этом случае заменой

$$Y = \frac{1}{y}$$

функция приводится к виду

$$Y = ax^2 + bx + c$$

и коэффициенты определяются с помощью метода наименьших квадратов для полиномиальной модели (см. раздел 4.2).

7) Функция

$$y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}, \quad (4.7)$$

графики которой приведены на рис. 4.7.

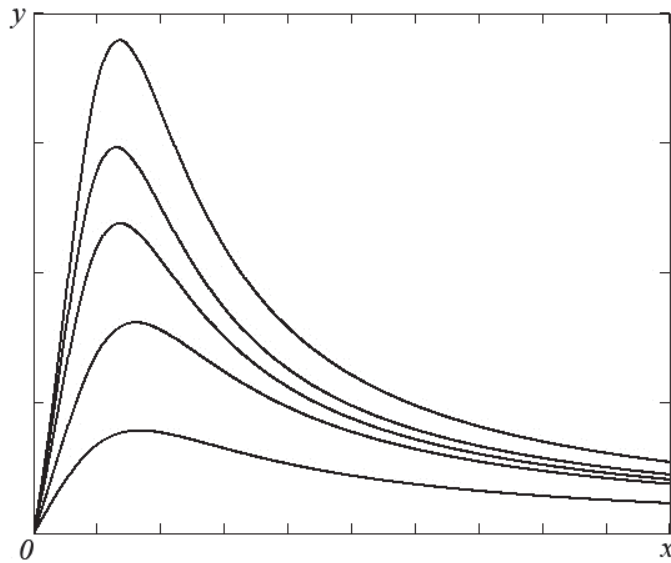


Рис. 4.7. Графики функции $y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}$

В этом случае заменой $Y = \frac{x}{y}$
 функция приводится к виду

$$Y = ax^2 + bx + c$$

и коэффициенты определяются с помощью метода наименьших квадратов для полиномиальной модели (см. раздел 4.2).

8) Функция, графики которой приведены на рис. 4.8,

$$y = \frac{a}{x^2} + \frac{b}{x} + c, \quad (4.8)$$

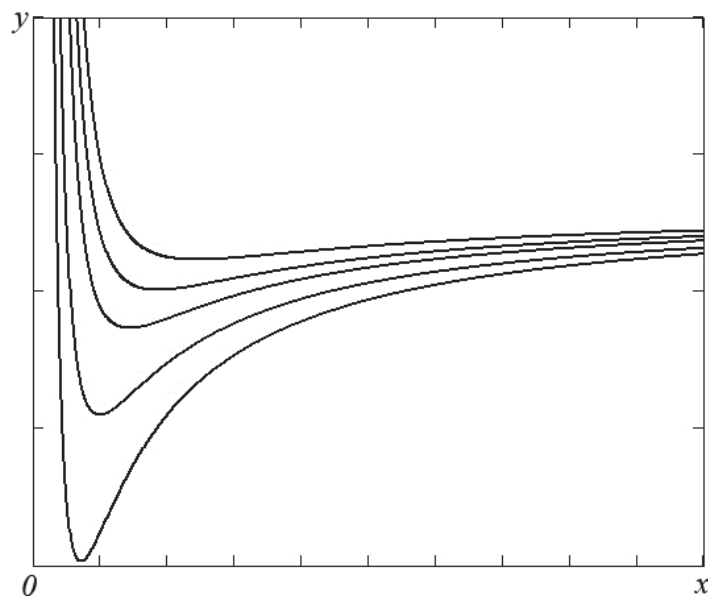


Рис. 4.8. Графики функции $y = \frac{a}{x^2} + \frac{b}{x} + c$

В этом случае заменой

$$X = \frac{1}{x}$$

функция приводится к виду

$$Y = aX^2 + bX + c$$

и коэффициенты определяются с помощью метода наименьших квадратов для полиномиальной модели (см. раздел 4.2).

4.1. Линейная регрессия. Метод наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов является наиболее распространенным при аппроксимации экспериментальных данных.

Пусть заданы значения функции y_i , соответствующие значениям x_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Предположим, что аппроксимирующая функция $g(x)$ зависит от m параметров, т.е. имеет вид

$$g(x, a_1, a_2, \dots, a_m), \\ m \leq n.$$

Суть метода наименьших квадратов состоит в выборе таких коэффициентов модели, при которых минимизируется сумма квадратов отклонений значений аппроксимирующей функции $g(x_i)$ от заданных значений функции y_i , т.е.

$$Q(a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n (y_i - g(x_i))^2 \rightarrow \min.$$

Условием минимизации функции является равенство производных нулю:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q(a_1, a_2, \dots, a_m)}{\partial a_1} = 0, \\ \frac{\partial Q(a_1, a_2, \dots, a_m)}{\partial a_2} = 0, \\ \dots \\ \frac{\partial Q(a_1, a_2, \dots, a_m)}{\partial a_m} = 0. \end{cases}$$

В случае, если аппроксимирующая функция является линейной, т.е.

$$g(x, a_1, a_2) = a_1 + a_2 x,$$

то справедливо следующее соотношение:

$$Q(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^n (y_i - g(x_i))^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (a_1 + a_2 x_i))^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_1 - a_2 x_i)^2.$$

Тогда

$$\begin{cases} \frac{\partial Q(a_1, a_2)}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^n 2(y_i - a_1 - a_2 x_i) \cdot (-1) = 0, \\ \frac{\partial Q(a_1, a_2)}{\partial a_2} = \sum_{i=1}^n 2(y_i - a_1 - a_2 x_i) \cdot (-x_i) = 0, \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n a_1 - \sum_{i=1}^n a_2 x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n a_1 x_i - \sum_{i=1}^n a_2 x_i^2 = 0. \end{cases}$$

Окончательно получаем

$$\begin{cases} na_1 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i, \\ a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i x_i. \end{cases}$$

Последняя система уравнений называется *системой нормальных уравнений*. Её решение даст значения неизвестных коэффициентов линейной модели.

Для оценки близости полученного уравнения к исходному набору данных (достоверность аппроксимации) используется *коэффициент детерминации* R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - g(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}.$$

Значения коэффициента детерминации находятся в диапазоне

$$0 \leq R^2 \leq 1.$$

Чем ближе значение коэффициента детерминации к 1, тем точнее аппроксимирующая функция $g(x)$ описывает зависимость y от x .

Пример 4.1. Аппроксимировать зависимость, представленную таблично.

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y	1,0	1,2	1,4	1,5	1,7	1,8	2,0	2,1	2,5	3,0

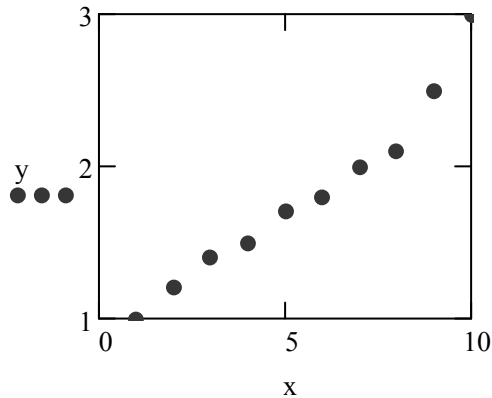
Построим поле корреляции

ORIGIN := 1

$x := (1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ 9 \ 10)^T$

' Исходные данные

$y := (1 \ 1.2 \ 1.4 \ 1.5 \ 1.7 \ 1.8 \ 2 \ 2.1 \ 2.5 \ 3)^T$



' Поле корреляции

На основе его анализа выберем уравнения, приводящиеся к линейной форме, т.е. $y = ax^b$ и $y = ae^{bx}$.

$X := \log(x)$

$Y := \log(y)$

' Выравнивание

$n := \text{rows}(x)$

$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n (X_i)^2 \end{bmatrix} \quad B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n (Y_i \cdot X_i) \end{bmatrix}$$

' Система нормальных уравнений

$C := \text{lsolve}(A, B)$

$$C = \begin{pmatrix} -0.047 \\ 0.435 \end{pmatrix}$$

' Решение системы нормальных уравнений

$F(X) := C_1 + C_2 \cdot X$

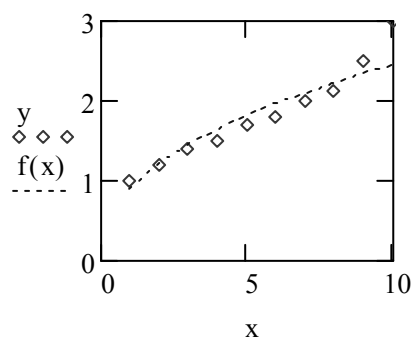
' Уравнение линеаризованной модели

$a := 10^{C_1} \quad a = 0.898$

$b := C_2 \quad b = 0.435$

$f(x) := a \cdot x^b$

' Уравнение модели



$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - F(X_i))^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \text{mean}(Y))^2} = 0.916 \quad \text{' Коэффициент детерминации}$$

Таким образом, уравнение (4.1) имеет вид

$$y = 0,898x^{0,435}.$$

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,916$ ($R^2 > 0,9$ говорит о тесной функциональной связи).

$X := x$ $Y := \ln(y)$ ' Выравнивание

$n := \text{rows}(x)$

$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n (X_i)^2 \end{bmatrix} \quad B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n (Y_i \cdot X_i) \end{bmatrix} \quad \text{' Система нормальных уравнений}$$

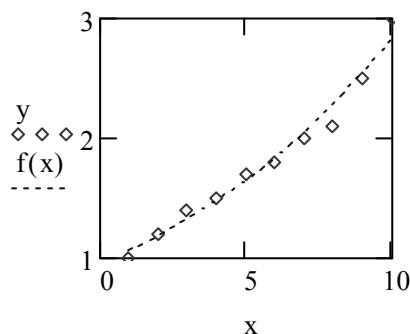
$$C := \text{lsolve}(A, B) \quad C = \begin{pmatrix} -0.05 \\ 0.109 \end{pmatrix} \quad \text{' Решение системы нормальных уравнений}$$

$F(X) := C_1 + C_2 \cdot X$ ' Уравнение линеаризованной модели

$$\begin{aligned} a &:= e^{C_1} & a &= 0.951 \\ b &:= C_2 & b &= 0.109 \end{aligned}$$

$$f(x) := a \cdot e^{b \cdot x}$$

' Уравнение модели



$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - F(X_i))^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \text{mean}(Y))^2} = 0.98$$

' Коэффициент детерминации

Таким образом, уравнение имеет вид

$$y = 0,951e^{0,109x}.$$

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,98$.

Сравнивая коэффициенты детерминации для уравнений (4.1) и (4.2) можно сделать вывод, что уравнение (4.2) лучше описывает зависимость между y и x .

Для расчета линейной регрессии в MathCAD имеются два дублирующих друг друга способа:

1) функция $line(x,y)$ – вектор из двух элементов (a,b) коэффициентов линейной регрессии $a + b \cdot x$;

2) функция $intercept(x,y)$ – коэффициент a , функция $slope(x,y)$ – коэффициент b .

Здесь в обоих случаях x – вектор действительных данных аргумента; y – вектор действительных данных значений функции.

Эти функции избавляют пользователя от необходимости составлять систему нормальных уравнений и находить её решение.

Пример 4.2. Рассчитать коэффициенты моделей из примера 4.1 с помощью встроенных средств MathCAD.

Для уравнения (4.1)

$$\text{lin}\epsilon(X, Y) = \begin{pmatrix} -0.047 \\ 0.435 \end{pmatrix}$$

$$\text{intercep}(X, Y) = -0.047$$

$$\text{slope}(X, Y) = 0.435$$

Для уравнения (4.2)

$$\text{lin}\epsilon(X, Y) = \begin{pmatrix} -0.05 \\ 0.109 \end{pmatrix}$$

$$\text{intercep}(X, Y) = -0.05$$

$$\text{slope}(X, Y) = 0.109$$

4.2. Полиномиальная регрессия

Для определения параметров полиномиальной регрессии

$$g(x, a_0, \dots, a_m) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$$

составляется следующая система нормальных уравнений

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 + \dots + a_m \sum_{i=1}^n x_i^m = \sum_{i=1}^n y_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^3 + \dots + a_m \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} = \sum_{i=1}^n y_i x_i, \\ \dots \dots \dots \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_{i=1}^n x_i^{2m} = \sum_{i=1}^n y_i x_i^m. \end{cases}$$

Полиномиальная регрессия означает приближение данных (x_i, y_i) полиномом k -й степени

$$A(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + \dots + hx^k.$$

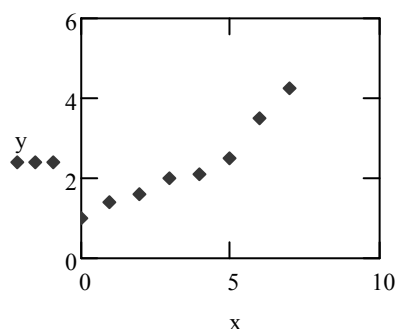
При $k=1$ полином является прямой линией, при $k=2$ – параболой, при $k=3$ – кубической параболой и т.д. На практике обычно используют полиномы с $k < 5$.

Для построения регрессии полиномом k -й степени необходимо наличие, по крайней мере, $(k + 1)$ точек данных.

Пример 4.3. Аппроксимировать зависимость, представленную таблично.

x	0	1	2	3	4	5	6	7
y	1,0	1,4	1,6	2,0	2,1	2,5	3,5	4,2

Построим поле корреляции



На его основе выберем уравнения, приводящиеся к полиномиальной форме, т.е. это уравнения $y = ax^2 + bx + c$, $y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}$ и $y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}$.

$n := \text{rows}(x)$

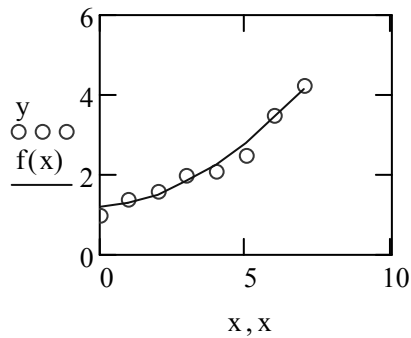
$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 \\ \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 & \sum_{i=1}^n (x_i)^4 \end{bmatrix} \quad B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n (y_i \cdot x_i) \\ \sum_{i=1}^n [y_i \cdot (x_i)^2] \end{bmatrix}$$

$$C := \text{Isolve}(A, B) \quad C = \begin{pmatrix} 1.154 \\ 0.071 \\ 0.051 \end{pmatrix}$$

' Решение системы нормальных уравнений

$$f(x) := C_3 \cdot x^2 + C_2 \cdot x + C_1$$

' Уравнение модели



$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \text{mean}(y))^2} = 0.977$$

' Коэффициент
детерминации

Т.е. уравнение (4.5) имеет вид

$$y = 0,051x^2 + 0,071x + 1,154.$$

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,977$.

$$Y := \frac{1}{y}$$

' Выравнивание

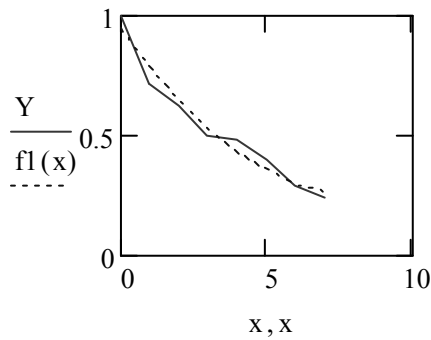
$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 \\ \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 & \sum_{i=1}^n (x_i)^4 \end{bmatrix} \quad B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n (Y_i \cdot x_i) \\ \sum_{i=1}^n [Y_i \cdot (x_i)^2] \end{bmatrix}$$

$$D := \text{lsolve}(A, B) \quad D = \begin{pmatrix} 0.942 \\ -0.169 \\ 0.01 \end{pmatrix}$$

' Решение системы нор-
мальных уравнений

$$f1(x) := D_3 \cdot x^2 + D_2 \cdot x + D_1$$

' Уравнение модели



$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - fl(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \text{mean}(Y))^2} = 0.967$$

' Коэффициент
детерминации

Уравнение (4.6) имеет вид

$$y = \frac{1}{0,01x^2 - 0,169x + 0,942}.$$

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,967$.

$$Y := \frac{x}{y}$$

' Выравнивание

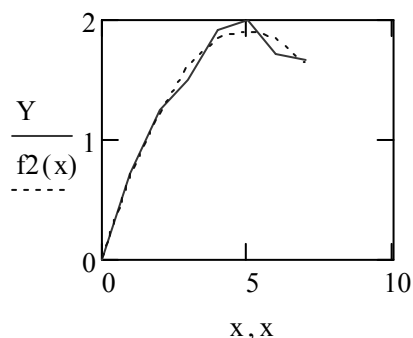
$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 \\ \sum_{i=1}^n (x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (x_i)^3 & \sum_{i=1}^n (x_i)^4 \end{bmatrix} \quad B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n (Y_i \cdot x_i) \\ \sum_{i=1}^n [Y_i \cdot (x_i)^2] \end{bmatrix}$$

$$E := \text{Isolve}(A, B) \quad E = \begin{pmatrix} 0.01 \\ 0.758 \\ -0.075 \end{pmatrix}$$

' Решение системы
нормальных уравнений

$$f2(x) := E_3 \cdot x^2 + E_2 \cdot x + E_1$$

' Уравнение модели



$$1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - f2(x_i))^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \text{mean}(Y))^2} = 0.987$$

' Коэффициент
детерминации

Уравнение (4.7) имеет вид

$$y = \frac{x}{-0,075x^2 + 0,758x + 0,01}.$$

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,987$.

Таким образом, наилучшим образом данную зависимость описывает уравнение (4.7).

В среде MathCAD полиномиальная регрессия реализуется комбинацией встроенных функций *regress* и *interp*.

Синтаксис функции *regress*

$$\text{regress}(x, y, k),$$

где k – степень полинома регрессии (целое положительное число).

Пример 4.4. Найти параметры функции из примера 4.3 с помощью полиномиальной регрессии 2, 3, 4 и 5-го порядков.

ORIGIN := 1

$x := (0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7)^T$ ' Исходные данные

$y := (1 \ 1.4 \ 1.6 \ 2 \ 2.1 \ 2.5 \ 3.5 \ 4.2)^T$

$k1 := 2 \quad k2 := 3$

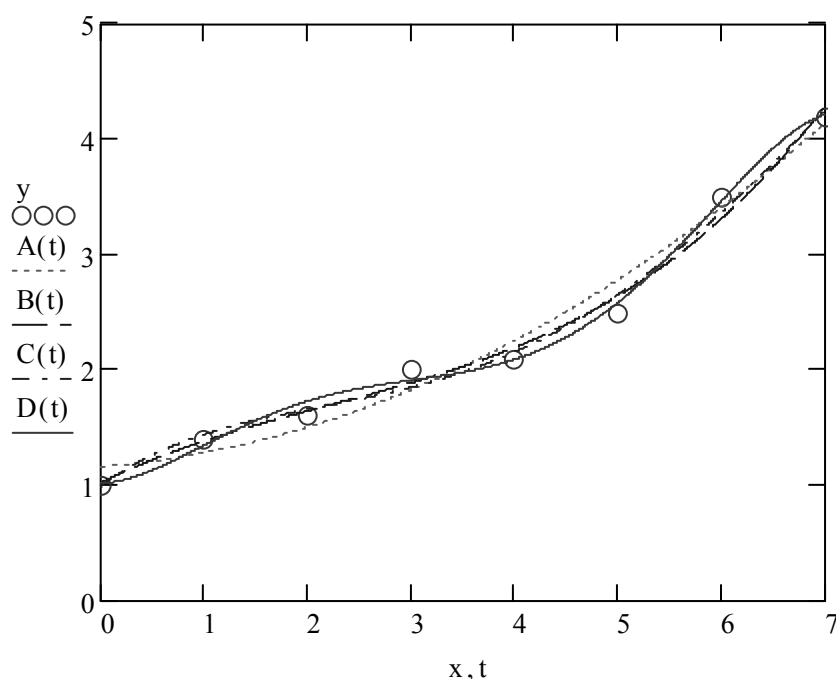
$k3 := 4 \quad k4 := 5$

'Степени полинома

$s(k) := \text{regress}(x, y, k)$

'Параметрическое задание
функции regress

$A(t) := \text{interp}(s(k1), x, y, t)$	'Регрессия 2-го порядка
$B(t) := \text{interp}(s(k2), x, y, t)$	'Регрессия 3-го порядка
$C(t) := \text{interp}(s(k3), x, y, t)$	'Регрессия 4-го порядка
$D(t) := \text{interp}(s(k4), x, y, t)$	'Регрессия 5-го порядка



4.3. Другие типы регрессии

В вычислительном аппарате MathCAD есть несколько видов трех-параметрической регрессии. Особенностью их реализации является то, что, помимо массивов данных, нужно вводить ещё и начальные значения коэффициентов регрессии. Использование того или иного типа регрессии оправдано в том случае, когда графически угадывается тот или иной тип зависимости между данными.

Регрессии представлены следующими типами:

- $\text{expfit}(x, y, g)$ – регрессия экспонентой $f(x) = a \cdot e^{bx} + c$;
- $\text{lgfit}(x, y, g)$ – регрессия логистической функцией $f(x) = \frac{a}{1 + b \cdot e^{-cx}}$;
- $\text{sinfit}(x, y, g)$ – регрессия синусоидой $f(x) = a \cdot \sin(x + b) + c$;
- $\text{pwrfit}(x, y, g)$ – регрессия степенной функцией $f(x) = a \cdot x^b + c$;
- $\text{logfit}(x, y, g)$ – регрессия логарифмической функцией $f(x) = a \cdot \ln(x + b) + c$;

- $\text{lnfit}(x,y)$ – регрессия двухпараметрической логарифмической функцией $f(x) = a \cdot \ln x + b$.

В данных регрессиях g – вектор из трех элементов, задающий начальные значения a, b, c .

Пример 4.4. Найти параметры функции, заданной таблично, с помощью регрессии экспонентой, синусоидой и логарифмической зависимостью.

x	0	1	2	3	4	5	6
y	4,1	2,4	3,0	4,3	3,6	5,2	5,9

ORIGIN := 1

$x := (0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6)^T$ 'Значения аргумента

$y := (4.1 \ 2.4 \ 3 \ 4.3 \ 3.6 \ 5.2 \ 5.9)^T$ 'Значения функции

$g := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 'Начальные приближения

$A := \text{expfit}(x, y, g)$ $A = \begin{pmatrix} 0.109 \\ 0.548 \\ 3.104 \end{pmatrix}$ 'Коэффициенты экспоненты

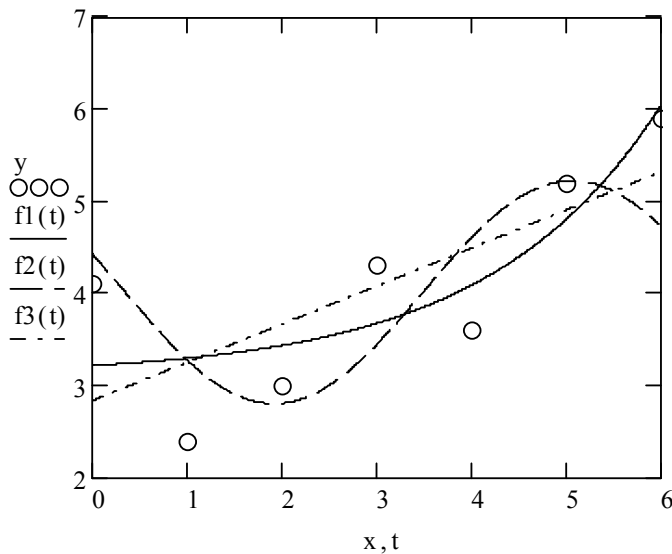
$f1(t) := A_1 \cdot e^{A_2 \cdot t} + A_3$

$B := \text{sinfitt}(x, y, g)$ $B = \begin{pmatrix} 1.211 \\ 2.783 \\ 4.011 \end{pmatrix}$ 'Коэффициенты синусоиды

$f2(t) := B_1 \cdot \sin(t + B_2) + B_3$

$C := \text{logfit}(x, y, g)$ $C = \begin{pmatrix} 1.215 \times 10^3 \\ 2.932 \times 10^3 \\ -9.7 \times 10^3 \end{pmatrix}$ 'Коэффициенты логарифмической функции

$f3(t) := C_1 \cdot \ln(t + C_2) + C_3$



4.4. Регрессия общего вида

Набор данных может быть описан аппроксимирующей функцией, представляющей собой линейную комбинацию функций

$$g(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \dots + a_m f_m(x).$$

Коэффициенты такой модели определяются методом наименьших квадратов. Система нормальных уравнений в этом случае будет иметь вид

$$\begin{cases} a_1 \sum_{i=1}^n [f_1(x_i)]^2 + a_2 \sum_{i=1}^n f_2(x_i) f_1(x_i) + \dots + a_m \sum_{i=1}^n f_m(x_i) f_1(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i f_1(x_i), \\ a_1 \sum_{i=1}^n f_1(x_i) f_2(x_i) + a_2 \sum_{i=1}^n [f_2(x_i)]^2 + \dots + a_m \sum_{i=1}^n f_m(x_i) f_2(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i f_2(x_i), \\ \dots \\ a_1 \sum_{i=1}^n f_1(x_i) f_m(x_i) + a_2 \sum_{i=1}^n f_2(x_i) f_m(x_i) + \dots + a_m \sum_{i=1}^n [f_m(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^n y_i f_m(x_i). \end{cases}$$

В среде MathCAD имеются встроенные функции для реализации регрессии общего вида:

- $\text{linfit}(x, y, F)$ – вектор параметров линейной комбинации функций пользователя, осуществляющей регрессию данных;

- $\text{genfit}(x, y, G, g)$ – вектор параметров, реализующих регрессию данных с помощью функций пользователя общего вида.

В этих функциях x – вектор действительных данных аргумента, элементы которого расположены в порядке возрастания;

y – вектор действительных значений того же размера;

$F(x)$ – пользовательская векторная функция скалярного аргумента;

G – вектор начальных значений параметров регрессии размерности N ;
 $g(x, C)$ – функция пользователя, на основе которой строится регрессия.

Пример 4.5. Аппроксимировать функцию из примера 4.4 линейной комбинацией функций $g(x) = \frac{a_1}{x+1} + a_2x + a_3e^x$.

ORIGIN := 1

$x := (0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6)^T$

' Исходные данные

$y := (4.1 \ 2.4 \ 3 \ 4.3 \ 3.6 \ 5.2 \ 5.9)^T$

$f1(x) := \frac{1}{x+1}$

$f2(x) := x$

' Функции, входящие
в линейную комбинацию

$f3(x) := e^x$

$n := \text{rows}(x)$

$$A := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n f1(x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (f2(x_i) \cdot f1(x_i)) & \sum_{i=1}^n (f3(x_i) \cdot f1(x_i)) \\ \sum_{i=1}^n (f1(x_i) \cdot f2(x_i)) & \sum_{i=1}^n f2(x_i)^2 & \sum_{i=1}^n (f3(x_i) \cdot f2(x_i)) \\ \sum_{i=1}^n (f1(x_i) \cdot f3(x_i)) & \sum_{i=1}^n (f2(x_i) \cdot f3(x_i)) & \sum_{i=1}^n f3(x_i)^2 \end{bmatrix}$$

$$B := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n (y_i \cdot f1(x_i)) \\ \sum_{i=1}^n (y_i \cdot f2(x_i)) \\ \sum_{i=1}^n (y_i \cdot f3(x_i)) \end{bmatrix}$$

$$C := \text{lsolve}(A, B) \quad C = \begin{pmatrix} 3.957 \\ 0.854 \\ 5.605 \times 10^{-4} \end{pmatrix} \quad \text{' Коэффициенты модели}$$

$$g(x) := C_1 \cdot f1(x) + C_2 \cdot f2(x) + C_3 \cdot f3(x) \quad \text{' Уравнение модели (линейной комбинации)}$$

$$F(x) := \begin{pmatrix} f1(x) \\ f2(x) \\ f3(x) \end{pmatrix}$$

$$D := \text{linfit}(x, y, F) \quad D = \begin{pmatrix} 3.957 \\ 0.854 \\ 5.605 \times 10^{-4} \end{pmatrix} \quad \text{' Решение с помощью функции linfit}$$

$$h(x, T) := \frac{T_1}{x + 1} + T_2 \cdot x + T_3 \cdot e^x$$

$$T0 := \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{' Решение с помощью функции genfit}$$

$$E := \text{genfit}(x, y, T0, h) \quad E = \begin{pmatrix} 3.957 \\ 0.854 \\ 5.605 \times 10^{-4} \end{pmatrix}$$

Как видно из примера, все три способа дают одинаковое решение. Таким образом, уравнение имеет вид

$$g(x) = \frac{3,957}{x + 1} + 0,854x + 5,605 \cdot 10^{-4} \cdot e^x.$$

4.5. Задания к лабораторной работе 4

1) Для набора данных, приведенных в табл. 4.1, провести аппроксимацию уравнениями (4.1) – (4.8) и выбрать наиболее адекватное. Для решения использовать системы нормальных уравнений и встроенные средства MathCAD.

Таблица 4.1

Варианты задания 1

Вариант	Исходные данные										
1	x	0,22	0,40	0,51	0,67	0,81	0,96	1,10	1,25	1,39	1,54
	y	1,70	2,50	2,60	3,10	3,52	4,10	5,00	7,10	7,82	8,10
2	x	0,09	0,43	0,77	1,11	1,45	1,79	2,13	2,47	2,81	2,93
	y	3,86	3,47	3,11	2,64	2,52	2,25	2,08	1,99	1,91	1,85
3	x	0,08	0,45	0,81	1,17	1,54	1,89	2,26	2,62	2,98	3,41
	y	1,73	1,28	0,97	0,63	0,16	0,12	0,56	0,73	1,54	1,72
4	x	0,13	0,48	0,83	1,19	1,54	1,89	2,24	2,59	2,94	3,21
	y	69,4	5,63	0,58	1,69	1,90	2,07	1,93	2,11	1,93	1,87
5	x	0,03	0,39	0,75	1,11	1,47	1,83	2,19	2,55	2,91	3,60
	y	2,16	2,98	3,38	3,71	3,80	3,90	4,07	4,13	4,17	4,30
6	x	0,17	0,52	0,86	1,21	1,56	2,10	2,25	2,59	2,94	3,70
	y	1,55	0,85	0,62	0,57	0,75	1,00	1,05	1,15	0,96	0,98
7	x	0,35	0,67	0,99	1,32	1,65	1,97	2,29	2,62	2,94	3,12
	y	0,57	0,51	0,89	1,13	1,64	2,23	2,97	3,87	4,71	5,10
8	x	0,23	0,57	0,90	1,24	1,57	1,91	2,24	2,58	2,91	3,42
	y	3,90	3,23	2,49	1,35	0,18	1,07	1,95	2,84	3,62	5,12
9	x	0,18	0,52	0,85	1,19	1,52	1,86	2,19	2,53	2,86	3,01
	y	1,69	3,06	4,49	6,93	10,5	15,4	22,0	32,4	44,5	49,1
10	x	0,22	0,56	0,90	1,24	1,58	1,92	2,27	2,61	2,95	4,22
	y	0,51	0,98	1,56	1,87	2,44	2,90	3,49	3,95	4,56	6,27
11	x	0,08	0,43	0,78	1,13	1,49	1,84	2,19	2,54	2,89	3,51
	y	4,31	1,78	0,27	1,14	2,25	3,27	4,44	5,39	6,36	7,21
12	x	0,32	0,65	0,97	1,29	1,61	1,93	2,25	2,57	2,89	3,90
	y	2,05	1,76	1,08	0,28	0,98	2,27	4,01	5,79	8,01	10,2
13	x	0,14	0,48	0,81	1,15	1,49	1,83	2,17	2,51	2,85	3,77
	y	2,38	1,32	0,17	0,79	1,61	2,26	2,99	3,65	4,37	6,12
14	x	0,22	0,55	0,88	1,22	1,55	1,88	2,21	2,54	2,87	2,91
	y	2,15	1,27	0,20	0,77	1,63	2,48	3,25	3,84	4,62	4,93
15	x	0,35	0,66	0,98	1,29	1,61	1,92	2,32	2,55	2,86	4,21
	y	0,61	0,27	0,06	0,12	0,42	0,73	1,67	3,14	5,10	6,34
16	x	0,12	0,47	0,83	1,18	1,53	1,89	2,24	2,59	2,95	3,17
	y	0,57	1,28	2,16	3,03	3,78	4,42	5,27	6,12	6,74	7,40
17	x	0,25	0,58	0,92	1,26	1,59	1,93	2,27	2,60	2,94	4,11
	y	3,64	0,79	0,84	0,83	0,65	0,68	0,65	0,55	0,33	0,21
18	x	0,08	0,44	0,79	1,16	1,52	1,87	2,23	2,59	2,95	3,62
	y	2,13	2,08	1,95	1,90	1,53	1,08	0,52	0,66	1,97	2,51

Продолжение табл. 4.1

Вариант	Исходные данные										
19	x	0,23	0,56	0,89	1,23	1,56	1,89	2,23	2,56	2,89	3,72
	y	2,75	2,93	3,07	3,39	3,65	3,74	3,92	4,25	4,51	5,21
20	x	0,36	0,68	1,01	1,33	1,65	1,98	2,30	2,63	2,95	4,40
	y	0,55	0,92	1,19	1,09	1,11	0,59	0,29	0,17	0,08	0,01

2) Для условий из задания 1 построить многочлены третьей и четвертой степеней. Вычислить коэффициенты детерминации. Сделать вывод об изменении значимости модели.

3) Для условий из задания 1 построить аппроксимирующую функцию, являющуюся линейной комбинацией трех произвольных функций, используя систему нормальных уравнений и встроенные средства MathCAD.

4) Ответить на контрольные вопросы.

4.6. Контрольные вопросы

- 1) Что такое аппроксимация?
- 2) В чем заключается смысл процедуры выравнивания?
- 3) В чем смысл и какова математическая интерпретация метода наименьших квадратов?
- 4) Что такое коэффициент детерминации и как он вычисляется?

5. ПОИСК ЭКСТРЕМУМОВ ФУНКЦИИ

В расчетной практике нередко приходится сталкиваться с поиском экстремума функции. Примерами таких процедур могут быть отыскание минимума энергетических затрат на проведение процесса или максимума выхода целевого продукта и др. Задачи на отыскание экстремумов нередко являются частью процедуры оптимизации (поиска оптимального решения).

Методы решения задач на отыскание экстремумов функций основаны на необходимых и, реже, достаточных условиях экстремума функции.

Необходимым условием экстремума является равенство первой производной в точке экстремума нулю, т.е., если x^* – локальный экстремум функции $f(x)$, то

$$f'(x^*) = 0. \quad (5.1)$$

Условие (5.1) выделяет только *стационарные* точки, т.е. такие, в которых функция не возрастает и не убывает. К стационарным точкам относятся точки минимума, максимума и перегиба функции.

Достаточным условие экстремума в случае существования первой и второй производной исследуемой функции является:

- для минимума

$$\begin{cases} f'(x^*) = 0, \\ f''(x^*) > 0; \end{cases}$$

- для максимума

$$\begin{cases} f'(x^*) = 0, \\ f''(x^*) < 0; \end{cases}$$

- для точек перегиба первая и вторая производные функции равны нулю, а справа и слева производная имеет разные знаки

$$\begin{cases} f(x^* - h) < 0, \\ f(x^* + h) > 0, \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} f(x^* - h) > 0, \\ f(x^* + h) < 0. \end{cases}$$

Для большинства практических задач поиска экстремума реализация решения аналитическим способом чрезвычайно сложна или вовсе не выполнима. В таких случаях используют численные методы.

Одним из важных понятий, определяющих применимость численных методов, является понятие *унимодальной функции*.

Функция $f(x)$ является *унимодальной* на отрезке $[a; b]$, если она непрерывна на этом отрезке и существуют числа α и β ($a \leq \alpha \leq \beta \leq b$) такие, что:

- 1) функция $f(x)$ строго монотонно убывает при $a \leq x \leq \alpha$;
- 2) функция $f(x)$ строго монотонно возрастает при $\beta \leq x \leq b$;
- 3) $\min_{x \in [a; b]} f(x) = \inf_{x \in [\alpha; \beta]} f(x)$, где $\inf$ – нижняя грань.

При $\alpha = \beta$ отрезок $[\alpha; \beta]$ вырождается в точку, тогда функция $f(x)$ называется *строго унимодальной*.

К наиболее простым численным методам поиска экстремума функции одной переменной относятся:

- 1) метод сканирования;
- 2) метод локализации экстремума;
- 3) метод поиска с использованием чисел Фибоначчи;
- 4) метод «золотого сечения».

5.1. Метод сканирования

Интервал поиска $[x_{\min}, x_{\max}]$ разбивается на n равных участков, длина каждого из которых равна шагу поиска h . Далее последовательно определяется значение функции во всех точках разбиения и в точках $x_{\min}$ и $x_{\max}$ и запоминается наименьшее значение. Таким образом, экстремум может быть найден с точностью до шага поиска. Основным достоинством метода является его простота. Недостатком является большой объем вычислений, которые необходимо вычислять при его реализации.

Пример 5.1. Найти координаты точки минимума функции $f(x) = 2x(x-2)^3$ и координаты точки максимума функции $f(x) = -x(x-2)^3$ на интервале $[0; 2]$ с шагом 0,01 методом сканирования.

ORIGIN := 1

$f(x) := 2 \cdot x \cdot (x - 2)^3$

' Уравнение функции

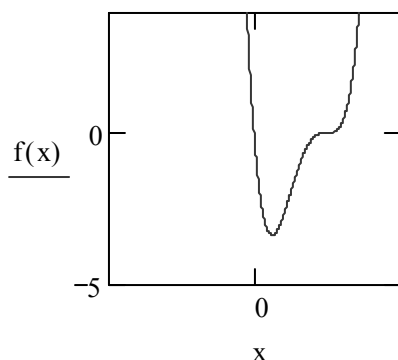
$xmin(f, a, b, h) :=$

$x \leftarrow a$ $fmin \leftarrow f(x)$ while $x \leq b$ $x \leftarrow x + h$ if $f(x) < fmin$ $fmin \leftarrow f(x)$ $xmin \leftarrow x$	' Программа для поиска минимума
---	---------------------------------

$x0 := xmin(f, 0, 2, 0.01)$ $x0 = 0.5$

$f(x0) = -3.375$

' Координаты точки минимума



$$f(x) := -x \cdot (x - 2)^3$$

'Уравнение функции

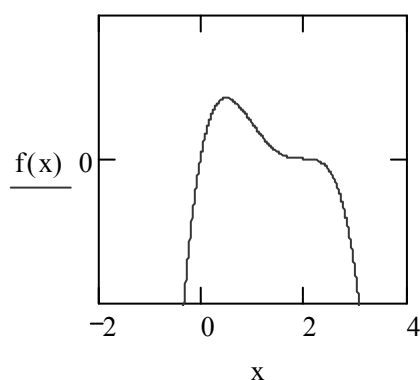
```
xmax(f, a, b, h) :=
  x ← a
  fmax ← f(x)
  while x ≤ b
    x ← x + h
    if f(x) > fmax
      fmax ← f(x)
      xmax ← x
  xmax
```

' Программа для поиска максимума

$$x0 := \text{xmax}(f, 0, 2, 0.01) \quad x0 = 0.5$$

' Координаты точки максимума

$$f(x0) = 1.688$$



Т. е. точка максимума имеет координаты (0,5; 1,668).

5.2. Метод локализации экстремума

Этот метод представляет собой модификацию метода сканирования с использованием меньшего количества вычислений.

Весь интервал поиска $[x_{\min}, x_{\max}]$ разбивается на несколько крупных интервалов точками x_1, x_2 и т.д. (рис. 5.1). В точках разбиения, а также в точках $x_{\min}$ и $x_{\max}$ вычисляется значение исследуемой функции. При поиске минимума выбирается наименьшее из них, а при поиске максимума — наибольшее. Далее к рассмотрению выбираются два соседних интервала, на границе между которыми находится наименьшее (наибольшее) значение функции (в данном случае интервалы $x_1 - x_2$ и $x_2 - x_3$). Эти интервалы разбиваются на ряд более мелких подынтервалов и снова вычисляются

значения функции в точках разбиения. Эта процедура повторяется до тех пор, пока экстремум не будет локализован в интервале, размер которого соответствует заданной точности.

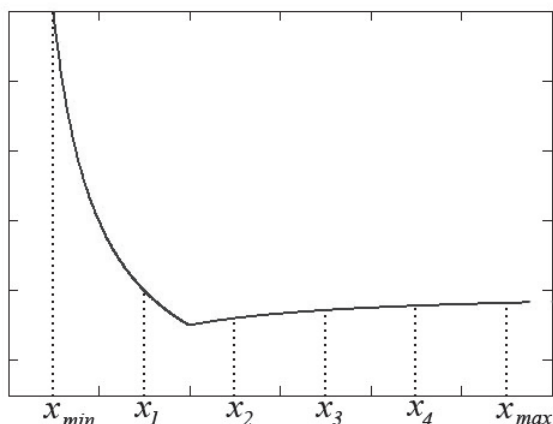


Рис. 5.1. Метод локализации экстремума

Необходимо обратить внимание, что исходный интервал, на котором локализуется экстремум, необходимо выбирать так, чтобы экстремум находился внутри интервала, а не на его границе. Вторым важным условием является то, что количество подынтервалов, на которые первоначально делится исходный интервал, должно быть не менее трех.

Для реализации метода локализации экстремума в среде MathCAD можно использовать программу, текст которой представлен ниже

```
loc(f, a, b, n, ε) :=
    if n < 3
        "too small number of intervals"
        break
    while b - a > ε
        δ ← (b - a) / n
        for i ∈ 1 .. n + 1
            if i = 1
                xi,1 ← a
                xi,2 ← f(a)
            otherwise
                xi,1 ← xi-1,1 + δ
                xi,2 ← f(xi,1)
        fmin ← x1,2
```

```

      for i ∈ 1 .. rows(s)
        if xi,2 < fmin
          fmin ← xi,2
          k ← i
          s1,1 ← xk-1,1
          s1,2 ← f(s1,1)
          s2,1 ← xk+1,1
          s2,2 ← f(s2,1)
          a ← xk-1,1
          b ← xk+1,1
    s

```

Пример 5.2. Отыскать экстремум функции $\frac{|x-2|+1}{x}$ на интервале $[0,25; 3]$ с точностью 0,001.

$$f(x) := \frac{|x-2|+1}{x}$$

' Уравнение функции

$$a := 0.25$$

' Границы интервала

$$b := 3$$

$$n := 5$$

' Количество подынтервалов

$$\varepsilon := 0.001$$

' Погрешность

$$\text{loc}(f, a, b, n, \varepsilon) = \begin{pmatrix} 2 & 0.5 \\ 2 & 0.5 \end{pmatrix}$$

' Интервал, содержащий экстремум

Экстремум функции находится в точке (2; 0,5).

5.3. Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи

Последовательность чисел Фибоначчи определяется рекуррентным соотношением

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \\ F_0 = F_1 = 1.$$

Если принять, что s – номер числа в последовательности, то последовательность будет иметь следующий вид:

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
F_s	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	144	233

Алгоритм поиска экстремума функции одной переменной имеет вид:

1) Рассчитывается вспомогательное число

$$N = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\varepsilon}.$$

2) Находится число Фибоначчи F_s такое, что

$$F_{s-1} < N \leq F_s.$$

3) Определяется минимальный шаг поиска

$$h_{\min} = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{F_s}.$$

4) Рассчитывается значение исследуемой функции в точке, определяемой соотношением

$$x_1 = x_{\min} + h_{\min} F_{s-2}.$$

5) Рассчитывается значение исследуемой функции в точке, определяемой соотношением

$$x_2 = x_1 + h_{\min} F_{s-3}.$$

6) Если $f(x_2) < f(x_1)$, то вычисляется

$$x_3 = x_2 + h_{\min} F_{s-4}.$$

Если же $f(x_2) > f(x_1)$, то вычисляется

$$x_3 = x_1 - h_{\min} F_{s-4}.$$

7) Аналогично, если $f(x_3) > f(x_2)$, то вычисляется

$$x_4 = x_2 - h_{\min} F_{s-5},$$

иначе

$$x_4 = x_3 + h_{\min} F_{s-5}.$$

И так далее до тех пор, пока не будут исчерпаны все числа Фибоначчи в убывающей последовательности.

Для генерирования последовательности чисел Фибоначчи в среде MathCAD используется следующая запись:

$$Fs := (1 \ 2)^T$$

$$i := 3..40 \quad Fs_i := Fs_{i-1} + Fs_{i-2}$$

Для поиска минимума с помощью метода Фибоначчи в среде MathCAD можно использовать следующую программу:

```

min(f, zn, zk, ε) :=
    N ←  $\frac{zk - zn}{\epsilon}$ 
    for i ∈ 2..rows(Fs)
        if Fsi-1 < N ≤ Fsi
            a ← Fsi
            k ← i
        hm ←  $\frac{zk - zn}{a}$ 
        u1 ← zn + hm·Fsk-2
        u2 ← u1 + hm·Fsk-3
        u3 ← u2 + hm·Fsk-4 if f(u2) < f(u1)
        u3 ← u1 - hm·Fsk-4 otherwise
        for i ∈ 1..k - 5
            ui+3 ← ui+1 - hm·Fsk-(i+4) if f(ui+2) > f(ui+1)
            ui+3 ← ui+2 + hm·Fsk-(i+4) otherwise
    urows(u)

```

Пример 5.3. Найти минимум функции $\frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$ на интервале [0,6; 5] с использованием чисел Фибоначчи.

$$f(x) := \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$$

' Исследуемая функция

$$zn := 0.6 \quad zk := 5$$

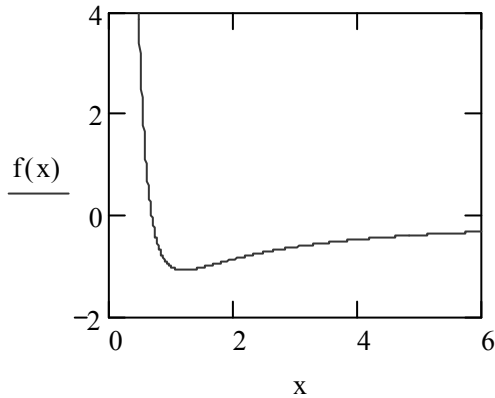
' Границы интервала

$$\epsilon := 0.01$$

' Точность определения

$$\min(f, zn, zk, \epsilon) = 1.256$$

' Абсцисса минимума



Для вычисления максимума функции методом Фибоначчи необходимо в программе заменить знаки между $f(u_2)$ и $f(u_1)$, а также $f(u_{i+2})$ и $f(u_{i+1})$ на противоположные.

5.4. Метод «золотого сечения»

Методом «золотого сечения» могут быть минимизированы или максимизированы только унимодальные функции (рис. 5.2).

«Золотое сечение», открытое Евклидом, представляет собой такое деление отрезка $[a; b]$ точкой x , при котором отношение длины большей части к длине всего отрезка было равно отношению длины меньшей части к большей, т.е.

$$\frac{b-x}{b-a} = \frac{x-a}{b-x} = \tau.$$

Представим отрезок $[a; b]$ в виде совокупности двух отрезков

$$b-a = x-a + b-x. \quad (5.2)$$

Разделим левую и правую части уравнения (5.2) на $(b-a)$, получим

$$\frac{x-a}{b-a} + \frac{b-x}{b-a} = 1.$$

Так как

$$\frac{b-x}{b-a} = \tau \text{ и } \frac{x-a}{b-a} \cdot \frac{b-x}{b-x} = \tau^2,$$

то

$$\tau^2 + \tau = 1.$$

Решив квадратное уравнение, найдем, что $\tau \approx 0,618$.

Для расчетов по методу «золотого сечения» имеются два уравнения

$$x_1 = b - \tau(b - a), \quad (5.3)$$

$$x_2 = a + \tau(b - a). \quad (5.4)$$

Алгоритм метода таков:

1) Задать границы интервала $[a; b]$ и величину погрешности ε . Вычислить x_1 и x_2 по формулам (5.3) – (5.4).

2) Вычислить $f_1 = f(x_1)$ и $f_2 = f(x_2)$.

3) Если $f_1 < f_2$, то x^* находится в интервале $[a; x_2]$, т.е. $b = x_2$. Переопределить точки $x_2 = x_1$, $f_2 = f_1$, пересчитать x_1 по формуле (5.3) и вычислить f_1 . Перейти к п. 4. Если $f_1 > f_2$, то x^* находится в интервале $[x_1; b]$, т.е. $a = x_1$, $x_1 = x_2$, $f_1 = f_2$. Пересчитать x_2 по формуле (5.4) и вычислить f_2 .

4) Проверить условие $|b - a| < \varepsilon$, если оно выполняется, то перейти к п. 5, если не выполняется – перейти к п. 3.

5) Вывести $x^* = \frac{b + a}{2}$.

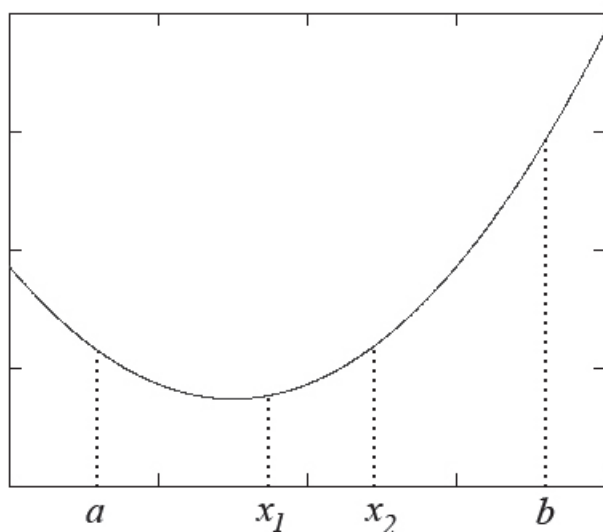


Рис. 5.2. Метод «золотого сечения»

Для реализации метода «золотого сечения» в среде MathCAD можно рекомендовать следующую программу:

$$\text{minZC}(f, a, b, \varepsilon) := \left| \begin{array}{l} x1 \leftarrow b - 0.618 \cdot (b - a) \\ x2 \leftarrow a + 0.618 \cdot (b - a) \\ \text{while } |b - a| > \varepsilon \\ \quad \left| \begin{array}{l} \text{if } f(x1) < f(x2) \\ \quad \left| \begin{array}{l} b \leftarrow x2 \\ x2 \leftarrow x1 \\ x1 \leftarrow b - 0.618 \cdot (b - a) \end{array} \right. \\ \text{otherwise} \\ \quad \left| \begin{array}{l} a \leftarrow x1 \\ x1 \leftarrow x2 \\ x2 \leftarrow a + 0.618 \cdot (b - a) \end{array} \right. \end{array} \right. \\ x \leftarrow \frac{a + b}{2} \end{array} \right.$$

Пример 5.4. Найти минимум функции $\frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$ на интервале $[0,6; 5]$ с использованием метода «золотого сечения».

$f(x) := \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$ ' Уравнение функции

$a := 0.6$ ' Границы интервала

$b := 5$

$\varepsilon := 0.001$ ' Погрешность

$\text{minZC}(f, a, b, \varepsilon) = 1.225$ ' Минимум функции

5.5. Поиск локального экстремума с помощью средств MathCAD

Для поиска локального экстремума функции в MathCAD имеются встроенные функции *Minimize* и *Maximize*.

Синтаксис этих функций таков

$\text{Minimize}(f, x_1, \dots, x_M),$

$\text{Maximize}(f, x_1, \dots, x_M),$

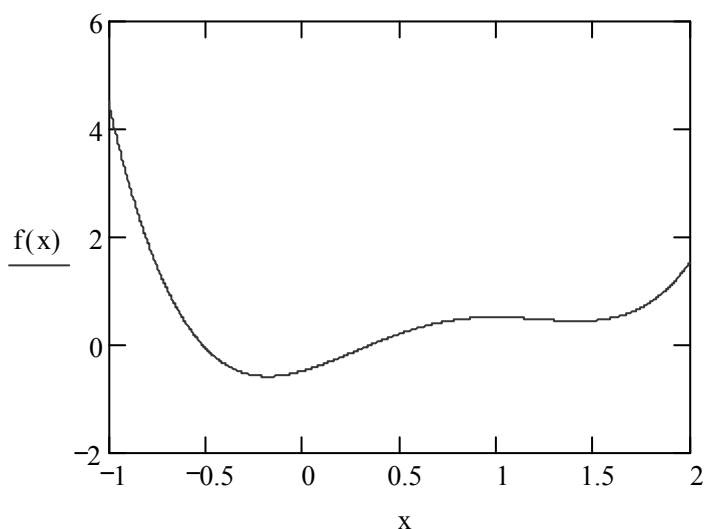
где f – функция; $x_1, \dots, x_M$ – аргументы, по которым производится минимизация (максимизация).

Существенное влияние на результат оказывает выбор начального приближения, в зависимости от этого в качестве ответа выдаются различные локальные экстремумы. Очень удобно сопоставлять начальные приближения с графиками функций.

Пример 5.5. Найти минимум и максимум функции $f(x) = x^4 - 3x^3 + 2x^2 + x - 0,5$.

ORIGIN := 1

$f(x) := x^4 - 3 \cdot x^3 + 2 \cdot x^2 + x - 0.5$



$x := 0$

Minimize(f, x) = -0.175

$x := 1.5$

Maximize(f, x) = 1

5.6. Поиск условного экстремума функции

Если значения аргумента функции ограничены некоторой системой неравенств или уравнений, задающих область определения функции, то экстремум в данном случае будет называться *условным*.

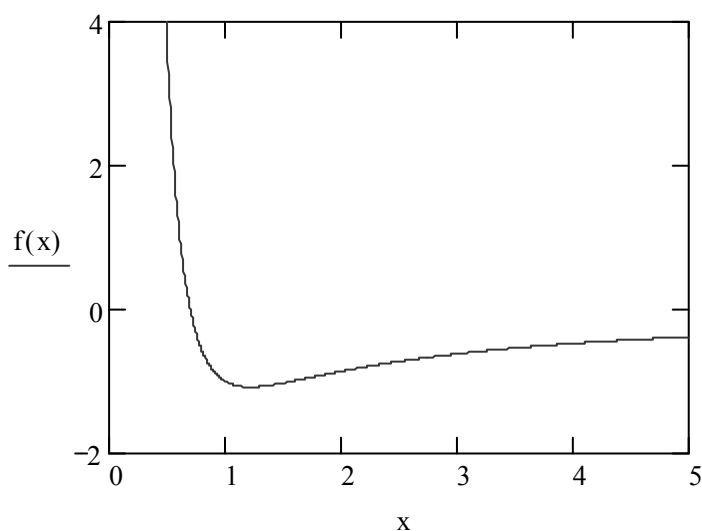
Для поиска условного экстремума функции минимизации и максимизации должны быть включены в вычислительный блок *Given*. Выраже-

ния, задающие ограничения на значения аргумента функции, должны быть записаны сразу после слова *Given*.

Пример 5.6. Найти минимум функции $f(x) = \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$ на интервале $[0,5; 5]$.

ORIGIN := 1

$$f(x) := \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{x^2} - 2 \right)$$



x := 0.5

Given

$0 < x < 5$

Minimize(f, x) = 1.225

5.7. Поиск экстремума функции, заданной таблично

Если требуется определить экстремум функции, уравнение которой неизвестно, а имеются табличные данные, то предварительно необходимо интерполировать эти данные и только затем, ориентируясь на график интерполяционной функции, искать экстремум на каком-либо участке.

Пример 5.7. Найти максимум функции, заданной таблично, на интервале $[0; 4]$.

x	0,5	2,5	3	4	5,1	5,6	8,2	9,9	11	12,5
y	6	5,7	5,2	4,9	5,5	7	7,7	8,2	7,5	6,3

Для интерполирования воспользуемся линейной и сплайн-интерполяцией.

ORIGIN := 1

$x := (0.5 \ 2.5 \ 3 \ 4 \ 5.1 \ 5.6 \ 8.2 \ 9 \ 11 \ 12.5)^T$ 'Исходные данные

$y := (6 \ 5.7 \ 5.2 \ 4.9 \ 5.5 \ 7 \ 7.7 \ 8.2 \ 7.5 \ 6.3)^T$

$t := 0.5, 0.6 \dots 12.5$ ' Шаг интерполяционной функции

$l := \text{lspline}(x, y)$

$p := \text{pspline}(x, y)$ ' Для линейного, квадратичного и кубического сплайнов

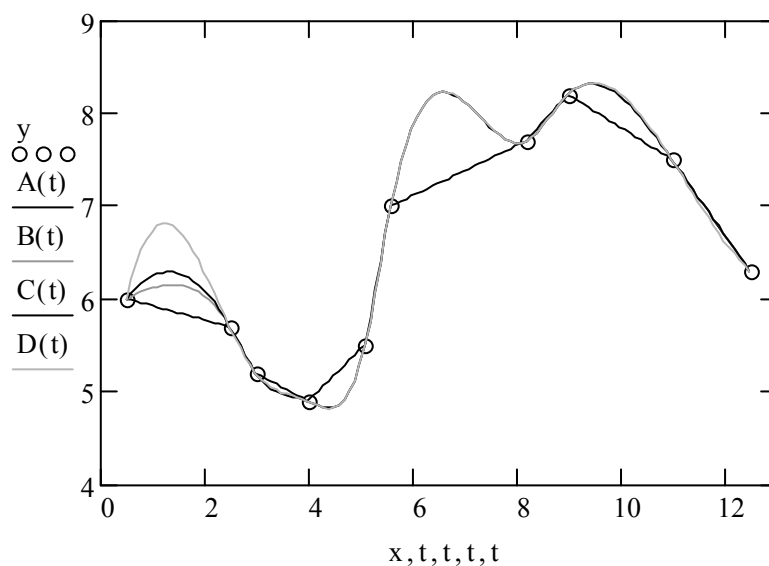
$c := \text{cspline}(x, y)$

$A(t) := \text{linterp}(x, y, t)$

$B(t) := \text{interp}(l, x, y, t)$ ' Задание различных видов интерполяции

$C(t) := \text{interp}(p, x, y, t)$

$D(t) := \text{interp}(c, x, y, t)$



Из графика заметно, что для разных видов интерполяции на интервале $[0; 4]$ максимум неодинаков.

Для отыскания точки максимума воспользуемся методом сканирования, методом Фибоначчи и средствами MathCAD.

$$x0 := \text{xmax}(B, 0, 4, 0.01) \quad x0 = 1.41$$

' Точки максимума

$$x0 := \text{xmax}(C, 0, 4, 0.01) \quad x0 = 1.32$$

$$x0 := \text{xmax}(D, 0, 4, 0.01) \quad x0 = 1.25$$

$$zn := 0 \quad zk := 4$$

' Границы интервала

$$\varepsilon := 0.01$$

' Точность определения

$$\text{max}(B, zn, zk, \varepsilon) = 1.423$$

$$\text{max}(C, zn, zk, \varepsilon) = 1.331$$

' Точки максимума

$$\text{max}(D, zn, zk, \varepsilon) = 1.259$$

$$x := 0.5$$

Given

$$0 < x < 4$$

$$\text{Maximize}(B, x) = 1.413$$

$$\text{Maximize}(C, x) = 1.324$$

$$\text{Maximize}(D, x) = 1.249$$

5.8. Задания к лабораторной работе 5

1) Руководствуясь видом графика функции, найти её экстремум всеми методами и с помощью встроенных средств MathCAD. Уравнения функций приведены в табл. 5.1.

Таблица 5.1

Варианты задания 1

Вариант	Уравнение функции	Вариант	Уравнение функции
1	2	1	2
1	$y = \left \frac{1}{x^2} - 2 \right + \frac{1}{x}$	11	$y = 1 - \sqrt[3]{(x^{-1} - 1)^2}$
2	$y = \left(x^2 - 2 + x \right) x$	12	$y = -x - \sqrt[3]{1 - x}$

Продолжение табл. 5.1

l	2	l	2
3	$y = x^2(x^2 - 2)$	13	$y = \frac{1}{x + \sqrt[3]{1-x}}$
4	$y = \left(\frac{1}{x^2} - \frac{1}{x}\right)\left(\frac{1}{x} + 2\right)$	14	$y = 4x^2 e^x$
5	$y = x x^2 - 2 + x$	15	$y = \frac{ x + \sin x}{x}$
6	$y = x^3(x-1)(x+2)$	16	$y = \frac{1}{x - \ln x}$
7	$y = 2 x^2 + 2x + 2x$	17	$y = 8xe^{-x}$
8	$y = x x^2 + x - x x^2 - 1 $	18	$y = x^2 + x\sqrt[3]{1-x}$
9	$y = x(2x-1)(2-x)(x-3) $	19	$y = \frac{x^2 - 3x}{x^2 + 1} + x$
10	$y = \frac{x}{x^2 + 1}$	20	$y = \frac{1}{x^2} \left(\frac{1}{x} - 2\right)^2$

2) Найти экстремум функции, заданной в табл. 5.2, используя все возможные способы.

Таблица 5.2

Варианты задания 2

Вариант	Исходные данные								
l	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	x	1,00	2,00	4,10	4,20	4,70	5,60	7,10	7,30
	y	6,00	9,10	5,20	3,10	5,50	7,00	7,70	8,20
2	x	0,21	0,42	0,60	0,74	0,80	1,50	1,70	2,00
	y	2,10	4,00	5,20	3,70	2,20	2,00	8,00	7,20
3	x	2,20	4,00	4,50	5,00	8,10	9,70	11,50	12,00
	y	16,0	15,10	14,30	12,10	15,00	15,20	16,10	17,20
4	x	1,30	1,50	2,20	3,10	3,90	4,10	7,70	9,00
	y	3,30	4,70	5,70	6,20	6,70	8,20	8,50	6,30
5	x	4,00	5,00	6,00	8,00	8,50	13,00	14,00	16,00
	y	5,10	4,20	3,30	1,70	5,40	10,5	7,30	7,50
6	x	1,00	1,20	1,50	1,90	2,40	3,00	3,70	4,50
	y	10,20	6,70	5,20	4,30	4,80	5,20	5,30	5,40
7	x	9,20	10,70	12,10	13,10	14,00	15,30	16,00	18,00
	y	10,70	7,30	11,40	8,80	5,40	12,20	10,70	11,20

Продолжение табл. 5.2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
8	x	5,10	5,20	5,40	5,50	5,70	5,80	6,00	6,10
	y	1,70	2,20	3,10	4,40	6,10	3,30	4,50	6,20
9	x	7,00	7,50	8,00	8,60	8,70	9,10	10,50	12,00
	y	1,40	3,40	4,20	7,10	5,90	5,70	5,60	5,40
10	x	1,00	1,30	1,50	2,00	2,20	2,50	3,00	3,40
	y	2,20	3,70	5,60	5,70	6,40	6,10	5,20	5,10
11	x	2,00	4,00	6,00	8,00	11,00	13,00	14,00	16,00
	y	12,00	10,00	7,00	6,00	5,00	7,00	6,00	2,00
12	x	1,00	1,20	1,50	1,70	2,20	2,40	2,50	2,60
	y	2,50	2,60	2,80	3,90	2,70	2,60	2,50	2,40
13	x	3,00	4,10	5,00	5,50	7,00	8,00	9,20	10,10
	y	7,10	7,50	2,10	3,40	4,20	4,70	5,10	6,20
14	x	1,50	1,60	1,70	3,00	3,20	4,50	4,60	4,70
	y	9,10	8,90	8,70	7,10	8,10	9,20	9,40	9,30
15	x	2,70	3,20	3,50	3,80	4,10	4,40	5,10	6,80
	y	1,20	1,70	2,70	3,20	3,40	1,20	1,50	1,20
16	x	1,50	2,50	3,00	3,20	3,70	4,00	4,50	5,00
	y	6,00	4,20	2,20	3,10	3,30	3,20	3,30	3,20
17	x	6,00	7,00	7,40	7,50	8,00	8,50	8,60	9,00
	y	12,20	13,40	15,60	13,20	12,10	11,50	10,20	9,10
18	x	5,20	5,30	5,40	5,50	5,70	5,90	6,00	6,50
	y	7,10	5,20	4,10	6,10	5,30	4,00	5,70	6,20
19	x	7,30	8,00	9,20	12,00	13,40	14,20	17,20	19,00
	y	1,20	3,00	5,20	7,10	6,30	6,10	5,20	4,10
20	x	2,70	3,50	3,60	4,70	5,20	6,70	7,10	8,20
	y	4,00	6,30	7,20	8,00	8,30	8,00	6,10	5,20

3) С помощью методов аппроксимации найти уравнение функции, описанной в табл. 5.2, и найти соответствующие экстремумы аналитически и с помощью рассмотренных численных методов.

4) Ответить на контрольные вопросы.

5.9. Контрольные вопросы

- 1) Каковы необходимые и достаточные условия экстремума?
- 2) В чем состоит аналитический способ отыскания экстремумов функции?
- 3) Дайте определение унимодальной функции.
- 4) В чем заключается основной недостаток метода сканирования?

6. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ

6.1. Численное дифференцирование

Потребность в численном дифференцировании может возникнуть в тех случаях, когда неизвестно аналитическое выражение для исследуемой функции (функция может быть представлена таблично или имеется только лишь её график).

Иногда в связи с громоздкостью математических вычислений удобно заменить аналитическое нахождение производной численным методом.

6.1.1. Разностные формулы

При равномерном распределении точек на исследуемом отрезке для вычисления производной можно использовать разностные формулы. Таких формул всего три:

1) правая разностная производная в точке x_i

$$y_x = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}; \quad (6.1)$$

2) левая разностная производная в точке x_i

$$y_{\bar{x}} = \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}; \quad (6.2)$$

3) центральная разностная производная в точке x_i

$$y_{\dot{x}} = \frac{y_x + y_{\bar{x}}}{2} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}. \quad (6.3)$$

Центральная разностная производная имеет на порядок меньшую погрешность, чем левая и правая, и потому является наиболее точной.

Пример 6.1. Вычислить приближенно производные с помощью разностных формул и сравнить с точными значениями производной функции $y = \sin \pi x$ в точках отрезка $[0; 1]$.

В ячейки A2:A12 вводим значения аргумента в диапазоне от 0 до 1. В ячейку B2 вводим формулу =SIN(3,1415926*A2). Протягиваем до ячейки B12 (рис. 6.1).

В ячейку C3 вводим формулу =(B4-B3)/(A4-A3), протягиваем до ячейки C11. В ячейку D3 вводим формулу =(B3-B2)/(A3-A2), протягиваем

до ячейки D11. В ячейку E3 вводим формулу =(B4-B2)/(A4-A2), протягиваем до ячейки E11.

	A	B	C	D	E	F
1	x _i	y _i	Разностная формула (6.1)	Разностная формула (6.2)	Разностная формула (6.3)	Аналитическая производная
2	0	0				
3	0,1	0,309017	2,78768	3,09017	2,93893	2,98783
4	0,2	0,587785	2,21232	2,78768	2,50000	2,54160
5	0,3	0,809017	1,42040	2,21232	1,81636	1,84658
6	0,4	0,951057	0,48943	1,42040	0,95492	0,97081
7	0,5	1	-0,48943	0,48943	0,00000	0,00000
8	0,6	0,951057	-1,42040	-0,48943	-0,95491	-0,97081
9	0,7	0,809017	-2,21232	-1,42040	-1,81636	-1,84658
10	0,8	0,587785	-2,78768	-2,21232	-2,50000	-2,54160
11	0,9	0,309017	-3,09017	-2,78768	-2,93893	-2,98783
12	1	5,36E-08				

Рис. 6.1. Решение в программе Excel

В ячейку F3 вводим формулу =3,1415926*COS(3,1415926*A3), протягиваем до ячейки F11.

6.1.2. Метод неопределенных коэффициентов

Этот метод предполагает замену дифференцируемой функции $f(x)$ на интерполяционный полином вида

$$\varphi(x) = B_0 + B_1x + B_2x^2 + \dots + B_nx^n.$$

Тогда выражение для производной примет вид

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{d\varphi(x)}{dx} \approx \sum_{i=1}^n B_i f(x_i).$$

Коэффициенты B_i определяются в результате решения системы уравнений

$$\begin{cases} B_0 + B_1 + \dots + B_n = D_0, \\ B_0x_0 + B_1x_1 + \dots + B_nx_n = D_1, \\ B_0x_0^2 + B_1x_1^2 + \dots + B_nx_n^2 = D_2, \\ \dots \\ B_0x_0^n + B_1x_1^n + \dots + B_nx_n^n = D_n, \end{cases}$$

где $D_i = (X^i)' = iX^{i-1}$ для вычисления первой производной, $D_i = (X^i)' = i(i-1)X^{i-2}$ и т.д.

Пример 6.2. Вычислить производную функции $f(x) = (x+1)\sin x$ по значениям, заданным таблично, в точке 2,5, используя метод неопределенных коэффициентов и с помощью аналитического выражения производной.

x	2,00	2,25	2,50	2,75	3,00	3,25	3,50	3,75	4,00
$f(x)$	2,728	2,529	2,095	1,431	0,564	-0,460	-1,579	-2,715	-3,784

$$f(x) := \sin(x) \cdot (x + 1)$$

' Дифференцируемая функция

$$g(x) := \frac{d}{dx} f(x)$$

$$x := (2. \ 2.25 \ 2.5 \ 2.75 \ 3 \ 3.25 \ 3.5 \ 3.75 \ 4)^T$$

$$y := (2.728 \ 2.529 \ 2.095 \ 1.431 \ 0.564 \ -0.46 \ -1.579 \ -2.715 \ -3.784)^T$$

$$m := \text{rows}(x) - 1$$

$$i := 0..m$$

$$n := 0..m$$

$$X := 2.5$$

' Точка, в которой ищется производная

$$D_n := n \cdot X^{n-1}$$

$$W_{i,n} := (x_n)^i$$

$$B := \text{lsolve}(W, D)$$

$$D' := \sum_i (B_i \cdot y_i)$$

$$D' = -2.207$$

' Значение производной по методу неопределенных коэффициентов

$$g(X) = -2.206$$

' Значение производной по аналитическому выражению

6.1.3. Дифференцирование встроенными средствами MathCAD

Для того чтобы вычислить производную любого порядка от функции, заданной таблично, необходимо сначала провести процедуру интерполяции функции наиболее подходящим образом.

Пример 6.3. Вычислить производную первого и второго порядков в точке 2,5 от функции, заданной в примере 6.2.

$$x := (2. \ 2.25 \ 2.5 \ 2.75 \ 3 \ 3.25 \ 3.5 \ 3.75 \ 4)^T$$

$$y := (2.728 \ 2.529 \ 2.095 \ 1.431 \ 0.564 \ -0.46 \ -1.579 \ -2.715 \ -3.784)^T$$

$$A(t) := \text{interp}(x, y, t) \quad \text{' Линейная интерполяция}$$

$$l := \text{lspline}(x, y) \quad B(t) := \text{interp}(l, x, y, t)$$

$$p := \text{pspline}(x, y) \quad C(t) := \text{interp}(p, x, y, t) \quad \text{' Сплайн-интерполяция}$$

$$c := \text{cspline}(x, y) \quad D(t) := \text{interp}(c, x, y, t)$$

$$X := 2.5 \quad \text{' Точка, в которой вычисляется производная}$$

$$\frac{d}{dX} A(X) = -2.196$$

' Производные для линейно интерполированной функции

$$\frac{d^2}{dX^2} A(X) = -5.217 \times 10^{-6}$$

$$\frac{d}{dX} B(X) = -2.225$$

' Производные для функции, интерполированной линейными сплайнами

$$\frac{d^2}{dX^2} B(X) = -3.487$$

$$\frac{d}{dX} C(X) = -2.206$$

' Производные для функции, интерполированной квадратичными сплайнами

$$\frac{d^2}{dX^2} C(X) = -3.756$$

$$\frac{d}{dX} D(X) = -2.206$$

' Производные для функции, интер-
полированной кубическими
сплайнами

$$\frac{d^2}{dX^2} D(X) = -3.756$$

6.2. Численное интегрирование

Для вычисления определенных интегралов по формуле Ньютона-Лейбница

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

необходимо для подынтегральной функции $f(x)$ найти первообразную $F(x)$. Если же первообразную вычислить невозможно или вычисления слишком сложны, то удобно применять численные методы интегрирования. Применение численного интегрирования незаменимо также при вычислении интеграла от функции, заданной таблично.

6.2.1. Формулы прямоугольников

Формулы прямоугольников получаются заменой подынтегральной функции постоянным значением. В качестве такого значения выбирают значение функции в одной из точек отрезка $[a; b]$: на левом конце (рис. 6.2, а), правом конце (рис. 6.2, б) или в середине отрезка (рис. 6.2, в).

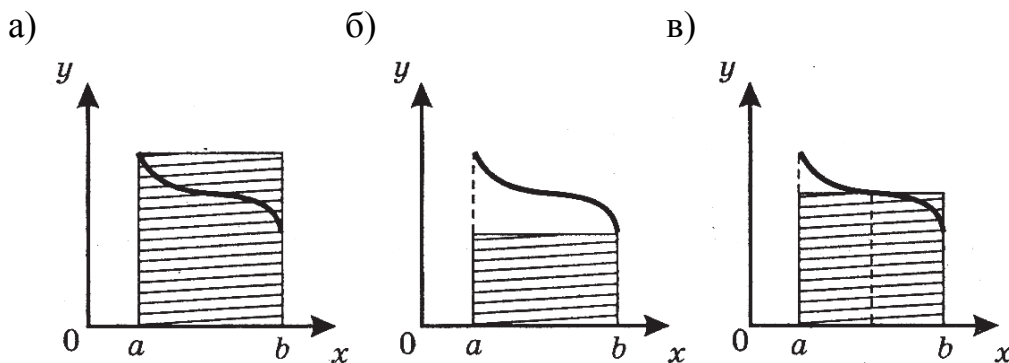


Рис. 6.2. Формулы прямоугольников

Формула левых прямоугольников

$$\int_a^b y(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} y_i h. \quad (6.4)$$

Формула правых прямоугольников

$$\int_a^b y(x)dx \approx \sum_{i=1}^n y_i h.$$

Формула средних прямоугольников

$$\int_a^b y(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} y\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)h.$$

Пример 6.4. Вычислить интеграл функции $f(x)=e^{x^2}$ на интервале $[0; 1]$ с использованием формул прямоугольников, разбивая интервал на 10 подынтервалов.

ORIGIN := 1

$f(x) := e^{x^2}$

'Подынтегральная функция

a := 0 b := 1

'Границы интервала
интегрирования

n := 10

'Количество интервалов

x := $\left\{ \begin{array}{l} x_1 \leftarrow a \\ \text{for } i \in 2..n+1 \\ \quad x_i \leftarrow x_{i-1} + \frac{b-a}{n} \\ x \end{array} \right.$

	1
1	0
2	0.1
3	0.2
4	0.3
5	0.4
6	0.5
7	0.6
8	0.7
9	0.8
10	0.9
11	1

x =

'Изменение аргумента

$$\sum_{i=1}^n \left(f(x_i) \cdot \frac{b-a}{n} \right) = 1.381261$$

'Формула левых прямоугольников

$$\sum_{i=2}^{n+1} \left(f(x_i) \cdot \frac{b-a}{n} \right) = 1.553089$$

'Формула правых прямоугольников

$$\sum_{i=1}^n \left(f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \cdot \frac{b-a}{n} \right) = 1.460393$$

'Формула центральных
прямоугольников

$$\int_a^b f(x) dx = 1.462652$$

' Аналитическое
интегрирование

6.2.2. Формула трапеций

Геометрический смысл формулы трапеций (рис. 6.3) заключается в том, что кривая $y = y(x)$ заменяется отрезком прямой, проходящей через точки (x_0, y_0) и (x_1, y_1) , или, в других обозначениях, $(a, y(a))$ и $(b, y(b))$.

Формула трапеций имеет вид:

$$\int_a^b y(x) dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right),$$

$$h = \frac{b - a}{n}.$$

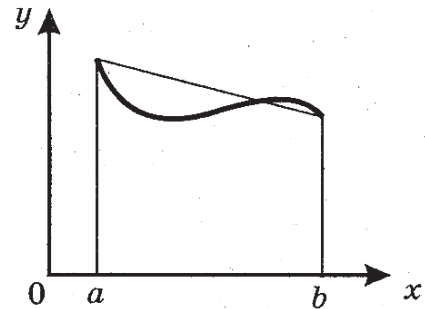


Рис. 6.3. Формула трапеций

Пример 6.5. Вычислить интеграл функции $f(x) = \frac{1}{x}$ на интервале $[1; 2]$ с использованием формулы трапеций, разбивая интервал на 10 и 100 подынтервалов.

ORIGIN := 1

$$f(x) := \frac{1}{x}$$

'Подынтегральная функция

$$a := 1 \quad b := 2$$

'Границы интервала
интегрирования

$$n := 10$$

'Количество интервалов

$$x := \begin{cases} x_1 \leftarrow a \\ \text{for } i \in 2..n+1 \\ x_i \leftarrow x_{i-1} + \frac{b-a}{n} \\ x \end{cases}$$

x =

	1
1	1
2	1.1
3	1.2
4	1.3
5	1.4
6	1.5
7	1.6
8	1.7
9	1.8
10	1.9
11	2

'Изменение аргумента

$$\left(\frac{f(x_1) + f(x_{n+1})}{2} + \sum_{i=1}^n f(x_i) \right) \cdot \frac{b-a}{n} = 0.793771 \quad \text{'Формула трапеций}$$

$n := 300$

'Количество интервалов

$x :=$ $\left| \begin{array}{l} x_1 \leftarrow a \\ \text{for } i \in 2..n+1 \\ \quad x_i \leftarrow x_{i-1} + \frac{b-a}{n} \\ \quad x \end{array} \right.$

$x =$

	1
1	1
2	1.003
3	1.007
4	1.01
5	1.013
6	1.017
7	1.02
8	1.023
9	...

'Изменение аргумента

$$\left(\frac{f(x_1) + f(x_{n+1})}{2} + \sum_{i=1}^n f(x_i) \right) \cdot \frac{b-a}{n} = 0.696481 \quad \text{'Формула трапеций}$$

Аналитическое выражение

$$\int_1^2 \frac{1}{x} = \ln x \Big|_1^2 = \ln 2 - \ln 1 = 0.693147.$$

С увеличением числа подынтервалов, на которые разбивается интервал интегрирования, точность численного интегрирования возрастает.

6.2.3. Формула Симпсона

Геометрический смысл *формулы Симпсона* заключается в том, что кривая $y = y(x)$ заменяется частью параболы, проходящей через три точки (x_0, y_0) , (x_1, y_1) и (x_2, y_2) (рис.6.4).

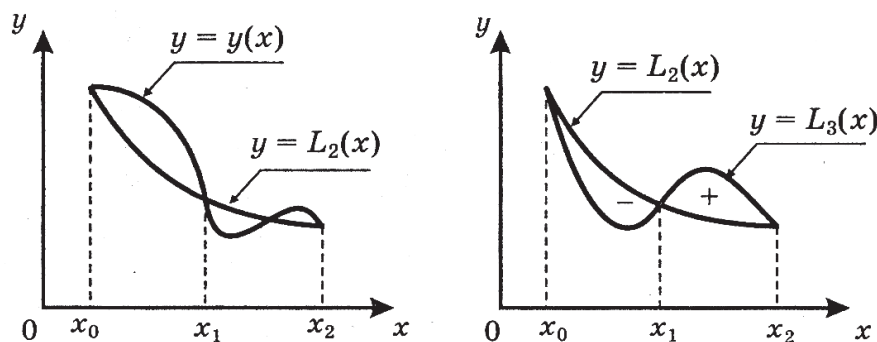


Рис. 6.4. Формула Симпсона

Общая формула Симпсона строится для четного $n = 2m$; и имеет вид

$$\int_a^b y(x)dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 2y_{2m+2} + 4y_{2m-1} + y_{2m}).$$

Пример 6.6. Вычислить интеграл функции $f(x) = \frac{1}{x}$ на интервале $[1; 2]$ с использованием формулы Симпсона, разбивая интервал на 10 подынтервалов.

ORIGIN := 1

f(x) := $\frac{1}{x}$

'Подынтегральная функция

a := 1 b := 2

'Границы интервала
интегрирования

n := 10

'Количество интервалов

x := $\left| \begin{array}{l} x_1 \leftarrow a \\ \text{for } i \in 2 \dots n+1 \\ \quad x_i \leftarrow x_{i-1} + \frac{b-a}{n} \\ x \end{array} \right.$

x =

	1
1	1
2	1.1
3	1.2
4	1.3
5	1.4
6	1.5
7	1.6
8	1.7
9	1.8
10	1.9
11	2

'Изменение аргумента

c := $\left| \begin{array}{l} i \leftarrow 1 \\ \text{while } i \leq n-1 \\ \quad \left| \begin{array}{l} a_i \leftarrow 4 \\ a_{i+1} \leftarrow 2 \\ i \leftarrow i+2 \end{array} \right. \\ a \end{array} \right.$

'Коэффициенты формулы Симпсона

$$\frac{b-a}{3 \cdot n} \left[f(x_1) + f(x_{n+1}) + \sum_{i=1}^{n-1} (c_i \cdot f(x_{i+1})) \right] = 0.69315$$

'Формула Симпсона

6.2.4. Метод неопределенных коэффициентов

Применение метода неопределенных коэффициентов идентично применению его к дифференцированию

Пример 6.7. Вычислить интеграл функции, заданной таблично, на интервале [1; 2] с использованием метода неопределенных коэффициентов.

x	1,000	1,100	1,200	1,300	1,400	1,500	1,600	1,700	1,800	1,900	2,000
y	1,000	0,909	0,833	0,769	0,714	0,667	0,625	0,588	0,556	0,526	0,500

$$x := (1 \ 1.1 \ 1.2 \ 1.3 \ 1.4 \ 1.5 \ 1.6 \ 1.7 \ 1.8 \ 1.9 \ 2)^T$$

$$y := (1 \ 0.909 \ 0.833 \ 0.769 \ 0.714 \ 0.667 \ 0.625 \ 0.588 \ 0.556 \ 0.526 \ 0.5)^T$$

$$a := 1 \quad b := 2$$

$$m := \text{rows}(x) - 1$$

$$i := 0..m$$

$$n := 0..m$$

$$W_{i,n} := (x_n)^i$$

$$D_i := \frac{b^{i+1} - a^{i+1}}{i+1}$$

$$B := \text{lsolve}(W, D)$$

$$I := \sum_i (B_i \cdot y_i) \quad I = 0.693$$

6.2.5. Интегрирование с помощью встроенных средств MathCAD

Для интегрирования функции, заданной таблично, её нужно сначала интерполировать наиболее подходящим способом.

Пример 6.8. Вычислить интеграл функции, заданной в примере 6.7, на интервале [1; 2] с использованием встроенных средств MathCAD.

$$x := (1 \ 1.1 \ 1.2 \ 1.3 \ 1.4 \ 1.5 \ 1.6 \ 1.7 \ 1.8 \ 1.9 \ 2)^T$$

$$y := (1 \ 0.909 \ 0.833 \ 0.769 \ 0.714 \ 0.667 \ 0.625 \ 0.588 \ 0.556 \ 0.526 \ 0.5)^T$$

$$a := 1 \quad b := 2$$

$$A(t) := \text{linterp}(x, y, t) \quad \text{' Линейная интерполяция}$$

$$l := \text{lspline}(x, y) \quad B(t) := \text{interp}(l, x, y, t)$$

$$p := \text{pspline}(x, y) \quad C(t) := \text{interp}(p, x, y, t) \quad \text{' Сплайн-интерполяция}$$

$$c := \text{cspline}(x, y) \quad D(t) := \text{interp}(c, x, y, t)$$

$$\int_a^b A(x) dx = 0.69372$$

$$\int_a^b B(x) dx = 0.69312$$

$$\int_a^b C(x) dx = 0.69307$$

$$\int_a^b D(x) dx = 0.69306$$

6.3. Задания к лабораторной работе 6

1) Вычислить первую производную функции, заданной таблично, используя разностные формулы, метод неопределенных коэффициентов и встроенные средства MathCAD. Варианты задания приведены в табл. 6.1.

2) Вычислить определенный интеграл с точностью ε методами прямоугольников, трапеций и Симпсона. Варианты задания приведены в табл. 6.2.

3) Вычислить интеграл от функции $y = f(x)$, заданной в табл. 6.3, методом неопределенных коэффициентов и встроенными средствами MathCAD.

4) Ответить на контрольные вопросы.

Таблица 6.1

Варианты задания 1

x_i	Значения y_i														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	-0,4	-6,0	-0,8	-0,5	1,9	-1,8	-6,7	1,0	-3,0	0,0	1,0	-3,0	0,0	1,0	-3,0
0,1	0,2	-5,1	-0,6	-0,3	0,7	0,6	-5,2	1,0	-2,7	0,1	0,5	-1,5	0,5	1,0	-2,7
0,2	0,7	-4,2	-0,4	-0,2	-1,8	-1,5	-3,1	0,9	-2,4	0,2	-0,4	0,0	0,8	0,9	-2,4
0,3	1,0	-3,3	-0,1	0,0	-1,0	0,3	-0,8	0,8	-2,1	0,3	-1,0	1,5	1,0	0,8	-2,1
0,4	0,9	-2,4	0,2	0,1	1,7	-1,1	1,6	0,7	-1,8	0,4	-0,7	3,0	0,9	0,7	-1,8
0,5	0,5	-1,5	0,5	0,2	1,2	-0,1	3,8	0,5	-1,5	0,5	0,3	4,5	0,6	0,5	-1,5
0,6	0,0	-0,6	0,7	0,4	-1,5	-0,7	5,7	0,4	-1,2	0,6	1,0	6,0	0,1	0,4	-1,2
0,7	-0,6	0,3	0,9	0,5	-1,4	-0,5	7,1	0,2	-0,9	0,6	0,8	7,5	-0,4	0,2	-0,9
0,8	-0,9	1,2	1,0	0,6	1,3	-0,3	7,9	0,0	-0,6	0,7	-0,1	9,0	-0,8	0,0	-0,6
0,9	-1,0	2,1	1,0	0,8	1,6	-0,9	7,9	-0,2	-0,3	0,8	-0,9	10,5	-1,0	-0,2	-0,3
1,0	-0,7	3,0	0,9	0,8	-1,1	0,1	7,3	-0,4	0,0	0,9	-0,8	12,0	-1,0	-0,4	0,0

Таблица 6.2

Варианты задания 2

Вариант	Интеграл	ε
1	$\int_1^2 \frac{\sin x + x}{x} dx$	0,001
2	$\int_1^3 \frac{\sin 2x + e^{-x}}{x} dx$	0,0001
3	$\int_1^2 \frac{1}{x^2 + \ln(1 + x^2)} dx$	0,01
4	$\int_{-1}^2 \left \sin \sqrt{x^2 + x^4} \right dx$	0,001
5	$\int_1^{1,4} \frac{\sin x + x}{\operatorname{tg} \sqrt{x}} dx$	0,0001
6	$\int_1^2 \frac{x + \sqrt[4]{x}}{\sqrt{x+1}} dx$	0,01
7	$\int_1^2 \frac{(\sin 2^x)}{x^2 + 2} dx$	0,001
8	$\int_0^2 \frac{x+1}{2 + \ln(1 + x^2)} dx$	0,0001
9	$\int_{-1}^2 \left x - \sin \sqrt{x^3 + 1} \right dx$	0,01
10	$\int_{1,1}^{3,4} \frac{\sin^2 x}{\lg \sqrt{x}} dx$	0,001

Продолжение табл. 6.2

Вариант	Интеграл	ϵ
11	$\int_1^2 \frac{\sin^{-2} 2x^2 + 1}{x^{2,7}} dx$	0,0001
12	$\int_1^3 \frac{\sin^{1,4} x}{x^{3,2}} dx$	0,01
13	$\int_1^2 \frac{1 - \lg x}{2 + \ln(1 + x^2)} dx$	0,001
14	$\int_{-1}^2 x - \sqrt{x^2 + x^4} dx$	0,0001
15	$\int_1^{1,4} \frac{\sin x}{\lg \sqrt{x+2}} dx$	0,01
16	$\int_1^2 \frac{\cos x + \sqrt[4]{x}}{\sqrt{x+1}} dx$	0,001
17	$\int_1^3 \frac{\sin(3^{-x})}{x+1} dx$	0,0001
18	$\int_1^2 \frac{\cos x + 1}{2 + \ln(1 + \sin x^2)} dx$	0,01
19	$\int_{-1}^2 \sin^{1,5} \sqrt{x^3 + 1} dx$	0,001
20	$\int_1^{3,4} \frac{\cos^2 x}{2 + \lg \sqrt{x}} dx$	0,0001

Таблица 6.3

Варианты задания 3

x_i	Значения y_i														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	-0,4	-6,0	-0,8	-0,5	1,9	-1,8	-6,7	1,0	-3,0	0,0	1,0	-3,0	0,0	1,0	-3,0
0,1	0,2	-5,1	-0,6	-0,3	0,7	0,6	-5,2	1,0	-2,7	0,1	0,5	-1,5	0,5	1,0	-2,7
0,2	0,7	-4,2	-0,4	-0,2	-1,8	-1,5	-3,1	0,9	-2,4	0,2	-0,4	0,0	0,8	0,9	-2,4
0,3	1,0	-3,3	-0,1	0,0	-1,0	0,3	-0,8	0,8	-2,1	0,3	-1,0	1,5	1,0	0,8	-2,1
0,4	0,9	-2,4	0,2	0,1	1,7	-1,1	1,6	0,7	-1,8	0,4	-0,7	3,0	0,9	0,7	-1,8
0,5	0,5	-1,5	0,5	0,2	1,2	-0,1	3,8	0,5	-1,5	0,5	0,3	4,5	0,6	0,5	-1,5
0,6	0,0	-0,6	0,7	0,4	-1,5	-0,7	5,7	0,4	-1,2	0,6	1,0	6,0	0,1	0,4	-1,2
0,7	-0,6	0,3	0,9	0,5	-1,4	-0,5	7,1	0,2	-0,9	0,6	0,8	7,5	-0,4	0,2	-0,9
0,8	-0,9	1,2	1,0	0,6	1,3	-0,3	7,9	0,0	-0,6	0,7	-0,1	9,0	-0,8	0,0	-0,6
0,9	-1,0	2,1	1,0	0,8	1,6	-0,9	7,9	-0,2	-0,3	0,8	-0,9	10,5	-1,0	-0,2	-0,3
1,0	-0,7	3,0	0,9	0,8	-1,1	0,1	7,3	-0,4	0,0	0,8	-0,8	12,0	-1,0	-0,4	0,0

6.4. Контрольные вопросы

- 1) Дайте определение и разъясните физический и геометрический смысл производной.
- 2) В чем суть разностных формул?
- 3) Можно ли использовать разностные формулы при неравномерном распределении точек?
- 4) В чем геометрический смысл формул прямоугольников, трапеций и Симпсона?

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вычислительные задачи, с которыми сталкиваются студенты химико-технологических специальностей и направлений, подчас не удается решить аналитическими методами, а иногда, ввиду невысоких требований к точности вычислений, использовать сложные аналитические процедуры нецелесообразно. В таких случаях удобно использовать методы вычислительной математики.

В настоящем пособии рассмотрены наиболее полезные в расчетной практике численные методы. Каждый раздел снабжен большим количеством примеров, демонстрирующих возможность прикладных компьютерных программ, позволяющих сэкономить время на расчет и повысить его точность.

Пособие адресовано студентам старших курсов и может быть ими использовано при курсовом и дипломном проектировании, выполнении лабораторных и расчетно-графических заданий.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. **Соболь, Б. В.** Практикум по вычислительной математике / Б. В. Соболь, Б. Ч. Месхи, И. М. Пешхоев. – Ростов н/Д : Феникс, 2008. – 342 с.
2. **Киреев, В. И.** Численные методы в примерах и задачах / В. И. Киреев, А. В. Пантелеев. – М. : Высшая школа, 2006. – 480 с.
3. **Ракитин, В. И.** Руководство по методам вычислений и приложения MATHCAD / В. И. Ракитин. – М. : Физматлит, 2005. – 264 с.
4. **Кирьянов, Д. В.** Mathcad 13 / Д. В. Кирьянов. – СПб : БХВ-Петербург, 2006. – 608 с.
5. **Гартман, Т. Н.** Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М. : ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
6. **Бронштейн, И. Н.** Справочник по математике / И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев. – М. : ГИФМЛ, 1962. – 610 с.
7. **Ахназарова, С. Л.** Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии : учеб. пособие для хим.-технол. вузов / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – М. : Высш. школа, 1978. – 319 с.
8. **Старков, С. Н.** Справочник по математическим формулам и графикам для студентов / С. Н. Старков. – СПб. : Питер, 2008. – 235 с.
9. **Пирумов, У. Г.** Численные методы : учеб. пособие для студ. вузов / У. Г. Пирумов. – М. : Дрофа, 2004. – 224 с.
10. **Киселева, Е. В.** Сборник примеров и задач по физической химии : учеб. пособие для хим.-технол. вузов / Е. В. Киселева, Г. С. Каретников, И. В. Кудряшов. – М. : Высш. шк., 1983. – 456 с.

Учебное издание

Моисеев Андрей Владимирович

ОСНОВНЫЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
Компьютерный практикум

Учебное пособие

Научный редактор канд. техн. наук, доцент Г. М. Гринфельд

Редактор Е.О. Колесникова

Подписано в печать 24.01.2012

Формат 60 × 84 1/16. Бумага 80 г/м². Ризограф FR3950EP-α

Усл. печ. л. 5,80. Уч.-изд. л. 5,50. Тираж 100. Заказ 24549.

Редакционно-издательский отдел

Федерального государственного бюджетного образовательного

учреждения высшего профессионального образования

«Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет»

681013, Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27.

Полиграфическая лаборатория

Федерального государственного бюджетного образовательного

учреждения высшего профессионального образования

«Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет»

681013, Комсомольск-на-Амуре, пр. Ленина, 27.