

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

О.Е. Мойзес, Е.А. Кузьменко

УГЛУБЛЕННЫЙ КУРС ИНФОРМАТИКИ

*Рекомендовано в качестве учебного пособия
Редакционно-издательским советом
Томского политехнического университета*

Издательство
Томского политехнического университета
2014

УДК 004(075.8)
ББК 32.973я73
М74

Мойзес О.Е.

М74 Углубленный курс информатики: учебное пособие / О.Е. Мойзес, Е.А. Кузьменко; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 158 с.

Пособие содержит основные сведения о численных методах. Излагаемый материал сопровождается большим количеством примеров вычислений и обработки опытных данных. Приведены примеры и алгоритмы для решения химических задач на ЭВМ с применением численных методов, а также программы на языке Паскаль. В сжатой форме описана технология работы с программой Microsoft Excel, рассматриваются различные варианты выполнения действий с табличными данными Excel.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлениям «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», «Химическая технология» и «Биотехнология».

УДК 004(075.8)
ББК 32.973я73

Рецензенты

Доктор технических наук, профессор ТУСУРа
С.В. Смирнов

Кандидат технических наук,
старший научный сотрудник Института химии нефти СО РАН
Н.В. Юдина

© ФГБОУ ВПО НИ ТПУ, 2014
© Мойзес О.Е., Кузьменко Е.А., 2014
© Оформление. Издательство Томского
политехнического университета, 2014

ВВЕДЕНИЕ

Инженеров-химиков математика интересует не сама по себе, а как средство решения конкретных инженерных задач. Например, определение максимального выхода продукта в химическом реакторе. Один из способов решения – эксперимент. Можно построить установку, реактор, технологическую линию и затем измерить интересующие нас параметры. Если результат получится неудачным, то проект изменяется, создаются новые объекты. Необходимый результат будет достигнут слишком медленным и дорогим способом.

Иной способ решения – математический анализ объекта или явления. Но такой анализ применяется не к реальным процессам и явлениям, а к математическим моделям этих объектов и явлений [1].

Математическая модель химико-технологического процесса (ХТП) – это совокупность математических структур (уравнений, неравенств и т. д.), адекватно описывающая исследуемые свойства объекта.

Математическое моделирование ХТП – исследование свойств процессов на математических моделях с целью предсказания результатов его протекания в реальных условиях.

Метод математического моделирования включает в себя следующие этапы:

1. Формирование математической модели объекта (уравнения материального и теплового балансов ХТП).
2. Выбор метода решения полученной системы уравнений, формирование алгоритма и программы решения задачи. Выполнение расчетов на ЭВМ.
3. Установление адекватности модели изучаемому процессу.
4. Рекомендации по наиболее эффективному проведению исследуемого процесса.

Для некоторых математических описаний удастся получить аналитическое решение. Однако большинство практических задач в химии и химической технологии не имеют аналитического решения. Основными методами решения этих задач являются численные методы, которые позволяют добиться хорошего количественного описания явления или процесса. Реализация численных методов требует большого объема вычислений. Поэтому применение методов вычислительной математики возможно лишь при наличии современных быстродействующих компьютеров.

1. ПРИБЛИЖЕННЫЕ ЧИСЛА

1.1. Абсолютная и относительная погрешности

Приближенным числом a называется число, которое незначительно отличается от точного значения A и заменяющее последнее в вычислениях [2–5]. Под *ошибкой* или *погрешностью Δa* приближенного числа a обычно понимают разность между соответствующим точным числом и приближенным, т. е.

$$\Delta a = A - a.$$

Если $A > a$, то ошибка положительная: $\Delta a > 0$; если же $A < a$, то ошибка отрицательная: $\Delta a < 0$. В некоторых случаях знак ошибки неизвестен. В этом случае целесообразно пользоваться *абсолютной погрешностью приближенного числа*

$$\Delta = |\Delta a|.$$

Определение 1. *Абсолютной погрешностью Δ* приближенного числа a называется абсолютная величина разности между соответствующим точным числом A и числом a , т. е.

$$\Delta = |A - a|. \quad (1.1)$$

На практике часто число A нам неизвестно, и следовательно, мы не можем определить абсолютную погрешность Δ по формуле (1.1). В этом случае вводят ее оценку сверху, так называемую *предельную абсолютную погрешность*.

Определение 2. *Под предельной абсолютной погрешностью* приближенного числа понимается всякое число, не меньшее абсолютной погрешности этого числа. Таким образом, если Δ_a – предельная абсолютная погрешность приближенного числа a , заменяющего точное A , то

$$\Delta = |A - a| \leq \Delta_a. \quad (1.2)$$

Следовательно, точное число A заключено в границах

$$a - \Delta_a \leq A \leq a + \Delta_a. \quad (1.3)$$

В этом случае для краткости пользуются записью

$$A = a \pm \Delta_a.$$

Пример 1.1. Определить предельную абсолютную погрешность числа $=3,14$, заменяющего число π .

Решение. Поскольку имеет место неравенство $3,14 < \pi < 3,15$, то $|a - \pi| < 0,01$ и следовательно, можно принять $\Delta_a = 0,01$. Однако если учесть, что $3,14 < \pi < 3,142$, то будем иметь лучшую оценку: $\Delta_a = 0,002$.

Сформулированное выше понятие предельной абсолютной погрешности является весьма широким, а именно: *под предельной абсолютной погрешностью приближенного числа a понимается любой представитель бесконечного множества неотрицательных чисел Δ_a , удовлетворяющих неравенству (1.2)*. Логически вытекает, что всякое число, большее абсолютной погрешности данного приближенного числа, также может быть названо предельной абсолютной погрешностью этого числа.

В записи числа, полученного в результате измерения, обычно отмечают его предельную абсолютную погрешность. Например, если длина отрезка $l = 215$ см с точностью до 0,5 см, то пишут $l = 215 \text{ м} \pm 0,5 \text{ см}$. Здесь предельная абсолютная погрешность $\Delta_l = 0,5$ см, а точная величина длины l отрезка заключена в границах $214,5 \text{ см} \leq l \leq 215,5 \text{ см}$.

Абсолютная погрешность недостаточна для характеристики точности измерения или вычисления. Для точности данных измерений существенна абсолютная погрешность, приходящаяся на единицу длины, которая носит название *относительной погрешности*.

Определение 3. *Относительной погрешностью δ числа a называется отношение абсолютной погрешности Δ к приближенному значению этого числа:*

$$\delta = \frac{\Delta}{|A|}. \quad (1.4)$$

Отсюда $\Delta = |A| \delta$.

Определение 4. *Предельной относительной погрешностью δ_a приближенного числа a называется всякое число, не меньшее относительной погрешности этого числа:*

$$\delta \leq \delta_a, \quad (1.5)$$

т. е.
отсюда $\Delta / |A| \leq \delta_a$
 $\Delta \leq |A| \cdot \delta_a$

Таким образом, за предельную абсолютную погрешность числа a принимаем

$$\Delta_a = |A| \delta_a. \quad (1.6)$$

Поскольку на практике $A \approx a$, то вместо формулы (1.6) часто пользуются следующей формулой:

$$\Delta_a = |a| \delta_a. \quad (1.7)$$

Отсюда, зная предельную погрешность δ_a , можно получить границы для точного числа. То обстоятельство, что точное число лежит между $a(1 - \delta_a)$ и $a(1 + \delta_a)$, записывают так:

$$A = a(1 \pm \delta_a).$$

Пример 1.2. Масса 1 л воды при $0^\circ\text{C} = 999,847 \pm 0,001$ г. Определить относительную погрешность результата взвешивания.

Решение. Очевидно, что $\Delta = 0,001$ г. Следовательно, $\delta_p = 0,001 / 999,847 \approx \approx 10^{-4} \%$.

Пример 1.3. При определении газовой постоянной для воздуха получено $R = 29,25$. Зная, что относительная погрешность этого измерения равна $0,1 \%$, найти пределы, в которых заключается R .

Решение. Имеем $\delta_R = 0,001$, тогда $\Delta = R\delta_R \approx 0,03$. Следовательно, $29,22 \leq R \leq 29,28$.

1.2. Основные источники погрешностей

Погрешности, встречающиеся в математических задачах, могут быть разбиты на пять групп [2–5].

1. Погрешности, связанные с постановкой математической задачи. Как правило, при изучении тех или иных природных явлений мы вынуждены принимать некоторые упрощающие задачу условия, что вызывает ряд погрешностей (*погрешности задачи*).

Иногда бывает и так, что решить задачу в точной постановке трудно или вообще невозможно. В этом случае ее заменяют близкой по результатам приближенной задачей. При этом возникает погрешность, которую можно назвать *погрешностью метода*.

2. Погрешность, связанная с наличием бесконечных процессов в математическом анализе. Функции, фигурирующие в математических формулах, часто задаются в виде бесконечных рядов или последовательностей, например $\left(\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots \right)$. Поскольку бес-

конечный процесс не может быть завершён в конечное число шагов, то мы вынуждены остановиться на некотором члене последовательности, считая его приближением к искомому решению. Такой обрыв процесса вызывает погрешность, называемую обычно *остаточной погрешностью*.

3. Погрешность, связанная с наличием в математических формулах параметров, значения которых могут быть определены лишь приближенно. Например, все физические константы. Условно назовем эту погрешность – *начальной*.

4. Погрешность, связанная с действиями над приближенными числами (*погрешности действий*). Понятно, что, производя вычисления с приближенными числами, мы в какой-то мере переносим погрешности исходных данных на результат вычислений. В этом отношении погрешности действий являются *неустраняемыми*.

5. Погрешность, связанная с системой счисления. При изображении рациональных чисел в десятичной или другой системе справа от запятой может быть бесконечное число цифр. При вычислениях можно использовать лишь конечное число этих цифр. Так возникает *погрешность округления*. Например, полагая $1/3 = 0,333$, получаем погрешность $\Delta \approx 3 \cdot 10^{-4}$. Приходится также округлять конечные числа, имеющие большое количество знаков.

При решении конкретных задач для анализа погрешностей следует учитывать все их виды.

1.3. Погрешность суммы и разности

Теорема 1. Абсолютная погрешность алгебраической суммы нескольких приближенных чисел не превышает суммы абсолютных погрешностей этих чисел.

Доказательство: пусть x_1, x_2, \dots, x_n – приближенные числа. Их алгебраическая сумма

$$u = \pm x_1 \pm x_2 \pm \dots \pm x_n.$$

Очевидно, что

$$\Delta u = \pm \Delta x_1 \pm \Delta x_2 \pm \dots \pm \Delta x_n.$$

Следовательно,

$$|\Delta u| = \pm |\Delta x_1| \pm |\Delta x_2| \pm \dots \pm |\Delta x_n|. \quad (1.8)$$

За абсолютную погрешность алгебраической суммы можно принять сумму предельных абсолютных погрешностей слагаемых:

$$\Delta_U = \Delta_{x_1} + \Delta_{x_2} + \dots + \Delta_{x_n}.$$

Рассмотрим разность двух приближенных чисел $u = x_1 - x_2$. По формуле (1.8) абсолютная погрешность Δ_U разности

$$\Delta_U = \Delta_{x_1} + \Delta_{x_2},$$

т. е. *предельная абсолютная погрешность разности равна сумме предельных абсолютных погрешностей уменьшаемого и вычитаемого*.

Отсюда предельная относительная погрешность разности будет:

$$\delta = \frac{\Delta_{x_1} + \Delta_{x_2}}{A}. \quad (1.9)$$

Замечание. Если приближенные числа x_1 и x_2 достаточно близки друг к другу и имеют небольшие абсолютные погрешности, то число A мало. Из формулы (1.9) следует, что относительная погрешность в этом случае может быть весьма большой, в то время как погрешности уменьшаемого и вычитаемого остаются малыми, т. е. здесь происходит *потеря точности*.

1.4. Погрешность произведения и частного

Теорема 2. *Относительная погрешность произведения нескольких приближенных чисел, отличных от нуля, не превышает суммы относительных погрешностей этих чисел.*

Доказательство. Пусть $u = x_1 x_2 \dots x_n$. Предполагая для простоты, что приближенные числа положительны, будем иметь:

$$\ln u = \ln x_1 + \ln x_2 + \dots + \ln x_n.$$

Отсюда, используя приближенную формулу $\Delta \ln x = \frac{\Delta x}{x}$, находим:

$$\frac{\Delta u}{u} = \frac{\Delta x_1}{x_1} + \frac{\Delta x_2}{x_2} + \dots + \frac{\Delta x_n}{x_n}.$$

Оценивая последнее выражение по абсолютной величине, получим:

$$\left| \frac{\Delta u}{u} \right| \leq \left| \frac{\Delta x_1}{x_1} \right| + \left| \frac{\Delta x_2}{x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\Delta x_n}{x_n} \right|.$$

Если A_i ($i=1, 2, \dots, n$) – точные значения сомножителей x_i и $|\Delta x_i|$, как это бывает обычно, малы по сравнению с x_i , то приближенно можно положить

$$\left| \frac{\Delta x_i}{x_i} \right| \approx \left| \frac{\Delta x_i}{A_i} \right| = \delta_i$$

и

$$\left| \frac{\Delta u}{u} \right| = \delta,$$

где δ_i – относительные погрешности сомножителей x_i ($i=1, 2, \dots, n$) и δ – относительная погрешность произведения. Следовательно,

$$\delta \leq \delta_1 + \delta_2 + \dots + \delta_n. \quad (1.10)$$

С л е д с т в и е . Предельная относительная погрешность произведения равна сумме предельных относительных погрешностей сомножителей, т. е.

$$\delta_U = \delta_{x_1} + \delta_{x_2} + \dots + \delta_{x_n}.$$

Если $u = \frac{x}{y}$, то $\ln u = \ln x - \ln y$ и

$$\frac{\Delta u}{u} = \frac{\Delta x}{x} - \frac{\Delta y}{y}.$$

Следовательно

$$\left| \frac{\Delta u}{u} \right| = \left| \frac{\Delta x}{x} \right| + \left| \frac{\Delta y}{y} \right|.$$

Отсюда вытекает, что теорема 2 верна и для частного.

1.5. Общая формула для погрешности

Основная задача теории погрешности в следующем: известны погрешности некоторой системы величин, требуется определить погрешность данной функции от этих величин [2–5].

Пусть задана дифференцируемая функция:

$$u = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

и $|\Delta x_i|$ ($i = 1, 2, \dots, n$) – абсолютные погрешности аргументов функции. Тогда абсолютная погрешность функции:

$$|\Delta u| = |f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)|.$$

Обычно на практике $|\Delta x_i|$ – малые величины, квадратами, произведениями и высшими степенями которых можно пренебречь. Поэтому можно принять:

$$|\Delta u| \approx |df(x_1, x_2, \dots, x_n)| = \left| \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i \right| \leq \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| |\Delta x_i|,$$

$$|\Delta u| \leq \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| |\Delta x_i|.$$

Обозначая через Δ_{x_i} ($i = 1, 2, \dots, n$) абсолютные погрешности аргументов x_i и через Δ_U – предельную погрешность функции u , для малых Δ_{x_i} получим:

$$\Delta_U = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \Delta_{x_i}. \quad (1.11)$$

Пример 1.4. Найти абсолютную и относительную погрешности объема шара $V = \pi d^3/6$, если диаметр $d = 3,7 \text{ см} \pm 0,05 \text{ см}$, а $\pi \approx 3,14$.

Решение. Рассматривая π и d как переменные величины, вычисляем частные производные:

$$\frac{\partial V}{\partial \pi} = \frac{1}{6}d^3 = 8,44;$$
$$\frac{\partial V}{\partial d} = \frac{1}{2}\pi d^2 = 21,5.$$

По формуле (1.11) предельная абсолютная погрешность объема

$$\Delta_V = \left| \frac{\partial V}{\partial \pi} \right| |\Delta \pi| + \left| \frac{\partial V}{\partial d} \right| |\Delta d| = 8,44 \cdot 0,0016 + 21,5 \cdot 0,05;$$
$$\Delta_V = 0,013 + 1,075 = 1,088 \text{ см}^3 \approx 1,1 \text{ см}^3.$$

Поэтому

$$V = \pi d^3 / 6 \approx 27,4 \text{ см}^3 \pm 1,1 \text{ см}^3.$$

Отсюда относительная погрешность объема

$$\delta_V = 1,088 \text{ см}^3 / 27,4 \text{ см}^3 = 0,0397 \approx 4 \text{ \%}.$$

Вопросы и задания для самоконтроля

1. Определение приближенного числа.
2. Понятие абсолютной и относительной погрешностей.
3. Какие бывают источники погрешностей?
4. Погрешности суммы и разности?
5. Погрешности произведения и частного?
6. Общая формула погрешности?

2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Одной из важных и наиболее распространенных задач прикладной математики является задача решения нелинейных уравнений, которые встречаются в разных областях научных исследований [2–6].

В своей практической деятельности инженеру-химику-технологу достаточно часто приходится сталкиваться с решением нелинейных уравнений. Например, при расчетах тепловых балансов, процессов однократного испарения, в смесителях, при расчетах процессов отстаивания, расчете точки росы, диаметров нефтепроводов и многих других процессах. Нелинейные уравнения широко представлены в расчетах физико-химических характеристиках систем, например, при вычислении констант фазового равновесия.

Любое уравнение в общем виде можно представить:

$$f(x) = 0. \quad (2.1)$$

Нелинейные уравнения можно разделить на два типа: алгебраические и трансцендентные.

Алгебраическими уравнениями называются уравнения, содержащие только алгебраические функции (рациональные, иррациональные, целые). Алгебраическое уравнение можно представить многочленом n -ой степени с действительными коэффициентами:

$$f(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n = 0. \quad (2.2)$$

Например, $x^3 + x^2 + 2x = 0$.

Трансцендентными называются уравнения, которые содержат другие функции (показательные, тригонометрические, логарифмические и т. д.), например:

$$2x - \sin x = 0.$$

Задача решения уравнения (2.1) заключается в нахождении таких значений x , при которых (2.1) обращается в тождество, т. е. в ноль:

$$f(\xi) = 0,$$

где ξ – корень уравнения.

Методы решения нелинейных уравнений можно разделить на прямые и итерационные. Прямые методы позволяют записать корни уравнения в виде формулы. Однако на практике встречающиеся уравнения

далеко не всегда удастся решить простыми методами. Для их решения применяются итерационные методы, т. е. методы последовательных приближений.

Приближенное определение корней уравнения проводится в два этапа:

1. Отделение корней, т. е. установление малых отрезков, в каждом из которых содержится только один корень уравнения.
2. Уточнение приближенных значений корней до некоторой заданной степени точности.

2.1. Отделение корней

Приближенное значение корня может быть определено различными способами.

Графический метод отделения корней

Пусть требуется отделить корни уравнения (2.1). Строим график функции $f(x)=0$. Абсциссы точек пересечения графика функции с осью OX будут приближенными значениями корней уравнения (2.1).

Часто уравнение (2.1) преобразовывают к более простому виду. Допустим:

$$\begin{aligned} f(x) &= \varphi_1(x) - \varphi_2(x) = 0; \\ \varphi_1(x) &= \varphi_2(x). \end{aligned} \tag{2.3}$$

Строим графики функций: $y_1 = \varphi_1(x)$; и $y_2 = \varphi_2(x)$. Корнями уравнения (2.3) будут являться абсциссы пересечения этих графиков.

Пример 2.1. Отделить корни уравнения $f(x) = x \cdot \lg x - 1 = 0$. Преобразуем уравнение $f(x)$ к виду:

$$\lg x = 1/x.$$

Построим графики функций $y_1 = \lg x$ и $y_2 = 1/x$ (рис. 2.1).

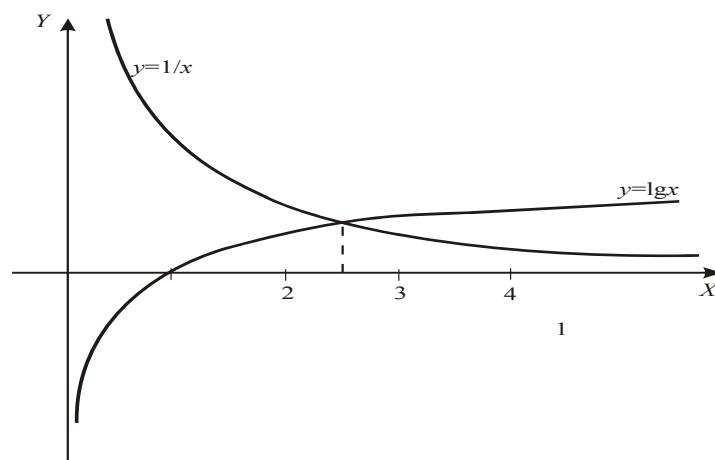


Рис. 2.1. Графический метод отделения корней

Точка пересечения графиков дает приближенное значение единственного корня $\xi \approx 2,5$.

Аналитический метод отделения корней

Теорема. Если непрерывная функция $f(x)$ принимает значения разных знаков на концах отрезка $[a, b]$, т. е. $f(a) \cdot f(b) < 0$, то между точками a и b имеется хотя бы один действительный корень уравнения $f(x)=0$, т. е. существует такое число ξ , принадлежащее $[a, b]$, что $f(\xi)=0$ (рис. 2.2) [3, 8, 10].

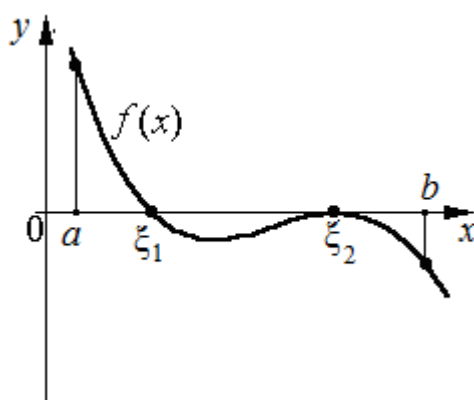


Рис. 2.2

Если на заданном отрезке $[a, b]$ существует первая производная $f'(x)$, сохраняющая знак внутри $[a, b]$ ($f'(x) > 0$ или $f'(x) < 0$), то корень ξ будет единственным (рис. 2.3).

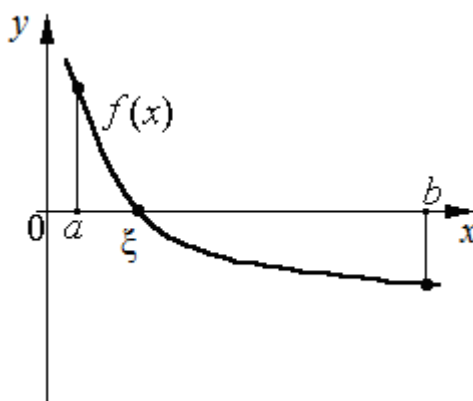


Рис. 2.3

Процесс отделения корней начинается с установления знаков функции на концах отрезка a и b . Затем определяются знаки в промежуточных точках. Далее выделяются отрезки, на границе которых функция меняет знак на противоположный. Выделенные отрезки содержат корень уравнения.

Пример 2.2. Отделить корни уравнения $f(x)=x^3 - 7x + 3=0$.

При заданных значениях x от $-\infty$ до $+\infty$ определяются знаки функции $f(x)$. Результаты поиска приведены в таблице.

X	Знак $f(x)$
$-\infty$	-
-3	-
-1	+
0	+
+1	-
+3	+
$+\infty$	+

В результате выделены три интервала, на которых функция $f(x)$ имеет действительные корни: $[-3, -1]$; $[0, 1]$; $[1, 3]$.

Блок-схема алгоритма отделения корней приведена на рис. 2.4.

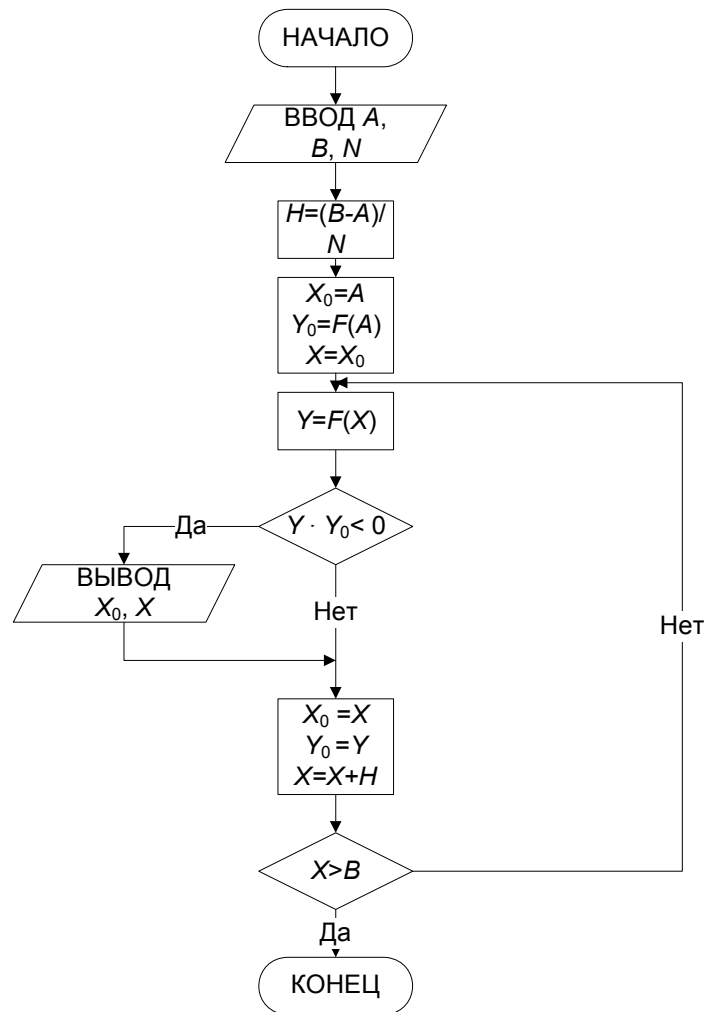


Рис. 2.4. Блок-схема метода отделения корней

2.2. Уточнение корней

Итерационный процесс поиска корней состоит в последовательном уточнении начального приближения x_0 . Каждый такой шаг называется *итерацией*.

Рассмотрим некоторые итерационные методы решения нелинейных уравнений.

2.2.1. Метод деления отрезка пополам (метод бисекций)

Пусть дано уравнение $f(x)=0$. Допустим, удалось найти такой отрезок $[a, b]$, на котором расположено значение корня ξ , т. е. $a < \xi < b$. В качестве начального приближения корня x_0 (рис. 2.5) принимают середину отрезка $x_0 = (a + b) / 2$. Далее исследуют значения функции: если $f(x_0)=0$, то x_0 – корень уравнения, т. е. $\xi=x_0$. Если $f(x_0) \neq 0$, то выбирают одну из половин отрезка $[a, x_0]$ или $[x_0, b]$, на концах которой $f(x)$ имеет противоположные знаки, т. е. содержит искомый корень, поэтому его принимают в качестве нового отрезка $[x_0, b]$. Вторую половину отрезка, на концах которого знак функции $f(x)$ не меняется, отбрасывают: в данном случае $[a, x_0]$. Отрезок $[x_0, b]$ вновь делят пополам. Следующее приближение: $x_1 = (x_0 + b) / 2$. Вновь исследуют функцию $f(x)$ на концах отрезка и отбрасывают отрезок $[x_1, b]$, т. к. $f(x_1) > 0$ и $f(b) > 0$.

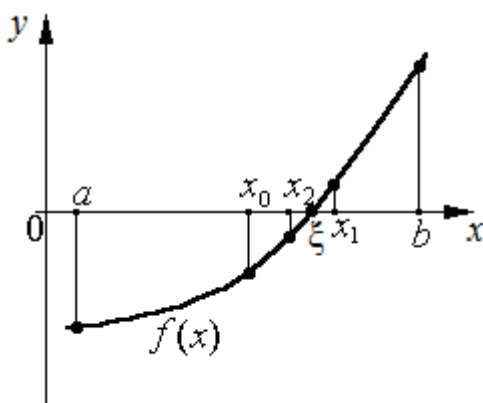


Рис. 2.5. Метод деления отрезка пополам

Отрезок $[x_0, x_1]$, на концах которого функция имеет противоположные знаки $f(x_1) > 0, f(x_0) < 0$, вновь делят пополам, получают новое приближение корня $x_2 = (x_0 + x_1) / 2$ и т. д. Итерационный процесс продолжают до тех пор, пока длина отрезка после n -й итерации не станет меньше некоторого заданного малого числа ε (погрешности), т. е.

$$|b - a| \leq \varepsilon. \quad (2.3^*)$$

Тогда за искомое значение корня принимают полученное приближение x_n : $\xi = x_n$ и говорят, что решение уравнения найдено с точностью ε .

Пример 2.3. Найти корни уравнения

$$x^3 - 6x + 2 = 0$$

с точностью $\varepsilon = 0,1$.

В результате процедуры отделения корней было получено три отрезка, содержащих действительные корни. Выберем отрезок $[-3, -1]$ и определим корень уравнения, используя метод деления отрезка пополам.

Последовательность решения. Определяем знак функции на концах отрезка $[-3, -1]$:

$$f(-3) = -27 + 18 + 2 = -7;$$

$$f(-1) = -1 + 6 + 2 = +7.$$

Делим данный отрезок пополам:

$$(-3 - 1) / 2 = -2.$$

Значение функции в этой точке:

$$f(-2) = -8 + 12 + 2 = 6$$

имеет положительное значение. Отбрасываем половину отрезка, на концах которого функция $f(x)$ имеет положительные знаки, а именно – отрезок $[-2, -1]$. Полученный отрезок $[-3, -2]$ делим пополам:

$$(-3 - 2) / 2 = -2,5;$$

- $f(-2,5) > 0$, следовательно, отбрасываем отрезок $[-2,5; -2]$, а отрезок $[-3; -2,5]$ делим пополам:

$$(-3 - 2,5) / 2 = -2,75;$$

- $f(-2,75) < 0$, следовательно, рассматриваем отрезок $[-2,75; -2,5]$:

$$(-2,75 - 2,5) / 2 = -2,625;$$

- $f(-2,625) < 0$, – отрезок $[-2,625; -2,5]$:

$$(-2,625 - 2,5) / 2 = -2,5625;$$

- $f(-2,5625) > 0$. Следовательно, вновь полученный отрезок будет

$$[-2,625; -2,5625].$$

Проверим условие окончания расчетов по формуле (2.3*):

$$|2,625 - 2,5625| = 0,0625;$$

$$0,0625 < 0,1.$$

Таким образом, за искомое значение корня принимают значение:

$$x = -2,5625.$$

На рис. 2.6 представлена блок-схема определения корня уравнения (2.1) методом деления отрезка пополам (бисекций).

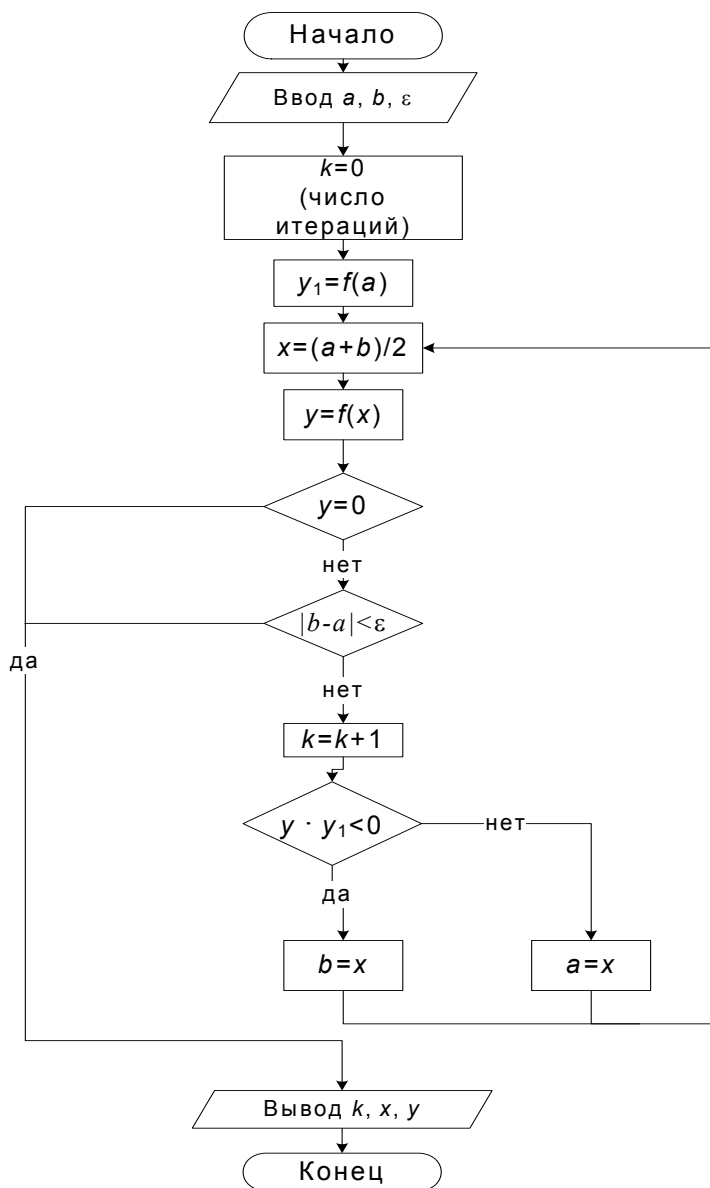


Рис. 2.6. Блок-схема алгоритма метода деления отрезка пополам

2.2.2. Метод Ньютона (метод касательных)

Если известно начальное приближение к корню уравнения $f(x)=0$, то эффективным методом уточнения корней является метод Ньютона (метод касательных) [2–10].

Сформулируем достаточные условия сходимости метода Ньютона.

Пусть функция $f(x)$ имеет первую и вторую производные на отрезке $[a, b]$. Выполняется условие знакопеременности функции: $f(a) \cdot f(b) < 0$,

а производные $f'(x)$, $f''(x)$ сохраняют знак на отрезке $[a, b]$. Тогда, исходя из начального приближения $x_0 \in [a, b]$, которое удовлетворяет неравенству $f(x) \cdot f''(x) > 0$, можно построить следующую итерационную последовательность:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

которая сходится к единственному на отрезке $[a, b]$ решению ξ уравнения $f(x) = 0$.

В данном методе процесс поиска корня состоит в том, что в качестве приближений к корню принимаются значения $x_0, x_1, x_2 \dots$ точек пересечения касательной к кривой $y=f(x)$ с осью абсцисс. Таким образом, геометрически метод Ньютона эквивалентен замене небольшой дуги кривой $y=f(x)$ касательной. При этом необязательно задавать отрезок $[a, b]$, содержащий корень уравнения $f(x)=0$, а достаточно найти некоторое начальное приближение корня $x=x_0$ (рис. 2.7).

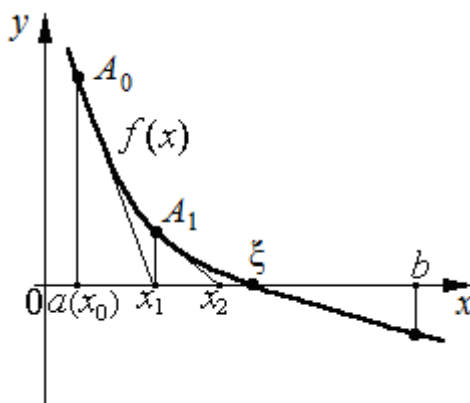


Рис. 2.7

В качестве начального приближения выбирается $x_0 = a$, для которого выполняется условие $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$. Проведем касательную в точке $A_0[x_0, f(x_0)]$. Первым приближением корня будет точка пересечения этой касательной с осью абсцисс x_1 . Через точку $A_1[x_1, f(x_1)]$ вновь проводим касательную, точка пересечения которой с осью Ox даст нам второе приближение корня x_2 и т. д.

На рис. 2.8 приведены возможные варианты выбора в качестве начального приближения правого или левого конца отрезка.

Условие выбора: $f(x) \cdot f''(x) > 0$.

Вывод формулы Ньютона. Запишем уравнение касательной, проведенной к кривой $y=f(x)$ в точке $A_0[x_0, f(x_0)]$:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0). \quad (2.5)$$

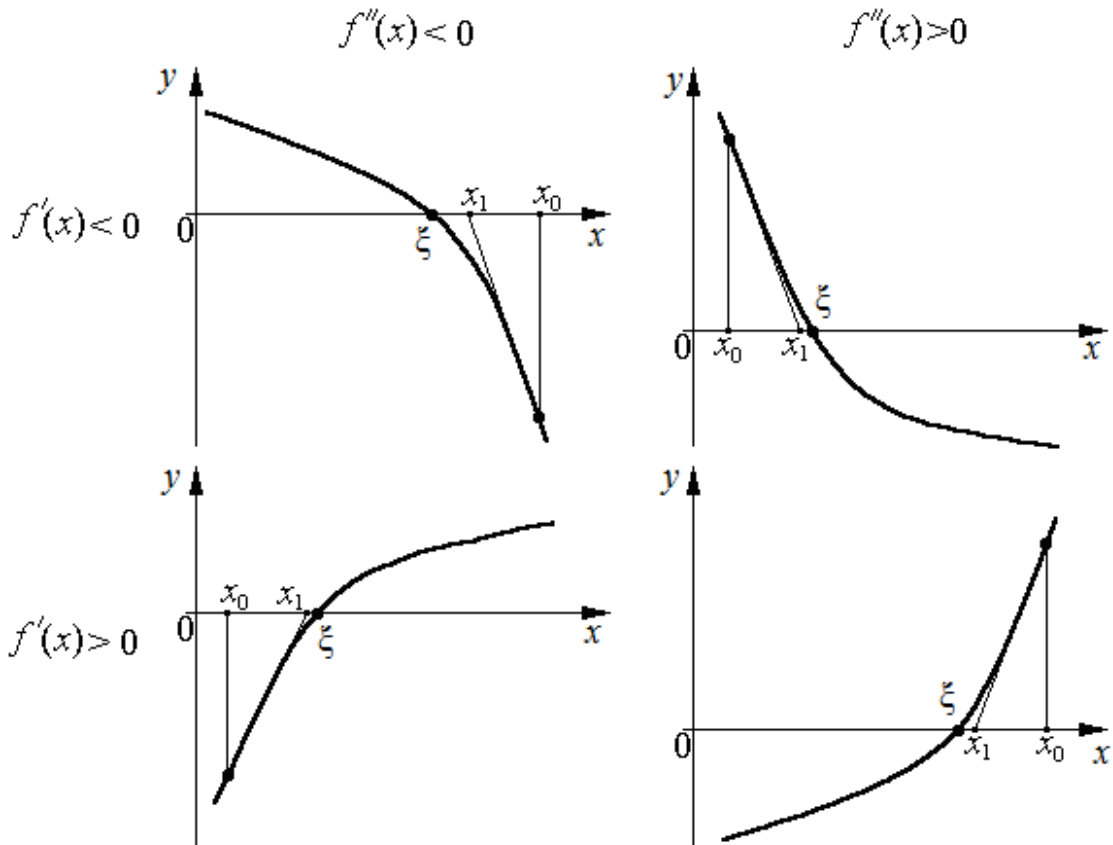


Рис. 2.8

Найдем отсюда следующее приближение корня.

Принимаем $x = x_1$ ($y = 0$), тогда

$$-f(x_0) = f'(x_0)(x_1 - x_0);$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}. \quad (2.6)$$

Аналогично найдем следующие приближения корня, как точки пересечения с осью OX касательных, проведенных в точках A_1, A_2 и т. д. Формула Ньютона для $(n + 1)$ -го приближения будет иметь следующий вид:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (2.7)$$

Для окончания итерационного процесса вычислений может быть использовано условие

$$|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon. \quad (2.7^*)$$

Пример 2.4. Найти корни уравнения

$$f(x) = 5x^3 - 20x^2 - 55x + 150 = 0.$$

На этапе отделения корней уравнения было выделено три интервала, на которых функция меняет знак, следовательно, уравнение имеет три действительных корня. Вычислим по методу Ньютона (касательных) значение корня на отрезке $[4, 6]$. Выберем начальное приближение таким образом, чтобы выполнялось условие $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$.

Запишем первую и вторую производные функции $f(x)$:

$$f'(x) = 15x^2 - 40x - 55;$$

$$f''(x) = 30x - 40.$$

Вычислим значения $f(x_0)$ и $f''(x_0)$.

При $x = 4$ $f(4) = -70$; $f''(4) = 80$;

$x = 6$ $f(6) = 180$; $f''(6) = 140$.

$$f(6) \cdot f''(6) = 25200 > 0.$$

Следовательно, за начальное приближение можно принимать $x_0 = 6$.

Найдем корень уравнения по формуле (2.4) с точностью $\varepsilon = 0,001$:

1) $x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$;

$$f(6) = 180; f'(6) = 245;$$

$$x_1 = 6 - 180 / 245 = 5,2653;$$

2) $x_2 = x_1 - f(x_1) / f'(x_1)$;

$$f(5,265) = 35,8; f'(5,265) = 150,2;$$

$$x_2 = 5,265 - 35,8 / 150,2 = 5,027;$$

3) $x_3 = x_2 - f(x_2) / f'(x_2)$;

$$f(5,027) = 3,281; f'(5,027) = 123;$$

$$x_3 = 5,027 - 3,281 / 123 = 5,0003;$$

4) $x_4 = x_3 - f(x_3) / f'(x_3)$;

$$f(5,0003) = 0,0394; f'(5,0003) = 120;$$

$$x_4 = 5,0003 - 0,0394 / 120 = 5,000.$$

Таким образом, корнем данного уравнения с точностью $\varepsilon = 0,001$ примем значение $x = 5,000$.

Проверяем по формуле (2.7*) условие окончания вычислений:

$$|5,0003 - 5,000| = 0,0003 < 0,001.$$

Блок-схема алгоритма метода Ньютона приведена на рис. 2.9.

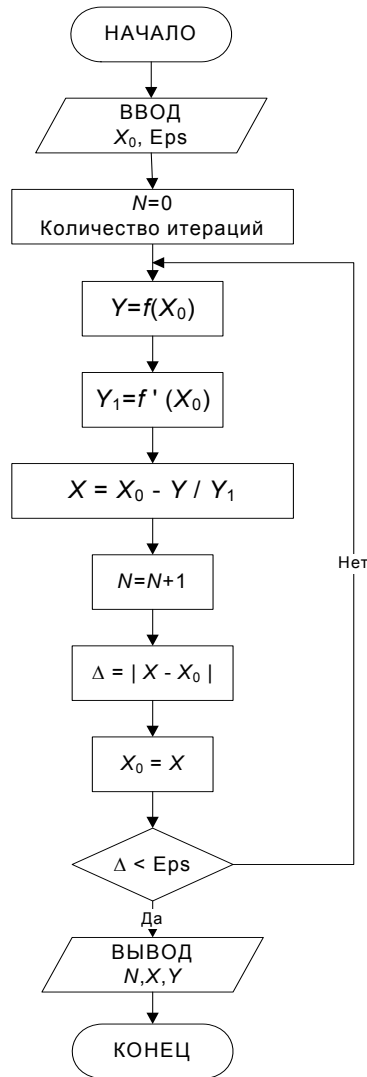


Рис. 2.9. Блок-схема метода Ньютона:
 X_0 – начальное приближение;
 X – последовательное приближение (значение) корня

2.2.3. Метод простых итераций

Одним из часто применяемых в инженерной практике численных методов решения нелинейных уравнений является метод итераций (метод последовательных приближений). Сущность метода в следующем [2–10].

Заменяем данное нелинейное уравнение (2.1) эквивалентным ему уравнением вида:

$$x = \varphi(x). \quad (2.8)$$

Начальное приближение корня $x = x_0$. Подставим это значение в правую часть уравнения (2.8), получаем новое приближение:

$$x_1 = \varphi(x_0). \quad (2.9)$$

Аналогичным образом получим:

$$x_2 = \varphi(x_1). \quad (2.10)$$

Далее, подставляя каждый раз найденное значение корня в (2.9), получаем последовательность значений:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

Итерационный процесс будет продолжаться до тех пор, пока не станут близки результаты двух последовательных итераций:

$$|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon. \quad (2.12)$$

Достаточным условием сходимости метода простых итераций является условие:

$$|\varphi'(x)| < 1, \quad (2.13)$$

которое выполняется для любого x , принадлежащего отрезку $[a, b]$, содержащему корень уравнения.

Рассмотрим геометрическую интерпретацию метода. Строим графики функций $y=x$ и $y=\varphi(x)$ (рис. 2.10). Корнем ξ уравнения $x=\varphi(x)$ является абсцисса точки пересечения кривой $y=\varphi(x)$ с графиком $y=x$.

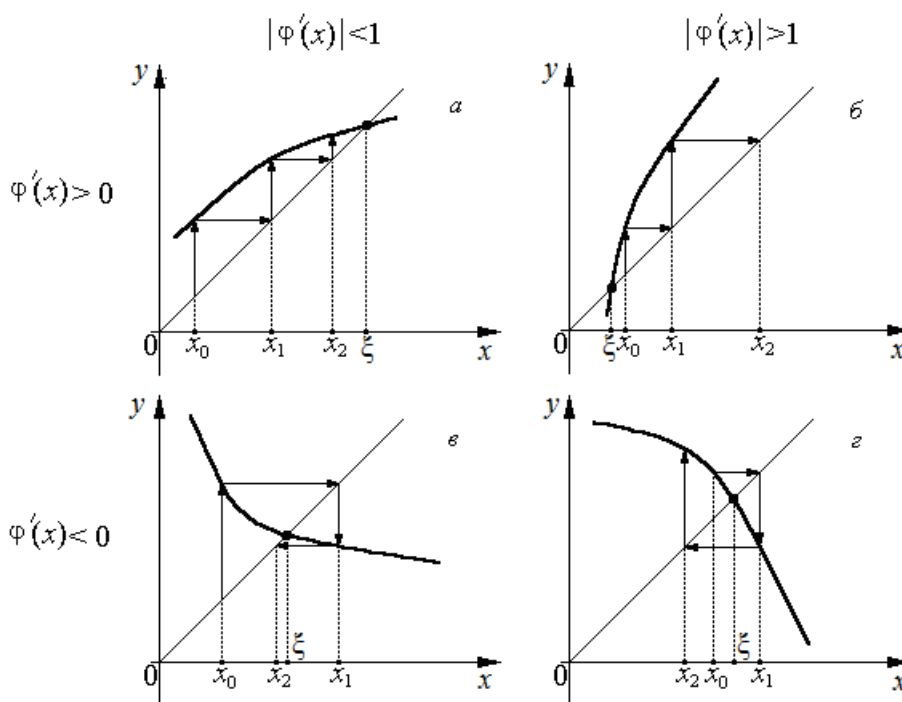


Рис. 2.10. Метод простых итераций

Показано, что при $\varphi'(x) > 0$ (см. рис. 2.10, а, б) и при $\varphi'(x) < 0$ (см. рис. 2.10, в, г) возможны как сходящиеся, так и расходящиеся итерационные процессы. Скорость сходимости процесса зависит от абсолютной величины производной $\varphi'(x)$. Чем меньше значение $|\varphi'(x)|$

вблизи корня, тем быстрее сходится процесс. Таким образом, при переходе от уравнения (2.1) к уравнению (2.8) необходимо, чтобы было выполнено условие (2.13).

Итерационные процессы могут быть как односторонними, если $\varphi'(x) > 0$, так и двусторонними, если $\varphi'(x) < 0$.

Блок-схема метода простых итераций приведена на рис. 2.11.

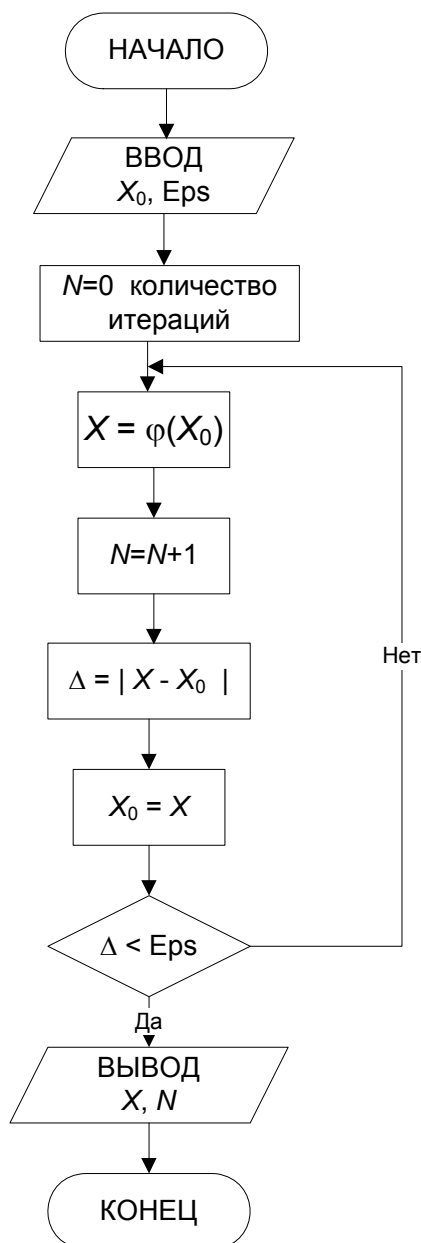


Рис. 2.11. Блок-схема метода простых итераций

Пример 2.5. Требуется решить нелинейное уравнение $e^{-x} - x^2 = 0$. Допустим, что в результате отделения корней было найдено, что корень уравнения находится на интервале $[0, 1]$.

x	-2	-1	0	1	2
$f(x)$	3,389	1,718	1	-0,632	-3,865

Приведем уравнение $f(x) = e^{-x} - x^2 = 0$ к эквивалентному виду $x = \varphi(x)$. Возможны следующие варианты:

- 1) $e^{-x} - x^2 = 0; e^{-x} = x^2; x = -2 \cdot \ln(x); \varphi(x) = -2 \cdot \ln(x);$
- 2) $e^{-x} - x^2 = 0; e^{-x} = x^2; x = \sqrt{e^{-x}}; \varphi(x) = \sqrt{e^{-x}}.$

Проверяем для каждого уравнения условие сходимости $|\varphi'(x)| < 1$:

- 1) $\varphi'(x) = (-2 \cdot \ln(x))' = -2/x$. Очевидно, что на интервале $[0, 1]$ $|\varphi'(x)| > 1$

x	0	0,25	0,5	0,75	1
$ -2/x $	$+\infty$	8	4	2,667	2

и, следовательно, метод итераций при эквивалентном уравнении

$$x = -2 \cdot \ln(x)$$

сходиться не будет;

- 2) $\varphi'(x) = \frac{e^{-x}}{2 \cdot \sqrt{e^{-x}}} = \frac{e^{-x/2}}{2}$. На интервале $[0, 1]$ $|\varphi'(x)| < 1$

x	0	0,25	0,5	0,75	1
$\frac{e^{-x/2}}{2}$	0,5	0,441	0,384	0,345	0,303

и, следовательно, метод итераций при эквивалентном уравнении

$$x = \sqrt{e^{-x}}$$

сходится. Это хорошо видно из приведенных результатов расчета. В качестве начального приближения может быть выбрано любое число, принадлежащее выделенному интервалу, например $x_0 = 0$.

n	x_n	$\varphi(x) = \sqrt{e^{-x}}$
0	0	1
1	1	0,607
2	0,607	0,738
3	0,738	0,691
4	0,691	0,708
5	0,708	0,702
6	0,702	0,704
7	0,704	0,703

Вопросы для самоконтроля

1. Два типа нелинейных уравнений?
2. Основные этапы определения корней нелинейного уравнения?
3. В чем суть этапа отделения корней?
4. Способы отделения корней?
5. На чем основан метод уточнения корней – бисекций?
6. В чем заключается итерационный процесс поиска корней методом Ньютона?
7. Условие применения метода касательных?
8. Что лежит в основе применения метода простых итераций?
9. В чем заключается итерационный процесс поиска корня по методу итераций?

3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

3.1. Постановка задачи

Решение систем линейных уравнений встречается в многочисленных практических задачах [2, 6, 10, 11].

Запишем систему n линейных алгебраических уравнений с n неизвестными:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \quad (3.1)$$

Совокупность коэффициентов этой системы запишем в виде таблицы, или матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Используя понятие матрицы A , систему уравнений (3.1) можно записать в матричном виде:

$$AX = B, \quad (3.3)$$

где X и B – вектор-столбец неизвестных и вектор-столбец правых частей соответственно:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Определителем, или детерминантом, матрицы A ($\det A$) называется число D , равное

$$D = \begin{vmatrix} a_{11}a_{12}\dots a_{1n} \\ a_{21}a_{22}\dots a_{2n} \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}a_{n2}\dots a_{nn} \end{vmatrix} = \sum (-1)^k a_{1\alpha}a_{2\beta}\dots a_{n\varpi}. \quad (3.4)$$

Здесь индексы $\alpha, \beta, \dots, \varpi$ пробегают все возможные $n!$ перестановок номеров $1, 2, \dots, n$; k – число инверсий в данной перестановке.

Необходимым и достаточным условием существования единственного решения системы линейных уравнений является условие $D \neq 0$. В случае равенства нулю определителя системы матрица называется *вырожденной*; при этом система линейных уравнений (3.1) либо не имеет решения, либо имеет их бесчисленное множество.

Методы решения систем линейных уравнений делятся на две группы – прямые и итерационные. *Прямые методы* используют конечные соотношения (формулы) для вычисления неизвестных. Они дают решение после выполнения заранее известного числа операций. Эти методы достаточно просты и пригодны для широкого класса линейных систем.

К прямым методам решения систем линейных уравнений относятся метод Гаусса, метод прогонки, схема Жордана, метод квадратного корня, метод оптимального исключения, клеточные методы. Среди прямых методов наиболее распространен метод Гаусса.

Итерационные методы – это методы последовательных приближений. В них необходимо задать некоторое приближенное решение – *начальное приближение*. После этого с помощью некоторого алгоритма проводится цикл вычислений, называемый *итерацией*. В результате итерации находят новое приближение. Итерации проводятся до получения решения с требуемой точностью. Объем вычислений заранее определить трудно. К достоинствам итерационных методов следует отнести то, что они требуют хранения в памяти машины не всей матрицы системы, а лишь нескольких векторов с n компонентами. Погрешности окончательных результатов при использовании итерационных методов не накапливаются, поскольку точность вычислений в каждой итерации определяется лишь результатами предыдущей итерации и практически не зависит от ранее выполненных вычислений. Итерационные методы могут использоваться для уточнения решений, полученных с помощью прямых методов. Одним из самых распространенных итерационных методов, отличающихся простотой и легкостью программирования, является метод Гаусса–Зейделя.

3.2. Метод Гаусса (метод исключений)

Методом Гаусса называют точный метод решения невырожденной системы линейных уравнений, состоящий в том, что последовательным исключением неизвестных систему

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.5)$$

или

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + \dots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (3.6)$$

приводят к эквивалентной системе с треугольной матрицей:

$$\begin{aligned} x_1 + c_{12}x_2 + \dots + c_{1n}x_n &= d_1, \\ x_2 + \dots + c_{2n}x_n &= d_2, \\ \dots & \\ x_n &= d_n, \end{aligned} \quad (3.7)$$

решение которой находят по рекуррентным формулам:

$$\begin{aligned} x_i &= d_i, \\ x_i &= d_i - \sum_{k=j+1}^n c_{ik}x_k, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Существует много вариантов этого метода. Рассмотрим схему с выбором главного элемента.

Предположим, что $a_{11} \neq 0$, и разделим обе части первого уравнения системы на a_{11} , в результате получим уравнение:

$$x_1 + b_{12}x_2 + \dots + b_{1n}x_n = b_1. \quad (3.9)$$

С помощью полученного уравнения исключаем во всех уравнениях системы, начиная со второго, слагаемые, содержащие x_1 . Для этого умножаем последовательно обе части уравнения на a_{21} , a_{31} , ..., a_{n1} и вычитаем из соответствующих уравнений. В результате получаем систему, порядок которой на единицу меньше порядка исходной. Аналогично преобразуем полученную систему. В результате n -кратного повторения этого преобразования получим систему с треугольной матрицей.

Основным условием применимости данной схемы является неравенство нулю элементов главной диагонали матрицы коэффициентов –

$a_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$. В противном случае необходимо сделать перестановку уравнений системы и добиться выполнения этого условия.

Пример 3.1. Требуется найти решение:

$$\begin{aligned} 3,1x_1 - 0,6x_2 - 2,3x_3 &= -1,5; \\ 0,8x_1 + 7,4x_2 - 0,5x_3 &= 6,4; \\ 1,4x_1 - 2,9x_2 + 9,7x_3 &= 4. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Элементы главной диагонали матрицы коэффициентов не равны нулю. Исключим x_1 из 2-го и 3-го уравнений системы:

$$\begin{aligned} x_1 - \frac{0,6}{3,1}x_2 - \frac{2,3}{3,1}x_3 &= -\frac{1,5}{3,1}; \\ (7,4 + \frac{0,6}{3,1} \cdot 0,8)x_2 + (-0,5 + \frac{2,3}{3,1} \cdot 0,8)x_3 &= 6,4 + \frac{1,5}{3,1} \cdot 0,8; \\ (-2,9 + \frac{0,6}{3,1} \cdot 1,4)x_2 + (9,7 + \frac{2,3}{3,1} \cdot 1,4)x_3 &= 4 + \frac{1,5}{3,1} \cdot 1,4. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Перейдем к десятичным дробям с точностью до третьего знака после запятой:

$$\begin{aligned} x_1 - 0,194x_2 - 0,742x_3 &= -0,484; \\ x_2 + 0,094x_3 &= 6,787; \\ -2,629x_2 + 10,739x_3 &= 4,677. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Исключим x_2 из 3-го уравнения:

$$\begin{aligned} x_1 - 0,194x_2 - 0,742x_3 &= -0,484, \\ x_2 + \frac{0,094}{7,555}x_3 &= \frac{6,787}{7,555}, \\ + \frac{0,094}{7,555} \cdot 2,629x_3 &= 4,677 + \frac{6,787}{7,555} \cdot 2,629. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Получим эквивалентную систему с треугольной матрицей:

$$\begin{aligned} x_1 - 0,194x_2 - 0,742x_3 &= -0,484, \\ x_2 - 0,012x_3 &= 0,898, \\ x_3 &= 0,653. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Теперь очевидно, что надо делать для решения системы. Необходимо определить x_3 из (3.14), подставить этот результат во второе уравнение системы и определить x_2 :

$$x_2 = 0,012 \cdot 0,653 + 0,898 = 0,906, \quad (3.15)$$

затем подставить x_2 и x_3 в первое уравнение системы (3.14) и определить x_1 :

$$x_1 = 0,194 \cdot 0,906 + 0,742 \cdot 0,653 - 0,484 = 0,176. \quad (3.16)$$

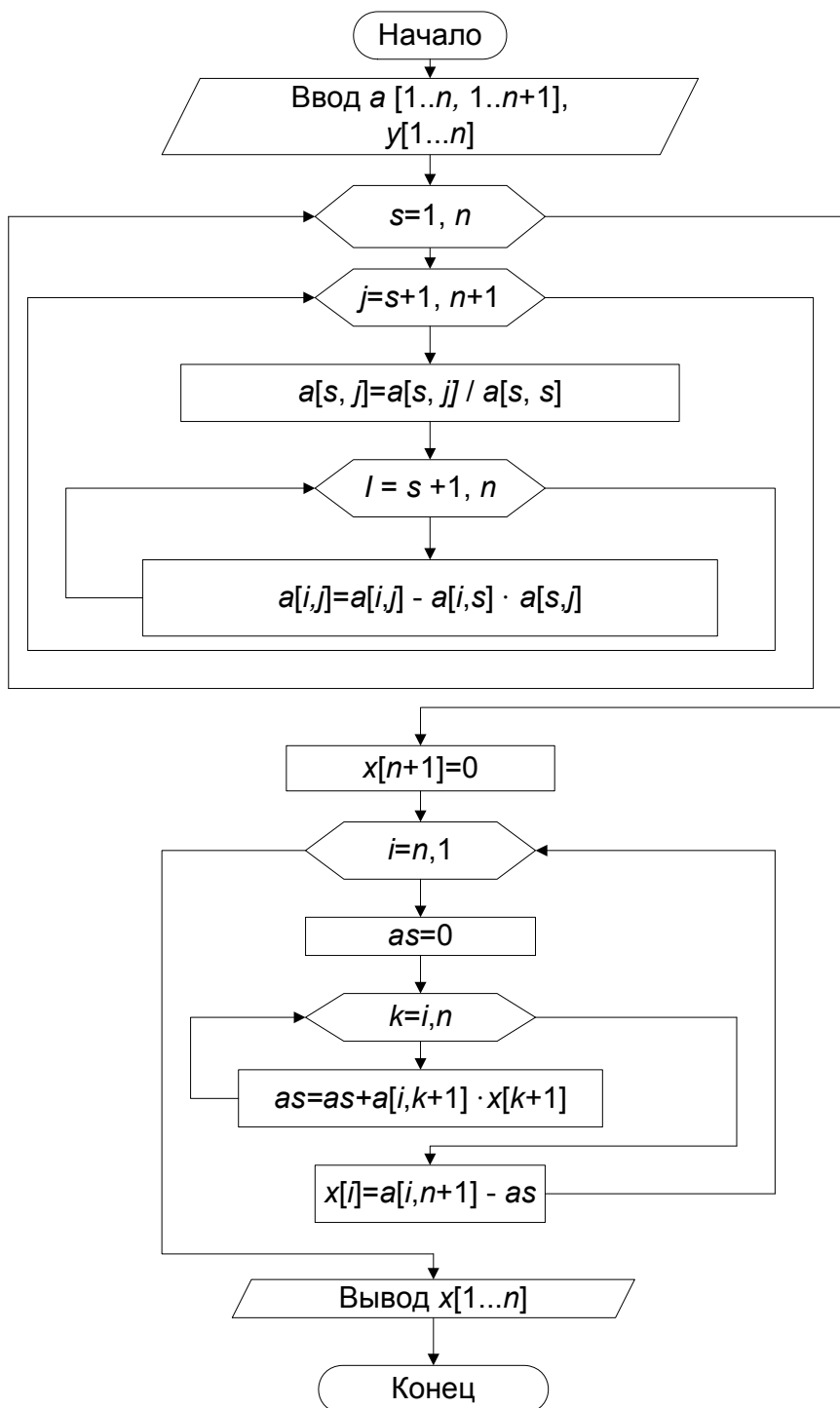


Рис. 3.1. Блок-схема метода Гаусса

Этот процесс обычно называют обратной подстановкой.

Блок-схема алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса представлена на рис. 3.1, программа расчета на языке Паскаль приведена в приложении. Рассмотрен случай, когда $a_{ii} \neq 0, i = 1, \dots, n$, и перестановка уравнений системы не требуется.

Для удобства реализации алгоритма вектор-столбец правых частей уравнений включен $(n+1)$ -м столбцом в матрицу коэффициентов A системы n линейных уравнений.

3.3. Интерполяционный метод Гаусса–Зейделя

Этот метод исключительно удобен для использования на ЭВМ.

Рассмотрим систему из трех уравнений с тремя неизвестными:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3. \end{cases} \quad (3.17)$$

Предположим, что $a_{11} \neq 0$; $a_{22} \neq 0$; $a_{33} \neq 0$, и перепишем систему в следующем виде:

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3); \quad (3.18)$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3); \quad (3.19)$$

$$x_3 = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2). \quad (3.20)$$

Теперь возьмем некоторое первое приближение к решению этой системы, обозначив его через $x_1^{(0)}$, $x_2^{(0)}$, $x_3^{(0)}$. Подставим это решение в (3.18) и вычислим новое значение $x_1^{(1)}$:

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)}). \quad (3.21)$$

Используя только что вычисленное значение $x_1^{(1)}$ и начальное значение $x_3^{(0)}$, вычислим из уравнения (3.19) новое значение x_2 :

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(0)}). \quad (3.22)$$

Наконец, используя только что вычисленные значения $x_1^{(1)}$ и $x_2^{(1)}$, найдем из (3.20) новое значение x_3 :

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(1)} - a_{32}x_2^{(1)}). \quad (3.23)$$

Этим заканчивается первая итерация. Теперь можно заменить исходные значения $x_1^{(0)}$, $x_2^{(0)}$, $x_3^{(0)}$ на $x_1^{(1)}$, $x_2^{(1)}$, $x_3^{(1)}$ и вычислить следующее приближение.

В общем случае k -е приближение определяется формулами:

$$\begin{aligned}x_1^{(k)} &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k-1)} - a_{13}x_3^{(k-1)}); \\x_2^{(k)} &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k-1)}); \\x_3^{(k)} &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k)}).\end{aligned}\tag{3.24}$$

Пример 3.2. Решим систему уравнений

$$\begin{aligned}4x_1 - x_2 - x_3 &= 4; \\x_1 + 6x_2 + 2x_3 &= 9; \\-x_1 - 2x_2 + 5x_3 &= 2.\end{aligned}\tag{3.25}$$

Нетрудно убедиться, что точное решение этой системы равно $x_1 = 1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 1$. Положим $x_1^{(0)} = 0$, $x_2^{(0)} = 0$, $x_3^{(0)} = 0$, как это обычно делается для начального приближения. Тогда, согласно формулам:

$$\begin{aligned}x_1 &= \frac{1}{4}(4 + x_2 - x_3); \\x_2 &= \frac{1}{6}(9 - x_1 - 2x_3); \\x_3 &= \frac{1}{5}(2 + x_1 + 2x_2).\end{aligned}\tag{3.26}$$

Получаем следующее приближение:

$$\begin{aligned}x_1^{(1)} &= 1; \\x_2^{(1)} &= \frac{4}{3}; \\x_3^{(1)} &= \frac{17}{15}.\end{aligned}\tag{3.27}$$

Последовательные приближения, вычисленные каждый раз с точностью до четырех значащих цифр, приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1

Итерация	x_1	x_2	x_3
0	0	0	0
1	$0,1000 \cdot 10^1$	$0,1333 \cdot 10^1$	$0,1133 \cdot 10^1$
2	$0,1050 \cdot 10^1$	$0,9473 \cdot 10^0$	$0,9889 \cdot 10^0$
3	$0,9896 \cdot 10^0$	$0,1005 \cdot 10^1$	$0,9999 \cdot 10^0$
4	$0,1001 \cdot 10^1$	$0,9999 \cdot 10^0$	$0,1000 \cdot 10^1$
5	$0,1000 \cdot 10^1$	$0,1000 \cdot 10^1$	$0,1000 \cdot 10^1$

Для системы из n уравнений с n неизвестными (диагональные элементы отличны от нуля) k -е приближение к решению будет задаваться функцией

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - \dots - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k-1)} - \dots - a_{in}x_n^{(k-1)} \right), \quad (3.28)$$

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

Интерполяционный процесс продолжается до тех пор, пока все $x_i^{(k)}$ не станут достаточно близки к $x_i^{(k-1)}$. Критерий близости можно задавать в следующем виде:

$$M^{(k)} = \max |x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}| < \varepsilon, \quad (3.29)$$

где определяется максимальное значение разности для всех i , а ε – некоторое положительное число.

Достаточным условием сходимости метода Гаусса–Зейделя является то, что диагональные члены должны преобладать в уравнении, т. е. они должны быть по абсолютной величине не меньше, а по крайней мере в одном случае больше недиагональных элементов для всех или для одного i :

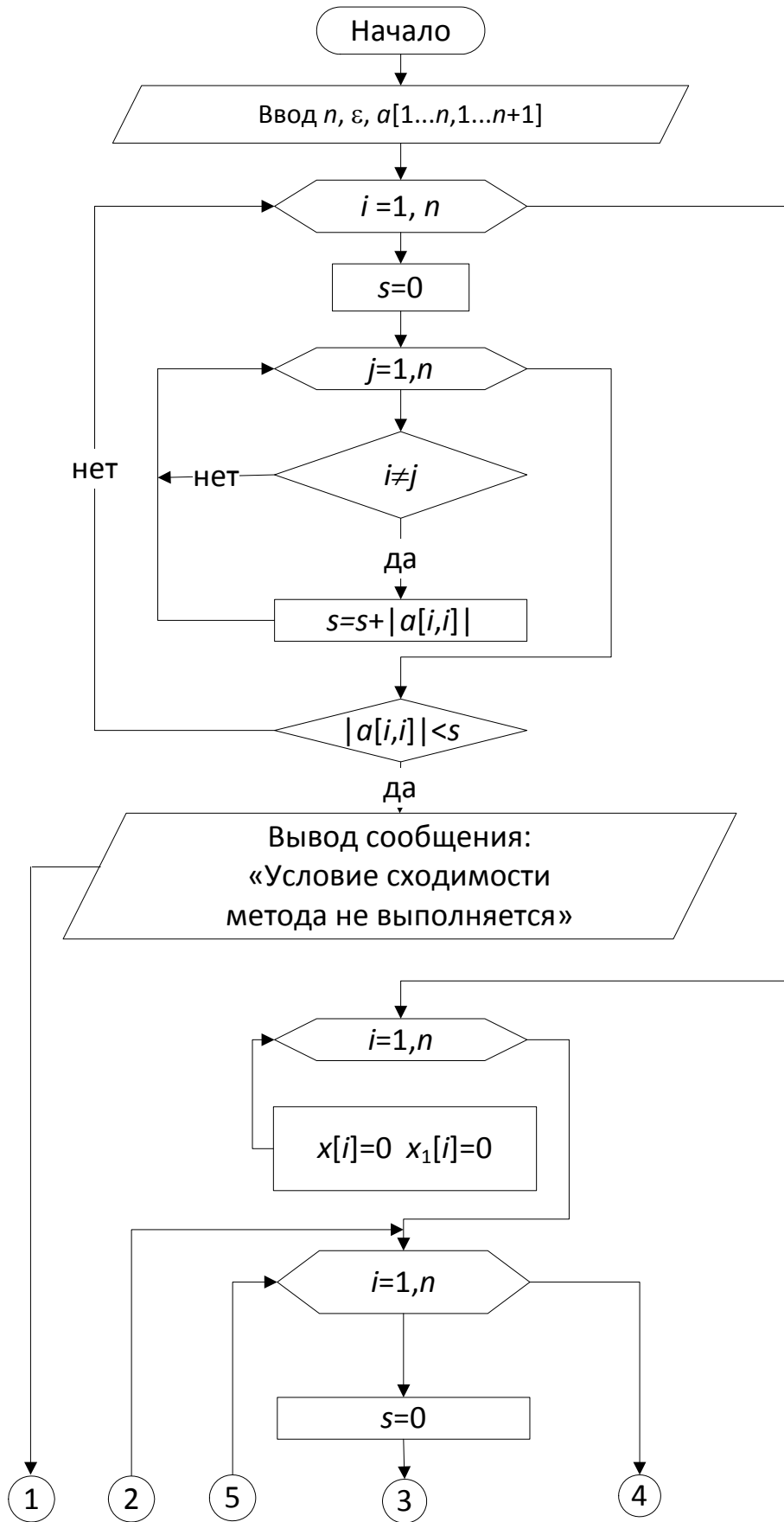
$$|a_{ii}| \geq |a_{i1}| + \dots + |a_{i,i-1}| + |a_{i,i+1}| + \dots + |a_{in}|. \quad (3.30)$$

Блок-схема алгоритма решения системы линейных уравнений итерационным методом Гаусса–Зейделя представлена на рис. 3.2, программа расчета на языке Паскаль приведена в приложении.

В качестве практического примера использования методов решения систем линейных уравнений приведем поиск коэффициентов параболической аппроксимации по набору экспериментальных точек (см. пример 5.8 раздела 5.3.3). Решение этого примера надежнее проводить с помощью прямого метода Гаусса, т. к. условие сходимости итерационного метода Гаусса–Зейделя может не выполняться. Блок-схема алгоритма расчета представлена на рис. 3.3. Программа расчета на языке Паскаль приведена в приложении. Матрица коэффициентов системы линейных уравнений обозначена двумерным массивом aa , искомые коэффициенты параболической аппроксимации – массивом a .

Вопросы для самоконтроля

1. В чем состоит постановка задачи при решении систем линейных уравнений?
2. Какие знаете методы решения линейных уравнений?
3. На чем основано решение систем линейных уравнений методом Гаусса?
4. Сущность метода Гаусса–Зейделя?



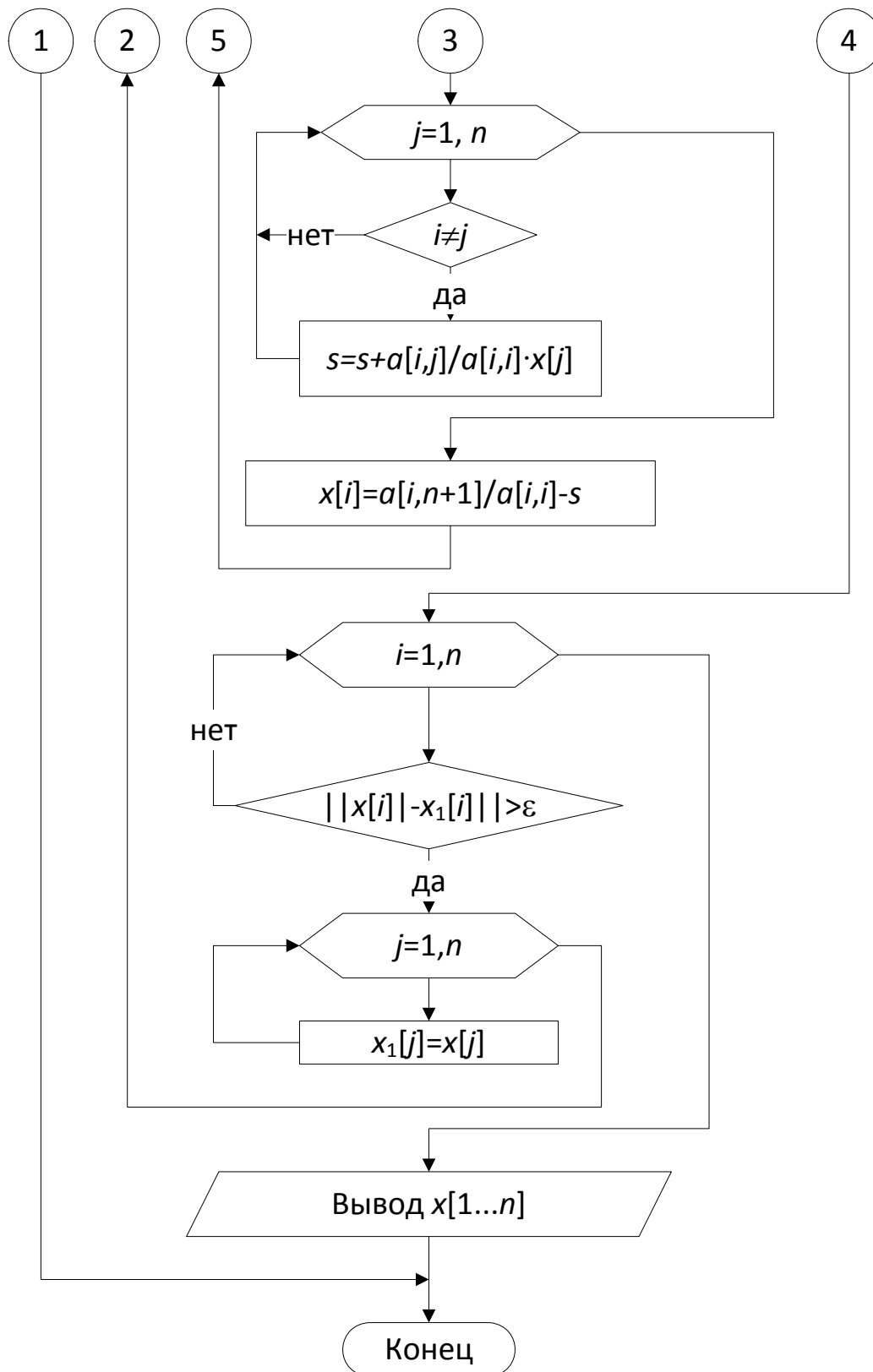
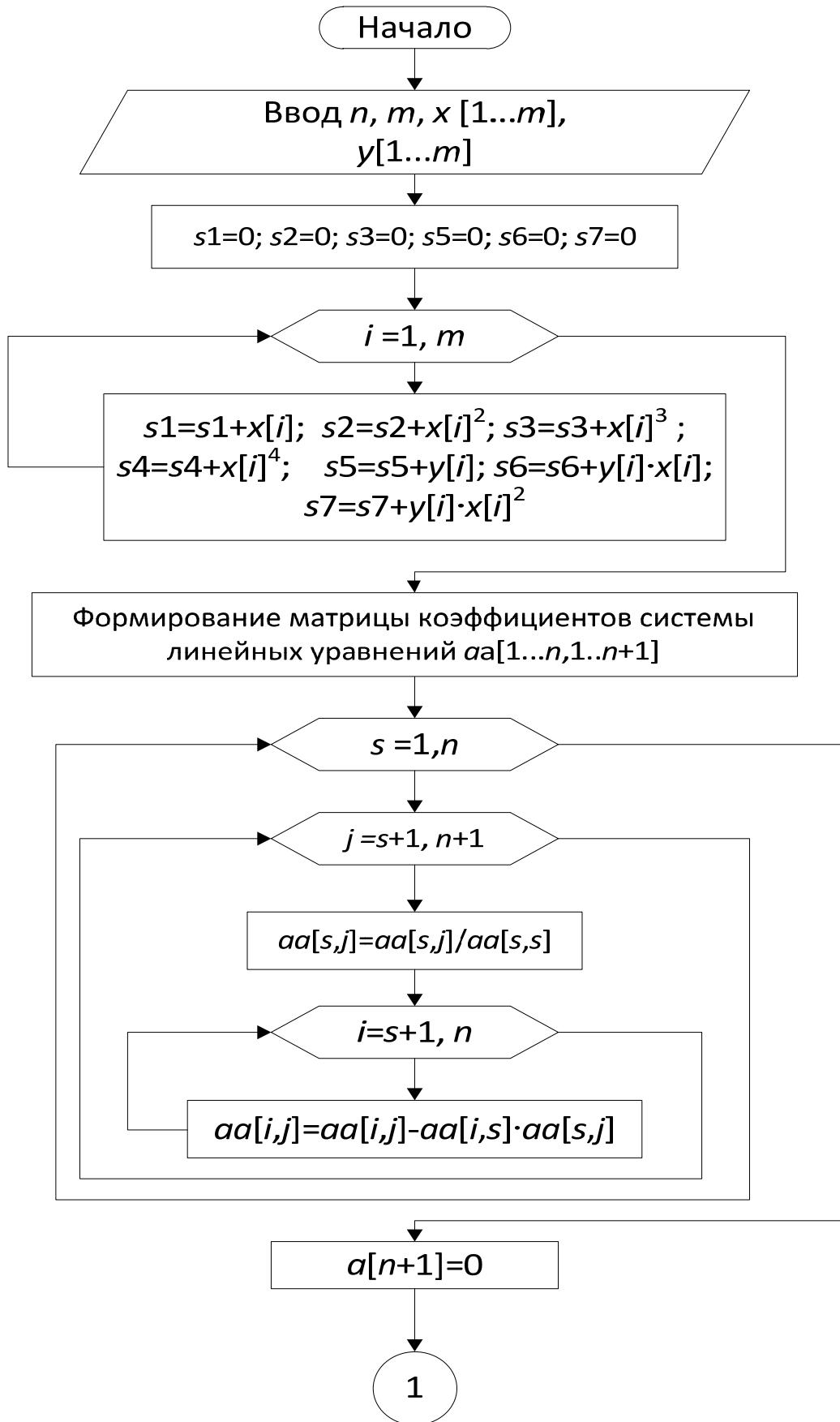


Рис. 3.2. Блок-схема решения системы линейных уравнений методом Гаусса–Зейделя



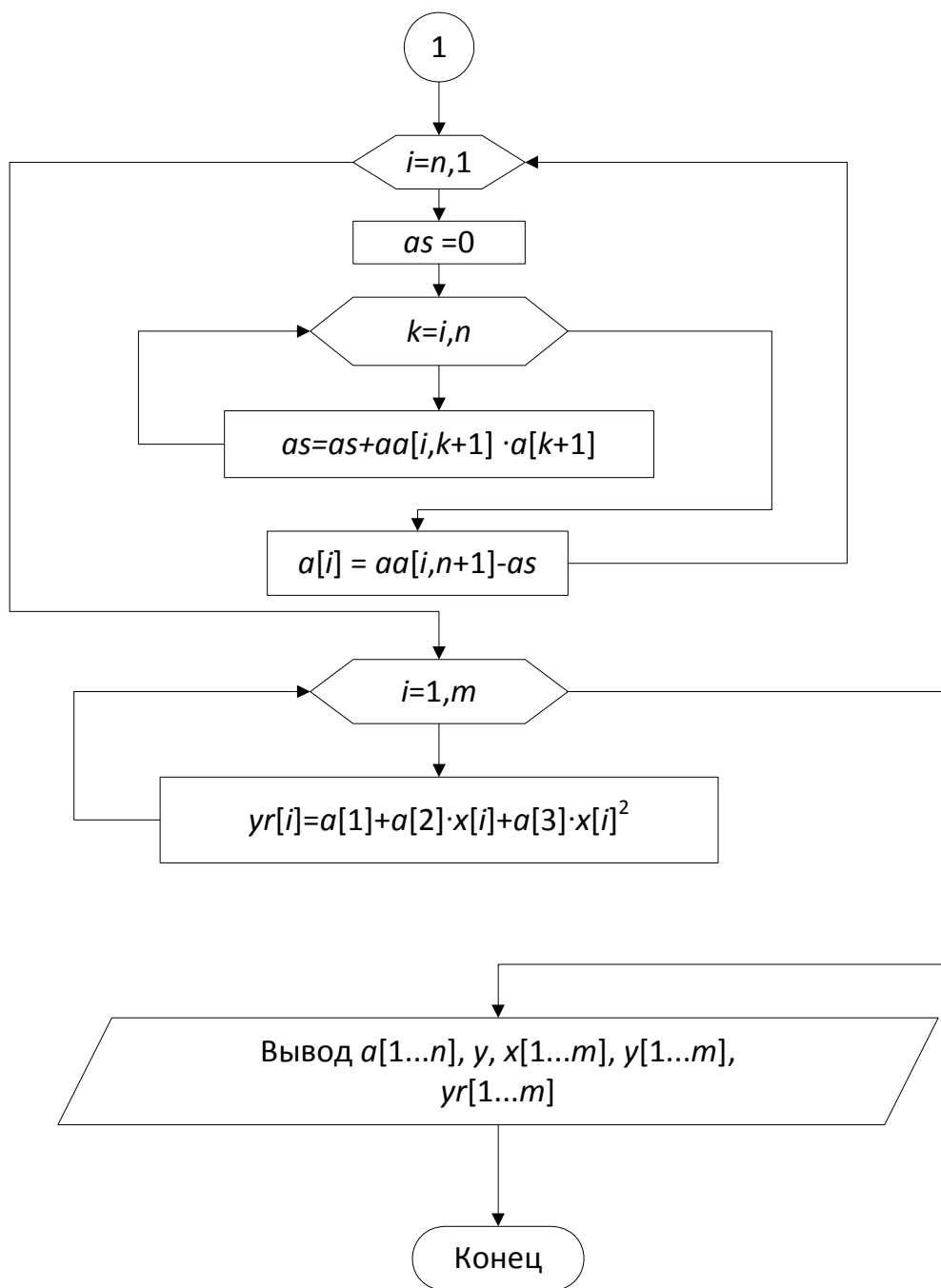


Рис. 3.3. Блок-схема расчета коэффициентов квадратичной аппроксимации зависимости теплоемкости циклопропана от температуры с использованием метода Гаусса

4. СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Многие практические задачи сводятся к решению системы нелинейных уравнений [2, 6, 10, 12].

Пусть для вычисления неизвестных x_1, x_2, \dots, x_n требуется решить систему n нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ \dots\dots\dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

В отличие от систем линейных уравнений не существует прямых методов решения нелинейных систем общего вида. Лишь в некоторых случаях систему (4.1) можно решить непосредственно. Например, для случая двух уравнений иногда удается выразить одно неизвестное через другое и таким образом свести задачу к решению одного нелинейного уравнения относительно одного неизвестного. Для решения систем нелинейных уравнений обычно используют итерационные методы. Рассмотрим два из них – метод простой итерации и метод Ньютона.

4.1. Метод простой итерации

Систему уравнений (4.1) представим в следующем виде:

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ \dots\dots\dots \\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{cases} \quad (4.2)$$

Запишем систему (4.2) в векторной форме:

$$x = \varphi(x), \quad (4.3)$$

где

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \varphi(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \varphi_n(x) \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

Для нахождения вектора корня $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ уравнения (4.3) часто удобно использовать *метод итерации*:

$$x^{(p+1)} = \varphi(x^{(p)}) \quad (p = 0, 1, 2, \dots), \quad (4.5)$$

где начальное приближение $x^{(0)} \approx x^*$. Это грубое значение искомого корня. Заметим, что если процесс итерации (4.5) сходится, то предельное значение

$$\xi = \lim_{p \rightarrow \infty} x^{(p)} \quad (4.6)$$

обязательно является корнем уравнения (4.3). Действительно, предполагая, что соотношение (4.6) выполнено, и переходя к пределу в равенстве (4.5) при $p \rightarrow \infty$, в силу непрерывности функции $\varphi(x)$ будем иметь:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} x^{(p+1)} = \varphi\left(\lim_{p \rightarrow \infty} x^{(p)}\right),$$

т. е.

$$\xi = \varphi(\xi).$$

Таким образом, ξ есть корень векторного уравнения (4.3).

Рассмотрим метод простой итерации на примере системы двух нелинейных уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= 0; \\ F_2(x, y) &= 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Решением системы (4.7) для $x \in [a, b]$ и $y \in [c, d]$ будут такие значения x^* и y^* , которые обращают эту систему в тождество. Необходимо найти x^* и y^* с заданной степенью точности ε .

Запишем систему (4.7) в эквивалентной форме:

$$\begin{aligned} x &= \varphi_1(x, y); \\ y &= \varphi_2(x, y). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Последовательные приближения будут вычисляться по формулам:

$$\begin{aligned} x_1 &= \varphi_1(x_0, y_0); \\ y_1 &= \varphi_2(x_0, y_0); \\ x_2 &= \varphi_1(x_1, y_1); \\ y_2 &= \varphi_2(x_1, y_1); \\ &\dots\dots\dots \\ x_{n+1} &= \varphi_1(x_n, y_n); \\ y_{n+1} &= \varphi_2(x_n, y_n), \end{aligned} \quad (4.9)$$

где x_0, y_0 – начальные приближения значения искомого корня.

Итерационный процесс можно считать законченным, как только выполнится неравенство

$$|x_{n+1} - x_n| + |y_{n+1} - y_n| \leq \varepsilon \text{ или } |y_{n+1} - y_n| \leq \varepsilon. \quad (4.10)$$

Для определения сходимости процесса имеет место следующая теорема.

Теорема. Пусть в некоторой заданной области $x \in [a, b]$ и $y \in [c, d]$ имеется единственное решение x^*, y^* системы (4.8) тогда, если:

- $\varphi_1(x, y)$ и $\varphi_2(x, y)$ определены и непрерывно дифференцируемы в заданной области;
- начальные приближения x_0, y_0 и все последующие приближения x_n, y_n принадлежат заданной области;
- в рассматриваемой области выполняются неравенства:

$$\left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right| \leq 1,;$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right| \leq 1,$$

или

(4.11)

$$\left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right| \leq 1;$$

$$\left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right| \leq 1,$$

то процесс последовательных приближений (4.9) сходится к решению системы уравнений (4.11).

Пример 4.1. Методом итерации приближенно решить систему

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 = 1, \\ x_1^3 - x_2 = 0. \end{cases}$$

Решение. Преобразуем данную систему к виду (4.2):

$$\begin{cases} x_2 = \sqrt{1 - x_1^2}, \\ x_1 = \sqrt[3]{x_2}. \end{cases}$$

Из графического построения (см. рис. 4.1) видно, что система имеет два решения, отличающиеся только знаком.

Ограничимся нахождением положительного решения. Из чертежа видим, что за начальное приближение положительного решения системы можно принять

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} 0,8 \\ 0,5 \end{bmatrix}.$$

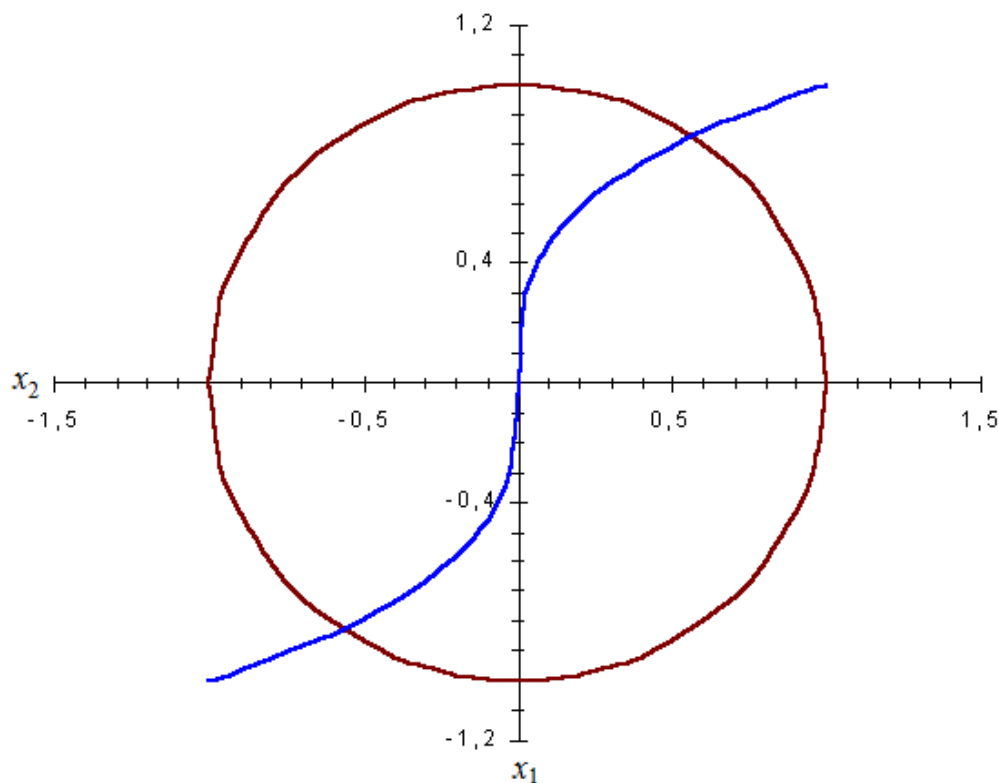


Рис. 4.1. Отделение корней системы нелинейных уравнений

Полагая

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt[3]{x_2} \\ \sqrt{1-x_1^2} \end{cases},$$

будем иметь

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt[3]{0,5} \\ \sqrt{1-0,8^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,7937 \\ 0,6000 \end{bmatrix}.$$

Аналогично,

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt[3]{0,6} \\ \sqrt{1-0,7937^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,8434 \\ 0,6083 \end{bmatrix},$$

$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} \sqrt[3]{0,6083} \\ \sqrt{1 - 0,8434^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,8473 \\ 0,5372 \end{bmatrix}$$

и т. д.

Точное решение системы $x_1 = 0,8261$, $x_2 = 0,5636$.

Блок-схема метода итераций приведена на рис. 4.2. Имеют место следующие обозначения неравенств (4.11):

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right| &= D_1; \\ \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right| &= D_2; \\ \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right| &= D_3; \\ \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right| &= D_4. \end{aligned} \tag{4.12}$$

4.2. Метод Ньютона

Этот метод обладает более быстрой сходимостью, чем метод простой итерации. В случае одного уравнения $f(x)=0$ алгоритм метода Ньютона может быть получен путем записи уравнения касательной к кривой $y=f(x)$ (линеаризация кривой $y=f(x)$). В основе метода Ньютона для системы уравнений также лежит идея линеаризации, а именно использование разложения функций $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в ряд Тэйлора. Причем члены, содержащие вторые (и более высоких порядков) производные, отбрасываются.

Запишем систему (4.1) в векторной форме:

$$f(x) = 0, \tag{4.13}$$

$$f = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ f_n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}.$$

где

Для решения системы (4.1) будем использовать метод последовательных приближений. Предположим, что найдено p -е приближение

$$x^{(p)} = (x_1^{(p)}, x_2^{(p)}, \dots, x_n^{(p)})$$

одного из изолированных корней $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ векторного уравнения (4.13). Тогда точный корень уравнения (4.1) можно представить в виде:

$$x = x^{(p)} + \varepsilon^{(p)}, \quad (4.14)$$

где $\varepsilon^{(p)} = (\varepsilon_1^{(p)}, \varepsilon_2^{(p)}, \dots, \varepsilon_n^{(p)})$ – поправка (погрешность корня).

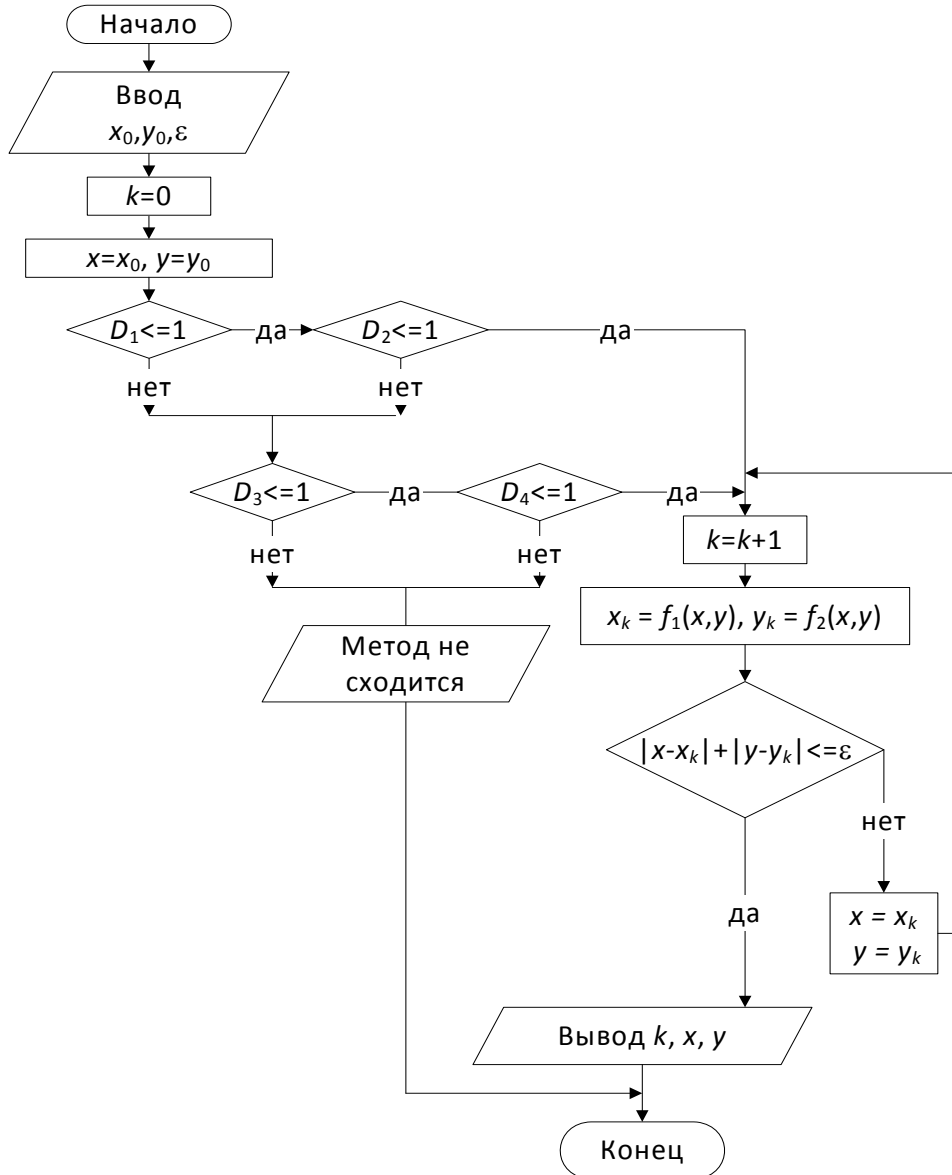


Рис. 4.2. Блок-схема метода простых итераций

Подставляя выражение (4.14) в уравнение (4.13), получим:

$$f(x^{(p)} + \varepsilon^{(p)}) = 0. \quad (4.15)$$

Предполагая, что функция $f(x)$ непрерывно дифференцируема в некоторой выпуклой области, содержащей x и $x^{(p)}$, разложим левую часть уравнения (4.15) по степеням малого вектора $\varepsilon^{(p)}$, ограничиваясь линейными членами,

$$f(x^{(p)} + \varepsilon^{(p)}) = f(x^{(p)}) + f'(x^{(p)}) \cdot \varepsilon^{(p)} = 0. \quad (4.16)$$

Из формулы (4.16) вытекает, что под производной $f'(x)$ следует понимать *матрицу Якоби* системы функций f_1, f_2, \dots, f_n относительно переменных x_1, x_2, \dots, x_n , т. е.

$$f'(x) = W(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}, \quad (4.17)$$

или в краткой записи

$$f'(x) = W(x) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right], \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (4.18)$$

Система (4.16) представляет собой линейную систему относительно поправок $\varepsilon_i^{(p)}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) с матрицей $W(x)$, поэтому формула (4.16) может быть записана в следующем виде:

$$f(x^{(p)}) + W(x^{(p)}) \cdot \varepsilon^{(p)} = 0. \quad (4.19)$$

Отсюда, предполагая, что матрица $W(x^{(p)})$ – неособенная, получим:

$$\varepsilon^{(p)} = -W^{-1}(x^{(p)}) \cdot f(x^{(p)}).$$

Следовательно,

$$x^{(p+1)} = x^{(p)} - W^{-1}(x^{(p)}) \cdot f(x^{(p)}), \quad p = 0, 1, 2, \dots \quad (4.19^*)$$

(метод Ньютона).

За нулевое приближение $x^{(0)}$ можно взять грубое значение искомого корня.

В качестве примера рассмотрим метод Ньютона для решения системы двух уравнений:

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= 0; \\ F_2(x, y) &= 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Пусть x_0 и y_0 – начальные приближенные значения неизвестных.

Последовательные приближения к решению системы по методу Ньютона вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= x_0 - \frac{1}{W(x_0, y_0)} \left(F_1(x_0, y_0) \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial y} - F_2(x_0, y_0) \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial y} \right); \\
 y_1 &= y_0 - \frac{1}{W(x_0, y_0)} \left(F_2(x_0, y_0) \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial x} - F_1(x_0, y_0) \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial x} \right); \\
 &\dots\dots\dots (4.21) \\
 x_{n+1} &= x_n - \frac{1}{W(x_n, y_n)} \left(F_1(x_n, y_n) \frac{\partial F_2(x_n, y_n)}{\partial y} - F_2(x_n, y_n) \frac{\partial F_1(x_n, y_n)}{\partial y} \right); \\
 y_{n+1} &= y_n - \frac{1}{W(x_n, y_n)} \left(F_2(x_n, y_n) \frac{\partial F_1(x_n, y_n)}{\partial x} - F_1(x_n, y_n) \frac{\partial F_2(x_n, y_n)}{\partial x} \right),
 \end{aligned}$$

где

$$W(x_0, y_0) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial x} & \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial y} \\ \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial x} & \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial y} \end{vmatrix} \neq 0$$

(4.22)

$$W(x_n, y_n) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1(x_n, y_n)}{\partial x} & \frac{\partial F_1(x_n, y_n)}{\partial y} \\ \frac{\partial F_2(x_n, y_n)}{\partial x} & \frac{\partial F_2(x_n, y_n)}{\partial y} \end{vmatrix} \neq 0.$$

Процесс вычисления по итерационным формулам (4.21) продолжается до тех пор, пока не будут выполнены условия:

$$|x_{n+1} - x_n| + |y_{n+1} - y_n| \leq \varepsilon,$$

(4.23)

или

$$|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon \quad |y_{n+1} - y_n| \leq \varepsilon.$$

Блок-схема алгоритма метода Ньютона приведена на рис. 4.3.

В формулах для расчета x_{n+1} и y_{n+1} системы (4.21) обозначим числители: D_1 и D_2 , а знаменатель – W .

Представим уравнение (4.21) в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n - \frac{F_1 \cdot F'_{2y} - F_2 \cdot F'_{1y}}{F'_{1x} \cdot F'_{2y} - F'_{2x} \cdot F'_{1y}}; \\
 y_{n+1} &= y_n - \frac{F_2 \cdot F'_{1x} - F_1 \cdot F'_{2x}}{F'_{1x} \cdot F'_{2y} - F'_{2x} \cdot F'_{1y}}.
 \end{aligned}$$

(4.24)

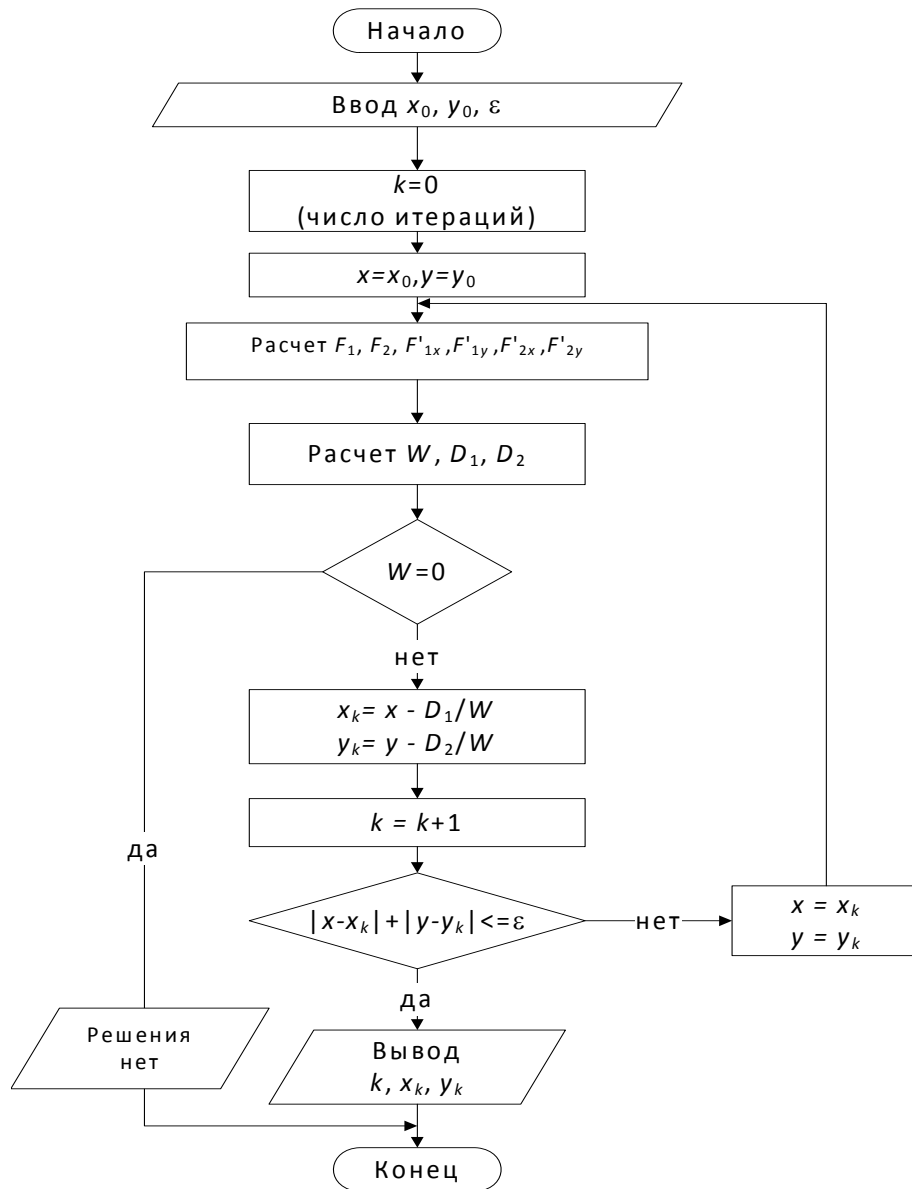


Рис. 4.3. Блок-схема метода Ньютона

Вопросы для самоконтроля

1. Какие методы обычно применяются для решения систем нелинейных уравнений?
2. В чем суть решения систем нелинейных уравнений методом простых итераций?
3. Условие окончания итерационного процесса?
4. Что лежит в основе применения метода Ньютона?

5. МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

5.1. Понятие о приближении функции

При исследовании химических и химико-технологических процессов, как правило, возникает необходимость в обработке и анализе данных, полученных в эксперименте, с последующим применением результатов обработки при моделировании и проектировании реальных процессов. Пусть дана некоторая функция $y=f(x)$. Например, это функция выхода продуктов реакции от концентрации исходного компонента. Это означает, что любому значению x (концентрации исходного компонента) ставится в соответствие значение y (выход продукта реакции). На практике часто оказывается, что найти это значение достаточно сложно: функция $f(x)$ является решением сложной задачи (сложный хроматографический анализ) или $f(x)$ измеряется в дорогостоящем эксперименте. В этом случае вычисляют небольшую таблицу значений выходного параметра от аргумента и по некоторым точкам строят функцию $y=f(x)$, где x – концентрация исходного компонента, y – концентрация продукта реакции.

Задача о приближении (*аппроксимации*) функции ставится следующим образом [2–5, 10, 11]. Функцию $f(x)$, где x изменяется в некоторой области, требуется приближенно заменить (аппроксимировать) некоторым многочленом $P_m(x)$ так, чтобы отклонение $P_m(x)$ от $f(x)$ в заданной области было наименьшим. Полином $P_m(x)$ при этом называется *аппроксимирующим*. Для практики важен случай аппроксимации функции многочленом степени m

$$P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m. \quad (5.1)$$

Коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_m должны подбираться так, чтобы отклонение многочлена от данной функции было наименьшим, а следовательно, задача о приближении функции состоит в определении a_0, a_1, \dots, a_m полинома (5.1).

Если приближение строится на заданном дискретном множестве точек x_i , то аппроксимация называется *точечной*. К ней относятся интерполирование, среднеквадратичное приближение, равномерное приближение и т. д.

Графически задача интерполирования заключается в том, чтобы построить такую интерполирующую функцию, которая бы проходила через все узлы интерполирования (рис. 5.1).

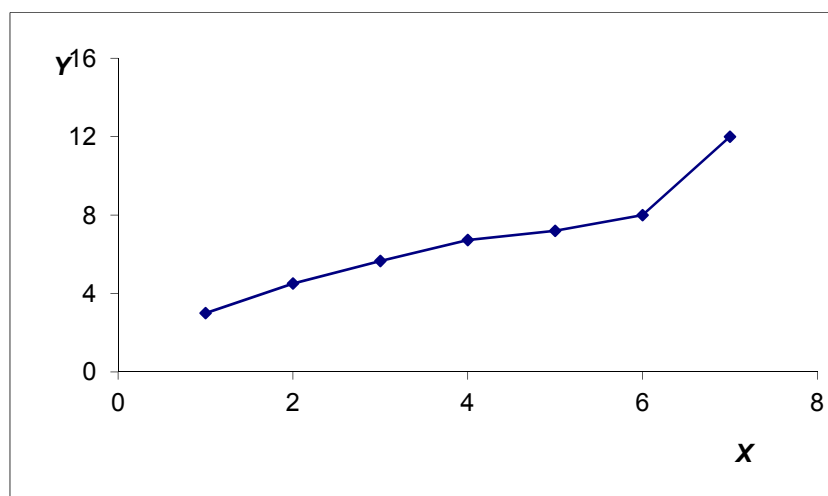


Рис. 5.1

Близость интерполяционного многочлена к заданной функции состоит в том, что их значения совпадают на заданной системе точек.

При решении задачи интерполирования обычно принимается, что:

- интерполируемая функция непрерывна на отрезке $[a, b]$ и в каждой точке имеет конечные производные любого порядка;
- узлы интерполирования отличны друг от друга.

5.2.1. Линейная интерполяция

Простейшим и часто используемым видом интерполяции является *линейная интерполяция*. Она состоит в том, что заданные точки x_i, y_i при $i=0, 1, 2, \dots, n$ соединяются прямолинейными отрезками и функцию $f(x)$ можно приближенно представить ломаной с вершинами в данных точках.

Уравнения каждого отрезка ломаной в общем случае разные. Поскольку имеется n интервалов (x_{i-1}, x_i) , то для каждого из них в качестве уравнения интерполяционного многочлена используется уравнение прямой, проходящей через две точки. В частности для i -го интервала можно написать уравнение прямой, проходящей через точки (x_{i-1}, y_{i-1}) и (x_i, y_i) , в виде:

$$\frac{y - y_{i-1}}{y_i - y_{i-1}} = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}.$$

Отсюда

$$y = a_i x + b_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad (5.4)$$

$$a_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, b_i = y_{i-1} - a_i x_{i-1}.$$

Следовательно, при использовании линейной интерполяции сначала нужно определить интервал, в который попадает значение аргумента x , а затем подставить его в формулу (5.4) и найти приближенное значение функции в этой точке.

5.2.2. Интерполяционный многочлен Лагранжа

Пусть функция $f(x)$ задана таблично. Это могут быть, например, значения концентраций продуктов реакции в зависимости от температуры, полученные экспериментально.

x	x_0	x_1	...	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$...	$f(x_n)$

Значения x_0, x_1, \dots, x_n называются узлами таблицы. Считаем, что узлы в общем случае не являются равноотстоящими (шаг таблицы неравномерный).

Построим интерполяционный многочлен на отрезке $[x_0, x_n]$. Запишем искомый многочлен в виде:

$$P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m. \quad (5.5)$$

Геометрически задача интерполирования сводится к построению кривой через заданные точки.

Аналитически задача сводится к решению системы уравнений

$$Y_i(x) = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \dots + a_mx_i^m, \quad i = 0 \dots n. \quad (5.6)$$

Для определения коэффициентов многочлена (5.5) необходимо располагать $n + 1$ узловой точкой.

Чтобы система уравнений имела единственное решение, необходимо, чтобы количество неизвестных коэффициентов полинома (a_j) – $m + 1$ – равнялось количеству уравнений $n + 1$ или $m = n$.

Пусть в $(n + 1)$ -й точках x_0, x_1, \dots, x_n определены значения y_0, y_1, \dots, y_n . Требуется построить многочлен $P_n(x)$, принимающий в узловых точках заданные значения y_i , т. е. такой, что

$$P_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Лагранж предложил следующую форму интерполяционного полинома:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n Y_i \cdot L_i(x), \quad (5.7)$$

где $L_i(x)$ – множитель Лагранжа, имеющий вид:

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{(x-x_k)}{(x_i-x_k)}. \quad (5.8)$$

Следовательно, формулу Лагранжа можно представить в виде:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \left(\prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^n \frac{x-x_k}{x_i-x_k} \right). \quad (5.9)$$

Числитель и знаменатель не должны включать в себя значения $x=x_i$, так как результат будет равен нулю. В развернутом виде формулу Лагранжа можно записать в виде:

$$P_n(x) = Y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} + Y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} + \dots + Y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)\dots(x_n-x_{n-1})}. \quad (5.10)$$

Блок-схема метода Лагранжа приведена на рис. 5.2.

Пример 5.1. Для функции $y = \sin \pi x$ построить интерполяционный полином Лагранжа, выбрав узлы: x_0, x_1, x_2 .

X	0	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{2}$
Y	0	$\frac{1}{2}$	1

Применяя формулу (5.10), получим:

$$P(X) = \frac{\left(x - \frac{1}{6}\right)\left(x - \frac{1}{2}\right)}{\left(0 - \frac{1}{6}\right)\left(0 - \frac{1}{2}\right)} \cdot 0 + \frac{(x-0)\left(x - \frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{1}{6} - 0\right)\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}\right)} \cdot \frac{1}{2} + \frac{(x-0)\left(x - \frac{1}{6}\right)}{\left(\frac{1}{2} - 0\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6}\right)} \cdot 1,$$

$$P(x) = \frac{7}{2}x - 3 \cdot x^2.$$

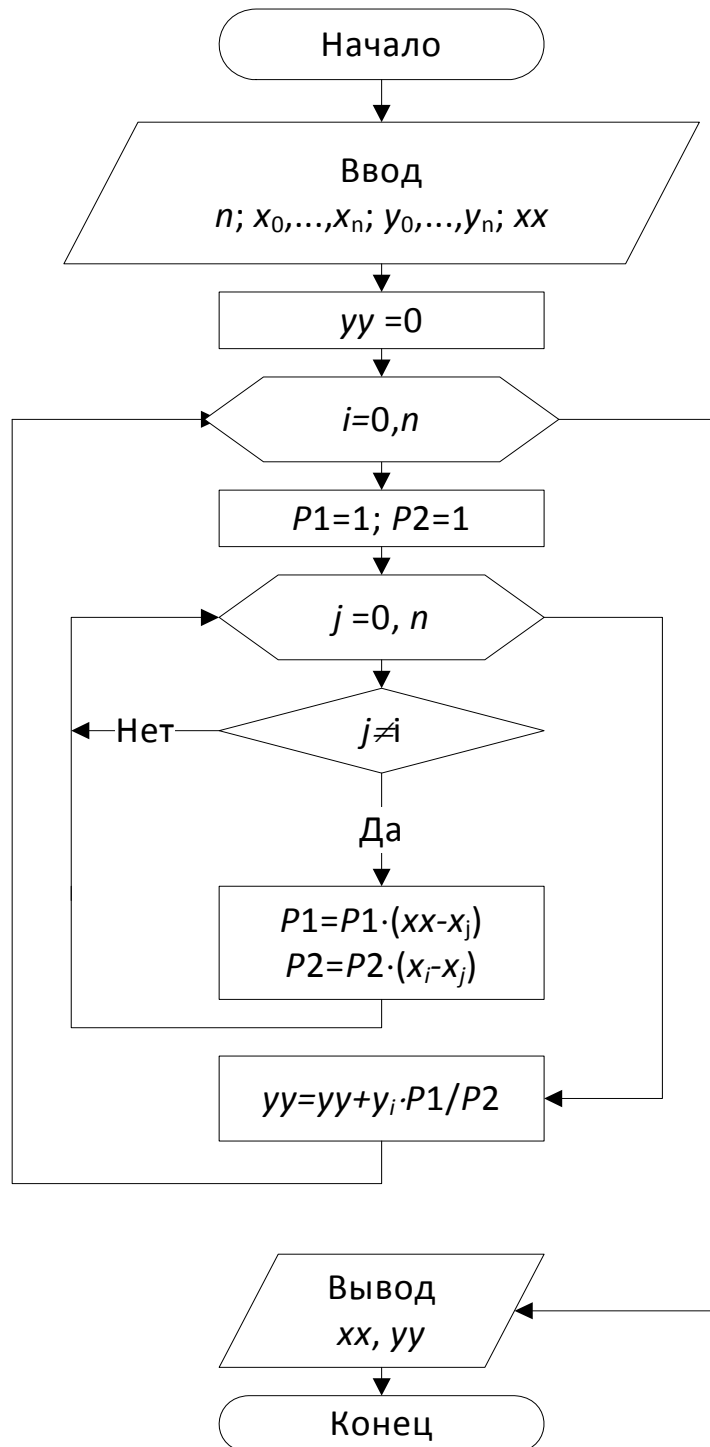


Рис. 5.2. Блок-схема метода Лагранжа

Пример 5.2. Дана таблица значений теплоемкости вещества в зависимости от температуры $C_p = f(T)$.

$x (T)$	300	400	500	600
$y (C_p)$	52,89	65,61	78,07	99,24

Вычислить значение теплоемкости в точке $T=450$ К. Для решения воспользуемся формулой (5.10):

$$\begin{aligned}
 f(450) = & \frac{(450-400)(450-500)(450-600)}{(300-400)(300-500)(300-600)} \cdot 52,89 + \\
 & + \frac{(450-300)(450-500)(450-600)}{(400-300)(400-500)(400-600)} \cdot 65,61 + \\
 & + \frac{(450-300)(450-400)(450-600)}{(500-300)(500-400)(500-600)} \cdot 78,07 + \\
 & + \frac{(450-300)(450-400)(450-500)}{(600-300)(600-400)(600-500)} \cdot 99,24 .
 \end{aligned}$$

Значение теплоемкости при температуре 450 К

$$C_p(450) = 71,31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}).$$

5.2.3. Интерполяционные многочлены Ньютона

Рассмотрим понятие *конечных разностей*.

Пусть задана функция $y=f(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$, который разбит на n одинаковых отрезков (случай равноотстоящих значений аргумента): $\Delta x = h = \text{const}$. Для каждого узла $x_0, x_1 = x_0 + h, \dots, x_n = x_0 + n \cdot h$ определены значения функции в виде

$$f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, \dots, f(x_n) = y_n. \quad (5.11)$$

Введем понятие *конечных разностей*.

Конечные разности первого порядка

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0;$$

$$\Delta y_1 = y_2 - y_1;$$

.....

$$\Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}.$$

Конечные разности второго порядка

$$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0;$$

$$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1;$$

.....

$$\Delta^2 y_{n-2} = \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2}.$$

Аналогично определяются конечные разности высших порядков:

$$\Delta^k y_0 = \Delta^{k-1} y_1 - \Delta^{k-1} y_0;$$

$$\Delta^k y_1 = \Delta^{k-1} y_2 - \Delta^{k-1} y_1;$$

.....

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n - k.$$

Конечные разности функций удобно располагать в таблицах, которые могут быть диагональными (табл. 5.1) или горизонтальными (табл. 5.2).

Таблица 5.1

Диагональная таблица

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$	$\Delta^5 y_i$
x_0	y_0					
x_1	y_1	Δy_0				
x_2	y_2	Δy_1	$\Delta^2 y_0$			
x_3	y_3	Δy_2	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$	
x_4	y_4	Δy_3	$\Delta^2 y_2$	$\Delta^3 y_1$	$\Delta^4 y_1$	$\Delta^5 y_0$
x_5	y_5	Δy_4	$\Delta^2 y_3$	$\Delta^3 y_2$		

Таблица 5.2

Горизонтальная таблица

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$	$\Delta^5 y_i$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$	$\Delta^5 y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_1$	$\Delta^4 y_1$	
x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$	$\Delta^3 y_2$		
x_3	y_3	Δy_3	$\Delta^2 y_3$			
x_4	y_4	Δy_4				
x_5	y_5					

Первая интерполяционная формула Ньютона

Пусть для функции $y=f(x)$ заданы значения $y_i=f(x_i)$ для равностоящих значений независимых переменных:

$$x_n = x_0 + nh,$$

где h – шаг интерполяции.

Необходимо найти полином $P_n(x)$ степени не выше n , принимающий в точках (узлах) x_i значения:

$$P_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n. \quad (5.12)$$

Интерполирующий полином ищется в виде:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ \dots + a_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \quad (5.13)$$

Задача построения многочлена сводится к определению коэффициентов a_i из условий:

$$\begin{aligned} P_n(x_0) &= y_0, \\ P_n(x_1) &= y_1, \\ &\dots\dots\dots \\ P_n(x_n) &= y_n. \end{aligned} \tag{5.14}$$

Полагаем в (5.13) $x = x_0$, т. к. второе, третье и другие слагаемые равны 0, то

$$P_n(x_0) = y_0 = a_0; \quad a_0 = y_0.$$

Найдем коэффициент a_1 .

При $x = x_1$ получим:

$$\begin{aligned} P_n(x_1) &= y_1 = y_0 + a_1(x_1 - x_0); \\ y_1 &= y_0 + a_1(x_1 - x_0), \\ a_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y_0}{h}. \end{aligned}$$

Для определения a_2 составим конечную разность второго порядка.

При $x = x_2$ получим:

$$\begin{aligned} P_n(x_2) &= y_2 = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_0 + 2\Delta y_0 + a_2 2h^2, \\ a_2 &= \frac{y_2 - y_0 - 2\Delta y_0}{2h^2} = \frac{y_2 - y_0 - 2y_1 + 2y_0}{2h^2} = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2h^2} = \\ &= \frac{(y_2 - y_1) - (y_1 - y_0)}{2h^2} = \frac{\Delta y_1 - \Delta y_0}{2h^2} = \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}. \end{aligned}$$

Аналогично можно найти другие коэффициенты. Общая формула имеет вид:

$$a_k = \frac{\Delta^k y_0}{k!h^k}, \quad k = 1, \dots, n. \tag{5.15}$$

Подставляя эти выражения в формулу (5.13), получаем:

$$\begin{aligned} P_n(X) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{1! \cdot h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2! \cdot h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &\dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! \cdot h^n}(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}), \end{aligned} \tag{5.16}$$

где x_i, y_i – узлы интерполяции; x – текущая переменная; h – разность между двумя узлами интерполяции; h – величина постоянная, т. е. узлы интерполяции равно отстоят друг от друга.

Этот многочлен называют *интерполяционным полиномом Ньютона* для интерполяции в начале таблицы (интерполирование «вперед»), или *первым полиномом Ньютона*.

Для практического использования этот полином записывают в преобразованном виде, вводя обозначение $t = (x - x_0)/h$, тогда

$$P_n(x) = y_0 + t \cdot \Delta Y_0 + \frac{t \cdot (t-1)}{2!} \cdot \Delta^2 y_0 + \dots + \frac{t \cdot (t-1) \dots (t-n+1)}{n!} \cdot \Delta^n y_0. \quad (5.17)$$

Эта формула применима для вычисления значений функции для значений аргументов, близких к началу интервала интерполирования.

Блок-схема алгоритма метода Ньютона для интерполирования «вперед» приведена на рис. 5.3, программа – в приложении.

Пример 5.3. Дана таблица значений теплоемкости вещества в зависимости от температуры $C_p = f(T)$ (табл. 5.3).

Таблица 5.3

$x (T)$	300	400	500	600
$Y (C_p)$	52,88	65,61	78,07	99,24

Построить интерполяционный многочлен Ньютона для заданных значений функции:

$$n = 3; h = 100.$$

Составим таблицу конечных разностей функции (табл. 5.4).

Таблица 5.4

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
300	52,88	12,73	-0,27	8,98
400	65,61	12,46	8,71	
500	78,07	21,17		
600	99,24			

Воспользуемся формулой (5.16):

$$P_3(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0) \times (x - x_1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!h^3}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2);$$

$$P_3(x) = 52,88 + \frac{12,73}{100}(x - 300) - \frac{0,27}{2!100^2}(x - 300) \times \\ \times (x - 400) + \frac{8,98}{3!100^3}(x - 300)(x - 400)(x - 500).$$

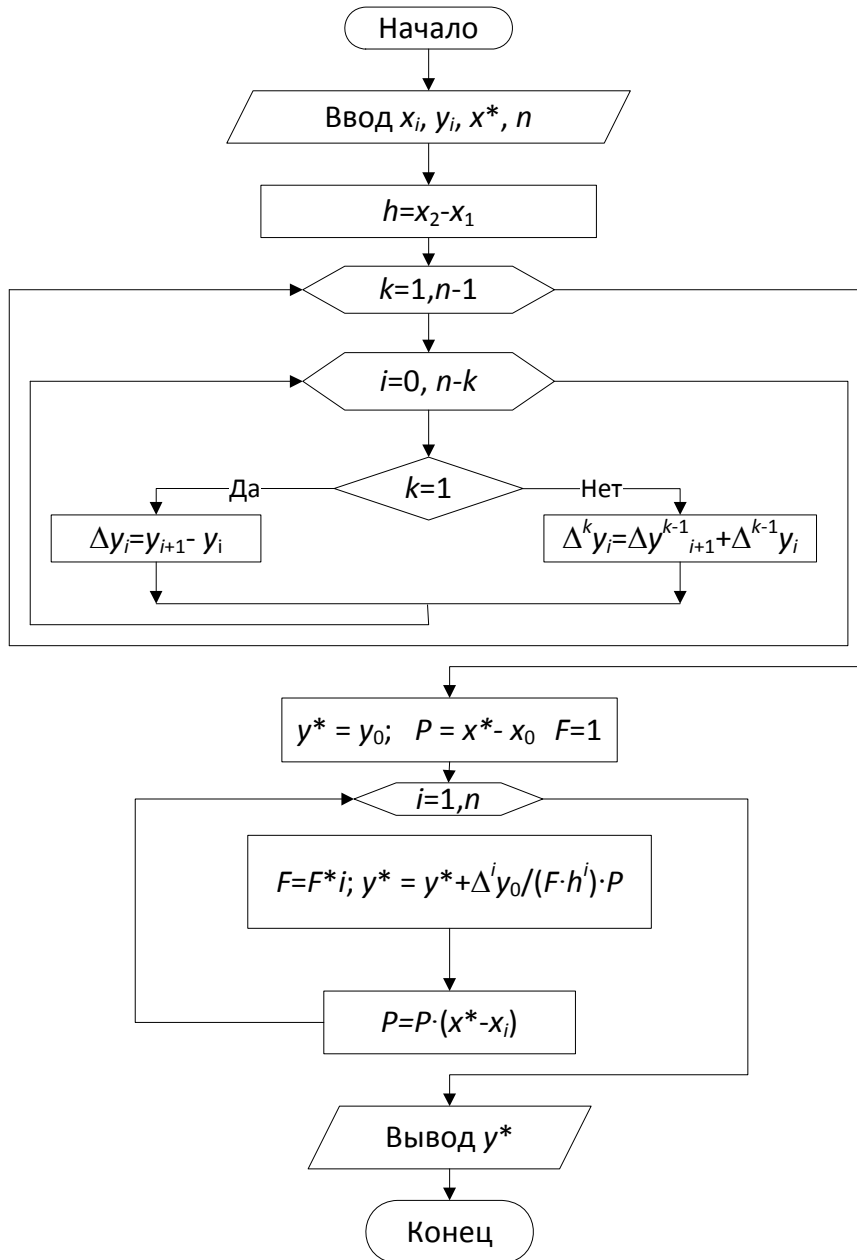


Рис. 5.3. Блок-схема алгоритма метода Ньютона для интерполирования «вперед»

После выполнения преобразований получим интерполяционный многочлен вида:

$$P_3(x) = 1,5 \cdot 10^{-6} x^3 - 0,00181x^2 + 0,842x - 76,94.$$

Полином имеет третью степень и дает возможность вычисления при помощи найденной формулы значения y для неизвестного x .

Пример 5.4. В табл. 5.3.1 приведены значения теплоемкости в зависимости от температуры. Определить значение теплоемкости в точке $T=450$ К.

Воспользуемся первой интерполяционной формулой Ньютона. Конечные разности рассчитаны в предыдущем примере (табл. 5.3.2), запишем интерполяционный многочлен при $x=450$ К:

$$P_3(450) = 52,88 + \frac{12,73}{100}(450 - 300) - \frac{0,27}{2!100^2}(450 - 300)(450 - 400) + \\ + \frac{8,98}{3!100^3}(450 - 300)(450 - 400)(450 - 500) = 71,31.$$

Таким образом, теплоемкость при температуре 450 К будет

$$C_p(450) = 71,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}.$$

Значение теплоемкости при $T=450$ К получили такое же, что и рассчитанное по формуле Лагранжа.

Вторая интерполяционная формула Ньютона

Для нахождения значений функций в точках, расположенных в конце интервала интерполирования, используют второй интерполяционный полином Ньютона. Запишем интерполяционный многочлен в виде

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_n) + a_2(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots \\ \dots + a_n(x - x_n)(x - x_{n-1}) \dots (x - x_1). \quad (5.18)$$

Коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_n определяем из условия:

$$P_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

Полагаем в (5.18) $x = x_n$, тогда

$$P_n(x_n) = a_0,$$

$$P_n(x_n) = y_n = a_0,$$

$$a_0 = y_n.$$

Полагаем $x = x_{n-1}$, тогда

$$P_n(x_{n-1}) = y_{n-1} = y_n + a_1(x_{n-1} - x_n), \quad h = x_n - x_{n-1},$$

следовательно,

$$a_1 = \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h}.$$

Если $x = x_{n-2}$, то

$$\begin{aligned}
 P_n(x_{n-2}) &= y_{n-2} = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x_{n-2} - x_n) + \\
 &+ a_2(x_{n-2} - x_n)(x_{n-2} - x_{n-1}); \\
 y_{n-2} &= y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(-2h) + a_2 \cdot 2h^2 = \\
 &= y_n - 2\Delta y_{n-1} + a_2 2h^2; \\
 a_2 &= \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}.
 \end{aligned}$$

Аналогично можно найти другие коэффициенты многочлена (5.18):

$$\begin{aligned}
 a_3 &= \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!h^3}, \\
 &\dots\dots\dots \\
 a_n &= \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}.
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

Подставляя эти выражения в формулу (5.18), получим *вторую интерполяционную формулу Ньютона*, или многочлен Ньютона для интерполирования «назад»:

$$\begin{aligned}
 P_n(x) &= y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x - x_n) \times \\
 &\times (x - x_{n-1}) + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!h^3}(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots \\
 &\dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_n)(x - x_{n-1}) \dots (x - x_1).
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned}
 \frac{x - x_n}{h} &= t, \quad \text{или} \quad x = x_n + th; \\
 \frac{x - x_{n-1}}{h} &= \frac{x - (x_n - h)}{h} = t + 1; \\
 \frac{x - x_{n-2}}{h} &= \frac{x - (x_{n-1} - 2h)}{h} = t + 2; \\
 &\dots\dots\dots \\
 \frac{x - x_1}{h} &= \frac{x - (x_n - 2h)}{h} = t + n - 1.
 \end{aligned}$$

Произведя замену в (5.19), получим:

$$P_n(x) = y_n + t\Delta y_{n-1} + \frac{t(t+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \dots$$

$$\dots + \frac{t(t+1)\dots(t+n-1)}{n!}\Delta^n y_0. \quad (5.21)$$

Это вторая формула Ньютона для интерполирования «назад».

Пример 5.5. Вычислить теплоемкость (см. табл. 5.3) для температуры $T=550$ К.

Воспользуемся второй формулой Ньютона (5.19) и соответствующими конечными разностями (см. табл. 5.4):

$$P_3(x) = y_3 + \frac{\Delta y_2}{h}(x - x_3) + \frac{\Delta^2 y_1}{2!h^2}(x - x_3) +$$

$$+(x - x_2) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!h^3}(x - x_3)(x - x_2)(x - x_1);$$

$$P_3(550) = 99,24 + \frac{21,17}{100}(550 - 600) + \frac{8,71}{2! 100^2}(550 - 600) \times$$

$$\times (550 - 500) + \frac{8,98}{3! 100^3}(550 - 600)(550 - 500)(550 - 400) = 87,01.$$

Следовательно, значение теплоемкости при температуре 550 К равно

$$C_p(550) = 97,01 \text{ Дж/(моль К)}.$$

5.3. Аппроксимация функций

В предыдущих разделах был рассмотрен один из способов приближения функции к табличным данным – интерполяция. Отличительной особенностью ее являлось то, что интерполирующая функция строго проходила через узловые точки таблицы, т. е. рассчитанные значения совпадали с табличными – $y_i = f(x_i)$. Эта особенность обуславливалась тем, что количество коэффициентов в интерполирующей функции (m) было равно количеству табличных значений (n). Однако, если для описания табличных данных будет выбрана функция с меньшим количеством коэффициентов ($m < n$), что часто встречается на практике, то уже нельзя подобрать коэффициенты функции так, чтобы функция проходила через каждую узловую точку. В лучшем случае она будет проходить каким-либо образом между ними и очень близко к ним (рис. 5.4). Такой способ описания табличных данных называется аппроксимацией, а функция – аппроксимирующей.

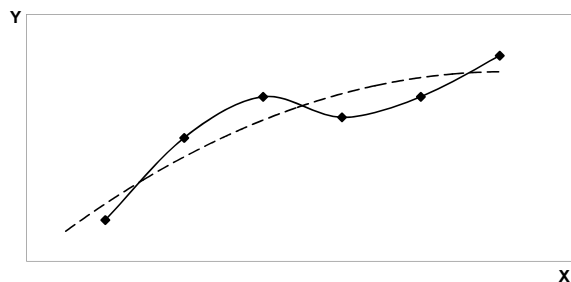


Рис. 5.4

— — интерполирующая функция;
 - - - - аппроксимирующая функция

Казалось бы, с помощью метода интерполяции можно описать табличные данные более точно, чем аппроксимации, тем не менее на практике возникают ситуации, когда последний метод предпочтительнее. Перечислим эти ситуации.

1. Когда количество табличных значений очень велико. В этом случае интерполирующая функция будет очень громоздкой. Удобнее выбрать более простую в применении функцию с небольшим количеством коэффициентов, хотя и менее точную.

2. Когда вид функции заранее определен. Такая ситуация возникает, если требуется описать экспериментальные точки какой-либо теоретической зависимостью. Например, константа скорости химической реакции зависит от температуры по уравнению Аррениуса $k = k_0 \cdot \exp(-E/RT)$, в котором два определяемых параметра k_0 – предэкспоненциальный множитель, E – энергия активации. А так как почти всегда экспериментальных точек бывает больше двух, то и возникает необходимость в аппроксимации.

3. Аппроксимирующая функция может сглаживать погрешности эксперимента, в отличие от интерполирующей функции. Так, на рис. 5.5 точками показаны табличные данные – результат некоторого эксперимента. Очевидно, что Y монотонно возрастает с увеличением X , а разброс данных объясняется погрешностью эксперимента.

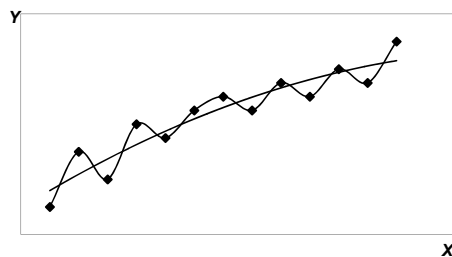


Рис. 5.5

Однако интерполирующая функция, проходя через каждую точку, будет повторять ошибки эксперимента, иметь множество экстремумов – минимумов и максимумов – и в целом неверно отображать характер зависимости Y от X . Этому недостатка лишена аппроксимирующая функция.

4. И наконец, интерполирующей функцией невозможно описать табличные данные, в которых есть несколько точек с одинаковым значением аргумента. А такая ситуация возможна, если один и тот же эксперимент проводится несколько раз при одних и тех же исходных данных.

Постановка задачи. Пусть, изучая неизвестную функциональную зависимость $y=f(x)$, был произведен ряд измерений величин x и y .

x	x_1	x_2	x_3	...	x_n
y	y_1	y_2	y_3	...	y_n

Если аналитическое выражение функции $f(x)$ неизвестно или весьма сложно, то возникает практически важная задача: найти такую эмпирическую формулу

$$\tilde{y} = \tilde{f}(x), \quad (5.22)$$

значения которой при $x=x_i$ возможно мало отличались бы от опытных данных y_i ($i=1, 2, \dots, n$).

Как правило, указывают достаточно узкий класс функций K (например, множество функций линейных, степенных, показательных и т. п.), которому должна принадлежать искомая функция $\tilde{f}(x)$. Таким образом, задача сводится к нахождению наилучших значений параметров.

Геометрически задача построения эмпирической формулы состоит в проведении кривой Γ , «возможно ближе» примыкающей к системе точек (рис. 5.6) $M_i(x_i, y_i)$ ($i=1, 2, \dots, n$).

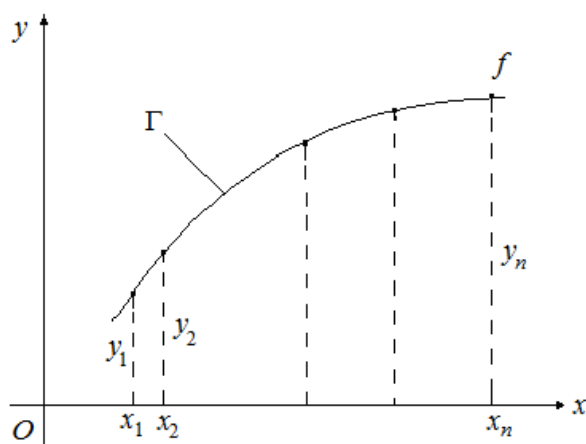


Рис. 5.6

Следует отметить, что задача построения эмпирической формулы отлична от задачи интерполирования. Известно, что эмпирические данные x_i и y_i , как правило, приближенные и содержат ошибки. Поэтому интерполяционная формула повторяет эти ошибки и не является идеальным решением поставленной задачи. Весьма вероятно, что более простая эмпирическая зависимость будет сглаживать данные и не будет повторять ошибки, как в случае интерполирования. График эмпирической зависимости не проходит через заданные точки, как это имеет место в случае интерполяции.

Построение эмпирической зависимости складывается из двух этапов:

- выяснение общего вида формулы;
- определение наилучших параметров эмпирической зависимости.

Если неизвестен характер зависимости между данными величинами x и y , то вид эмпирической формулы является произвольным. Предпочтение отдается простым формулам, обладающим хорошей точностью. Если отсутствуют сведения о промежуточных данных, то обычно предполагается, что эмпирическая функция аналитическая, без точек разрыва, и график ее – плавная кривая.

Удачный подбор эмпирической формулы в значительной мере зависит от опыта и искусства составителя. Во многих случаях задача состоит в аппроксимации неизвестной функциональной зависимости между x и y многочленом заданной степени m

$$P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m = \sum_{k=0}^m a_k x^k$$

или

$$y = \sum_{k=0}^m a_k \cdot x^k .$$

Нередко употребляются другие элементарные функции (дробно-линейная, степенная, показательная, логарифмическая и т. п.). Что касается определения наилучших значений параметров, входящих в эмпирическую формулу, то эта задача более легкая и решается регулярными методами. Наиболее часто применяемым методом определения параметров эмпирической формулы является *метод наименьших квадратов*.

5.3.1. Метод наименьших квадратов

Пусть, например, в результате эксперимента получена таблица значений функции y_i ($i = 1, \dots, n$). Задача состоит в аппроксимации неизвестной функциональной зависимости между x и y эмпирической формулой

$$y(x) = \tilde{f}(x; a_0, a_1, \dots, a_m), \quad (5.23)$$

где m – число параметров; $a_1 \dots a_m$ – неизвестные коэффициенты.

Для отыскания неизвестных коэффициентов применим метод наименьших квадратов, который является универсальным методом решения задач аппроксимации.

Идея метода наименьших квадратов заключается в следующем: определить искомые коэффициенты a_j зависимости (5.23) таким образом, чтобы этот полином наилучшим образом описывал экспериментальные данные, а сумма квадратов отклонений экспериментальных значений y_i от соответствующих значений, вычисленных по аппроксимирующему многочлену (5.23), была минимальной:

$$F(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n [y_i - \tilde{f}(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m)]^2 = \min, \quad (5.24)$$

где $F(a_0, a_1, \dots, a_m)$ – функция коэффициентов.

В точке минимума функции F ее производные обращаются в нуль. Отсюда получаем так называемую *нормальную систему* для определения коэффициентов a_j ($j=0, 1, \dots, m$):

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial a_1} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial F}{\partial a_m} = 0. \quad (5.25)$$

Если система (5.25) имеет единственное решение, то оно будет искомым. Система (5.25) упрощается, если эмпирическая функция $\tilde{f}(x; a_0, a_1, \dots, a_m)$ линейная относительно параметров a_0, a_1, \dots, a_m .

Рассмотрим наиболее распространенный частный случай, когда эмпирическая функция представлена полиномом

$$P(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_m \cdot x^m;$$

$$F(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n [y_i - P(x_i)]^2 \rightarrow \min. \quad (5.26)$$

Используя систему (5.25), получаем математическое условие минимума для уравнения (5.26):

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - (a_0 - a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + \dots + a^m \cdot x_i^m)) \cdot 1 = 0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial a_1} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - (a_0 - a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + \dots + a^m \cdot x_i^m)) \cdot x_i = 0, \quad (5.27)$$

.....

$$\frac{\partial F}{\partial a_m} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - (a_0 - a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + \dots + a^m \cdot x_i^m)) \cdot x_i^m = 0.$$

В результате решения системы линейных уравнений получим коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_m многочлена (5.26).

Метод наименьших квадратов обладает тем преимуществом, что, если сумма квадратов отклонений F мала, то сами эти отклонения также малы по абсолютной величине.

Недостатком метода наименьших квадратов является громоздкость вычислений. Поэтому к нему прибегают обычно при обработке наблюдений высокой точности, когда нужно получить также весьма точные значения параметров.

5.3.2. Линейная аппроксимация

Часто при обработке экспериментальных данных оказывается возможным построить линейный аппроксимирующий полином, т. е. описать закон изменения x линейным уравнением (рис. 5.7)

$$P_1(x) = a_0 + a_1 \cdot x. \quad (5.28)$$

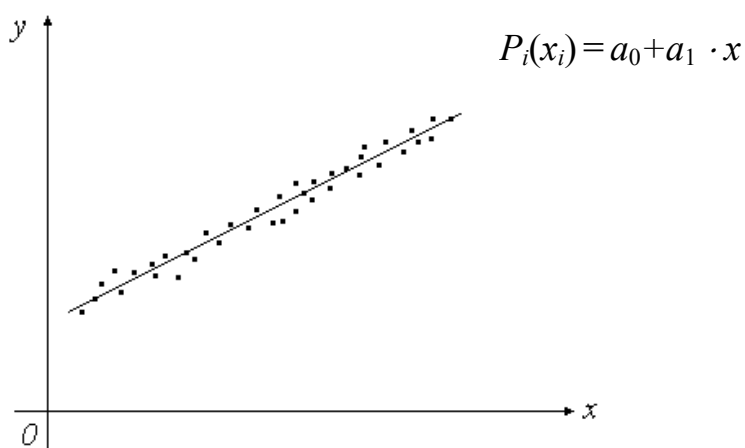


Рис. 5.7. Линейная аппроксимация

Выведем формулы для расчета неизвестных коэффициентов a_0 и a_1 линейного аппроксимирующего полинома (5.28) по методу наименьших квадратов:

$$F = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i)^2 \rightarrow \min. \quad (5.29)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial a_0} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot 1 = 0; \\ \frac{\partial F}{\partial a_1} = -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot x_i = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i - a_0 \cdot n - a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i = 0; \\ \sum_{i=1}^n (y_i \cdot x_i) - a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i - a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i; \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i). \end{cases}$$

Решая систему уравнений, выражаем коэффициенты a_0 и a_1 :

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n y_i & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i) & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i)}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2};$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i) - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}. \quad (5.30)$$

Определитель системы: $D = \begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix} \neq 0.$

Определение коэффициентов a_0 и a_1 возможно, если определитель системы $\neq 0$. Если определитель $D=0$, то система или не имеет решений (т. е. несовместна), или имеет бесконечно много решений (т. е. система неопределенная).

Пример 5.6. Дана табличная зависимость теплоемкости оксида углерода от температуры.

T, K	300	400	500	600	700	800	900	1000
$C_p, \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$	6,97	7,01	7,12	7,28	7,45	7,62	7,79	7,93

Необходимо построить аппроксимирующий полином в виде $y = a_0 + a_1 \cdot x$. Для вычисления коэффициентов по функции (5.30) составим таблицу (табл. 5.5).

Таблица 5.5

I	T_i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i \cdot y_i$
1	300	0	6,97	0	0
2	400	1	7,01	1	7,01
3	500	2	7,12	4	14,24
4	600	3	7,28	9	21,84
5	700	4	7,45	16	29,8
6	800	5	7,62	25	38,1
7	900	6	7,79	36	46,74
8	1000	7	7,93	49	55,51
Σ		28	59,17	140	213,24

Введем обозначение

$$x = \frac{T - 300}{h},$$

где $h = 100$, $C_p = y$.

$$\begin{cases} 8 \cdot a_0 + 28 \cdot a_1 = 59,17; \\ 28 \cdot a_0 + 140 \cdot a_1 = 213,24. \end{cases}$$

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 59,17 & 28 \\ 213,24 & 140 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 28 \\ 28 & 140 \end{vmatrix}} = 6,884, \quad a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 8 & 59,17 \\ 28 & 213,24 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 8 & 28 \\ 28 & 140 \end{vmatrix}} = 0,146.$$

$$y = 6,884 + 0,146 \cdot x.$$

$$C_p = 6,884 + \frac{T - 300}{100} \cdot 0,146 = 6,445 + 0,146 \cdot 10^{-2} T.$$

$$C_p = 6,445 + 0,146 \cdot 10^{-2} \cdot T.$$

Сделаем проверку, насколько хорошо полученный полином аппроксимирует (описывает) эксперимент (табл. 5.6.2).

Таблица 5.6

i	T_i	$C_{pi}^э$	C_{pi}^p	$ C_{pi}^p - C_{pi}^э $
1	300	6,97	6,9	0,07
2	400	7,01	7,03	0,02
3	500	7,12	7,17	0,05
4	600	7,28	7,32	0,04
5	700	7,45	7,46	0,01
6	800	7,62	7,62	0,00
7	900	7,79	7,76	0,03
8	1000	7,93	7,91	0,02

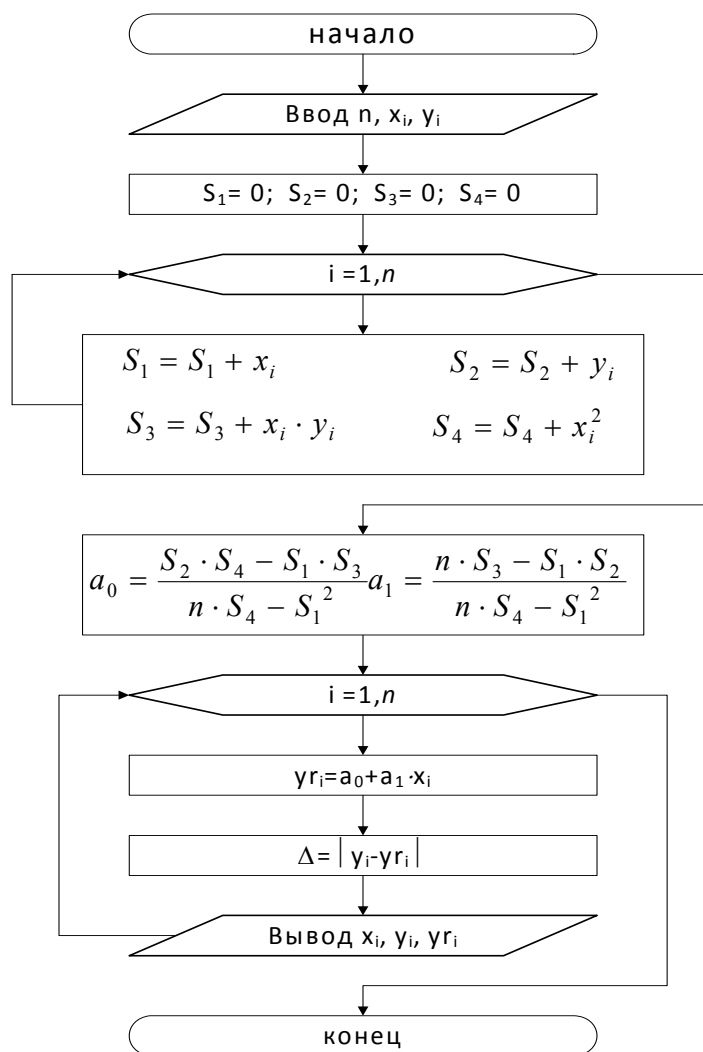


Рис. 5.8. Блок-схема линейной аппроксимации

Разность между исходными данными и результатами расчета по полученному выражению определяет погрешность аппроксимации. Если погрешность велика, то выбирают другой вид аппроксимирующего полинома.

Блок-схема алгоритма линейной аппроксимации приведена на рис. 5.7. Приняты следующие обозначения:

$$\begin{aligned} S1 &= \sum_{i=1}^n X_i; & S2 &= \sum_{i=1}^n Y_i; \\ S3 &= \sum_{i=1}^n X_i \cdot Y_i; & S4 &= \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{aligned}$$

5.3.3. Параболическая аппроксимация

В том случае, если экспериментальные данные не удается с достаточной степенью точности аппроксимировать линейным полиномом, применяют аппроксимацию второго и большего порядков. Такая аппроксимация называется нелинейной. Рассмотрим случай многочлена 2-й степени

$$P_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2. \quad (5.31)$$

Как и в случае линейной аппроксимации, коэффициенты a_j определяются по методу наименьших квадратов. Запишем квадратичное отклонение

$$F = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2)^2 \rightarrow \min. \quad (5.32)$$

Приравняем к нулю частные производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a_0} &= -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot 1 = 0; \\ \frac{\partial F}{\partial a_1} &= -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot x_i = 0; \\ \frac{\partial F}{\partial a_2} &= -2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot x_i^2 = 0. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Выполнив преобразования, получим систему линейных уравнений с тремя неизвестными (a_0, a_1, a_2):

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i; \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i); \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n (x_i^2 \cdot y_i). \end{cases} \quad (5.34)$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{i=1}^n x_i; & S_2 &= \sum_{i=1}^n x_i^2; & S_3 &= \sum_{i=1}^n x_i^3; & S_4 &= \sum_{i=1}^n x_i^4; \\ S_5 &= \sum_{i=1}^n y_i; & S_6 &= \sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i); & S_7 &= \sum_{i=1}^n (x_i^2 \cdot y_i). \end{aligned} \quad (5.35)$$

С учетом принятых обозначений система (5.34) будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot S_1 + a_2 \cdot S_2 = S_5; \\ a_0 \cdot S_1 + a_1 \cdot S_2 + a_2 \cdot S_3 = S_6; \\ a_0 \cdot S_2 + a_1 \cdot S_3 + a_2 \cdot S_4 = S_7. \end{cases} \quad (5.36)$$

Определим неизвестные коэффициенты a_0, a_1, a_2 :

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} S_5 & S_1 & S_2 \\ S_6 & S_2 & S_3 \\ S_7 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}}, \quad a_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & S_5 & S_2 \\ S_1 & S_6 & S_3 \\ S_2 & S_7 & S_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}}, \quad a_2 = \frac{\begin{vmatrix} n & S_1 & S_5 \\ S_1 & S_2 & S_6 \\ S_2 & S_3 & S_7 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}}. \quad (5.37)$$

Необходимое условие: определитель системы

$$D = \begin{vmatrix} n & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix} \neq 0.$$

Пример 5.7. Дана табличная зависимость y от x (табл. 5.7). Необходимо построить аппроксимирующий полином в виде $y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$.

$$\begin{cases} 4 \cdot a_0 + 6 \cdot a_1 + 14 \cdot a_2 = 13, \\ 6 \cdot a_0 + 14 \cdot a_1 + 36 \cdot a_2 = 26, \\ 14 \cdot a_0 + 36 \cdot a_1 + 98 \cdot a_2 = 64. \end{cases}$$

Таблица 5.7

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i \cdot y_i$	$x_i^2 \cdot y_i$
0	1	0	0	0	0	0
1	3	1	1	1	3	3
2	4	4	8	16	8	16
3	5	9	27	81	15	45
$S_1 = 6$	$S_5 = 13$	$S_2 = 14$	$S_3 = 36$	$S_4 = 98$	$S_6 = 26$	$S_7 = 64$

Эта система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных a_0, a_1, a_2 . Определитель системы не равен 0, т. е. существует единственное решение:

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 13 & 6 & 14 \\ 26 & 14 & 36 \\ 64 & 36 & 98 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 4 & 6 & 14 \\ 6 & 14 & 36 \\ 14 & 36 & 98 \end{vmatrix}} = 1,05;$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 4 & 13 & 14 \\ 6 & 26 & 36 \\ 14 & 64 & 98 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 4 & 6 & 14 \\ 6 & 14 & 36 \\ 14 & 36 & 98 \end{vmatrix}} = 2,05;$$

$$a_2 = \frac{\begin{vmatrix} 4 & 6 & 13 \\ 6 & 14 & 26 \\ 14 & 36 & 64 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 4 & 6 & 14 \\ 6 & 14 & 36 \\ 14 & 36 & 98 \end{vmatrix}} = -0,25.$$

Запишем аппроксимирующее уравнение с учетом найденных коэффициентов: $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 = 1,05 + 2,05 \cdot x - 0,25 \cdot x^2$. Проведем оценку правильности полученного уравнения (табл. 5.8, рис. 5.9).

Таблица 5.8

i	x_i	$y_i^{\text{э}}$	$y_i^{\text{п}}$	$(y_i^{\text{э}} - y_i^{\text{п}})$
1	0	1	1,05	-0,05
2	1	3	2,85	0,15
3	2	4	4,15	-0,05
4	3	5	4,95	0,05

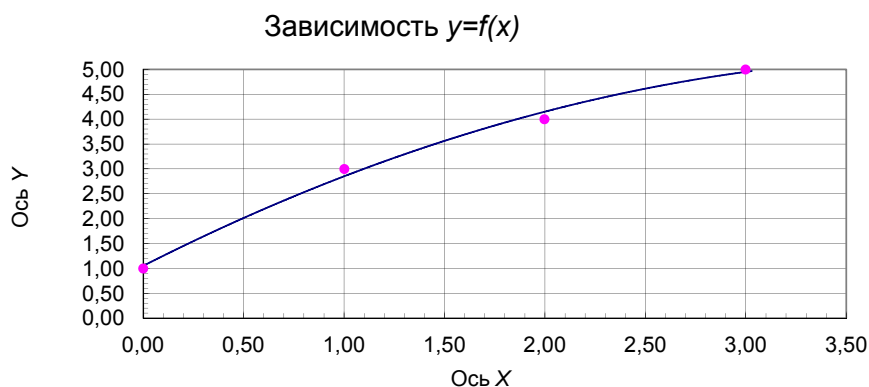


Рис. 5.9

Пример 5.8. Дана зависимость теплоемкости циклопропана от температуры.

T	298	300	400	500	600	700	800	900	1000
C_p	13,37	13,44	18,31	22,65	26,15	29,02	31,45	33,57	35,39

Аппроксимировать экспериментальные данные полиномом второго порядка (5.31). Для чего определяем коэффициенты a_0 , a_1 , a_2 по формулам (5.37). Блок-схема параболической аппроксимации второго порядка приведена на рис. 5.10.

В результате решения получаем уравнение для расчета теплоемкости циклопропана:

$$C_p(T) = -3,766 + 0,0657T - 0,00003T^2.$$

Результаты расчета приведены в табл. 5.9.

Таблица 5.9

T	C_p^3	C_p^p	$ C_p^p - C_p^3 $
298	13,37	13,44	0,07
300	13,44	13,54	0,01
400	18,31	18,24	0,07
500	22,65	22,40	0,25
600	26,15	26,03	0,12
700	29,02	29,12	0,10
800	31,45	31,68	0,23
900	33,57	33,70	0,13
1000	35,39	35,19	0,20

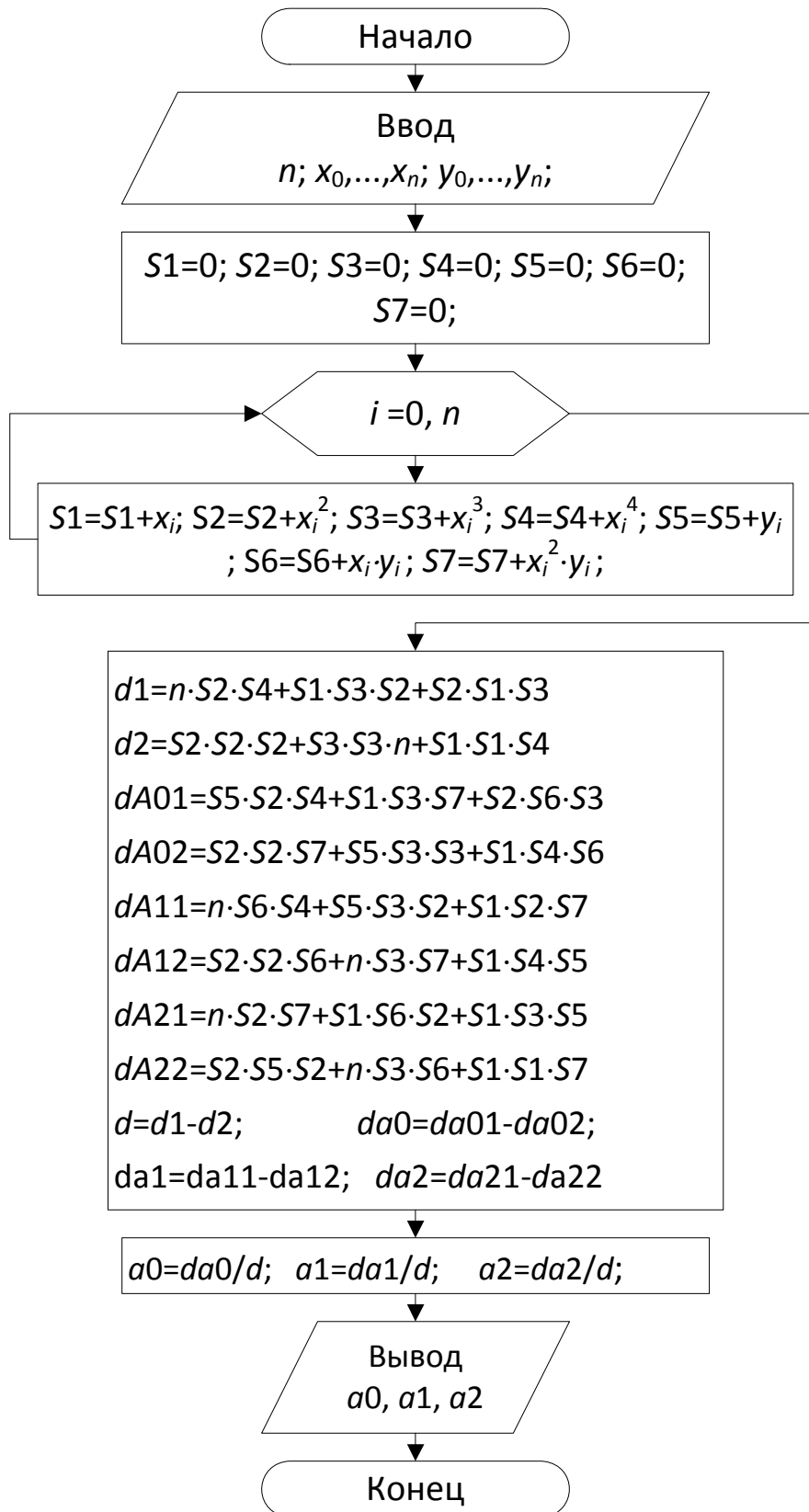


Рис. 5.10. Блок-схема параболической аппроксимации

Вопросы для самоконтроля

1. В чем состоит задача о приближении функции?
2. В каких случаях возникает задача интерполирования?
3. Постановка задачи интерполирования?
4. Какие методы интерполирования применяются в практике инженера?
5. Для чего рассчитываются конечные разности?
6. В чем суть метода Лагранжа?
7. В чем особенность применения методов Ньютона?
8. Какие формулы Ньютона известны и в чем состоит особенность их применения?
9. В чем состоит отличие аппроксимации от интерполяции?
10. Какие методы наиболее часто применяются в практике инженера и чем это обусловлено?
11. Перечислить ситуации, когда предпочтительнее применение метода аппроксимации.
12. В чем суть метода наименьших квадратов и для определения каких параметров он применяется?
13. В каких случаях применяется линейная аппроксимация?
14. В каких случаях применяется параболическая аппроксимация?

5.3.4. Аппроксимация в виде показательной и степенной функции

А) *Показательная (экспоненциальная) функция.*

Часто при обработке экспериментальных данных возникает необходимость воспользоваться зависимостью вида

$$y = a \cdot e^{b \cdot x}, \quad (5.38)$$

где a, b – неизвестные коэффициенты.

Представим уравнение (5.38) в виде

$$\ln(y) = \ln(a) + b \cdot x.$$

Введем обозначения: $Y = \ln(y)$, $A_0 = \ln(a)$, $A_1 = b$.

$$Y = A_0 + A_1 \cdot x. \quad (5.39)$$

Последнее выражение представляет собой линейный многочлен 1-й степени. Решаем систему по методу наименьших квадратов относительно A_0 и A_1 :

$$F = \sum_{i=1}^n (Y_i - (A_0 + A_1 \cdot x_i))^2 \rightarrow \min.$$

Последовательность вывода формул вычисления коэффициентов A_0 и A_1 аналогична последовательности для случая линейной аппроксимации (см. п. 5.3.2):

$$A_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n (x_i \cdot Y_i) & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}}; \quad A_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n (x_i \cdot Y_i) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix}}. \quad (5.40)$$

После определения коэффициентов A_0 и A_1 вернемся к принятым ранее обозначениям:

$$a = e^{A_0}, \quad b = A_1, \quad y_i = e^{Y_i}.$$

Пример 5.9. В табл. 5.9.1 приведены данные по конверсии пропана в зависимости от времени работы катализатора.

Таблица 5.10

$t, \text{ч}$	5	10	15	20	25	30
$X_{\text{C}_3\text{H}_8}, \%$	66,1	60,0	53,5	48,4	44,3	42,3

Аппроксимировать экспериментальные данные экспоненциальной зависимостью

$$X_{\text{C}_3\text{H}_8} = a \cdot e^{-\alpha t},$$

где α – показатель активности катализатора.

Представим уравнение в виде

$$y = a \cdot e^{-bx}$$

и прологарифмируем

$$\ln y = \ln a - b \cdot x.$$

Обозначим

$$Y = \ln y; \quad a_0 = \ln a; \quad a_1 = b,$$

Получим $Y = a_0 - a_1 x$.

Коэффициенты a_0 и a_1 определяем по формулам (5.40):

$$a_0 = 4,271; \quad a_1 = -0,0185.$$

Вернемся к прежним обозначениям:

$$a = e^{a_0} = \exp(4,271);$$

$$a = 71,59;$$

$$b = a_1 = -0,0185.$$

Получим вид аппроксимирующего полинома

$$y = 71,59 \cdot e^{-0,0185x},$$

или

$$x_{C_3H_8} = 71,59 \cdot e^{-0,0185t}.$$

В табл. 5.9.2 приведены результаты расчета y_i^p по полученному уравнению и относительная погрешность. Блок-схема аппроксимации показательной функцией приведена на рис. 5.11.

Таблица 5.11

x_i	y_i^3	$\ln y_i$	x_i^2	$x_i \cdot \ln y_i$	y_i^p	$ y_i^3 - y_i^p $
5	66,1	4,1912	25	20,9556	65,2	0,9
10	60,0	4,0943	100	40,9435	59,5	0,5
15	53,5	3,9797	225	59,6952	54,2	0,7
20	48,4	3,8795	400	77,5900	49,3	0,9
25	44,3	3,7910	625	94,7746	45,1	0,8
30	42,3	4,7448	900	112,3436	41,4	0,9

Б) Степенная функция.

Степенная функция имеет вид:

$$y = a \cdot x^b. \quad (5.41)$$

Логарифмируя последнее уравнение, получим:

$$\lg(y_i) = \lg(a) + b \cdot \lg(x_i). \quad (5.42)$$

Введем обозначения: $Y = \lg(y)$; $A_0 = \lg(a)$; $A_1 = b$; $X = \lg(x)$.

Используя метод наименьших квадратов, найдем неизвестные коэффициенты A_0 и A_1 :

$$F = \sum_{i=1}^n (Y_i - (A_0 + A_1 \cdot X_i))^2 \rightarrow \min.$$

Определим неизвестные коэффициенты A_0 и A_1 :

$$A_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n (X_i \cdot Y_i) & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{vmatrix}}; \quad A_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n (X_i \cdot Y_i) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{vmatrix}}. \quad (5.43)$$

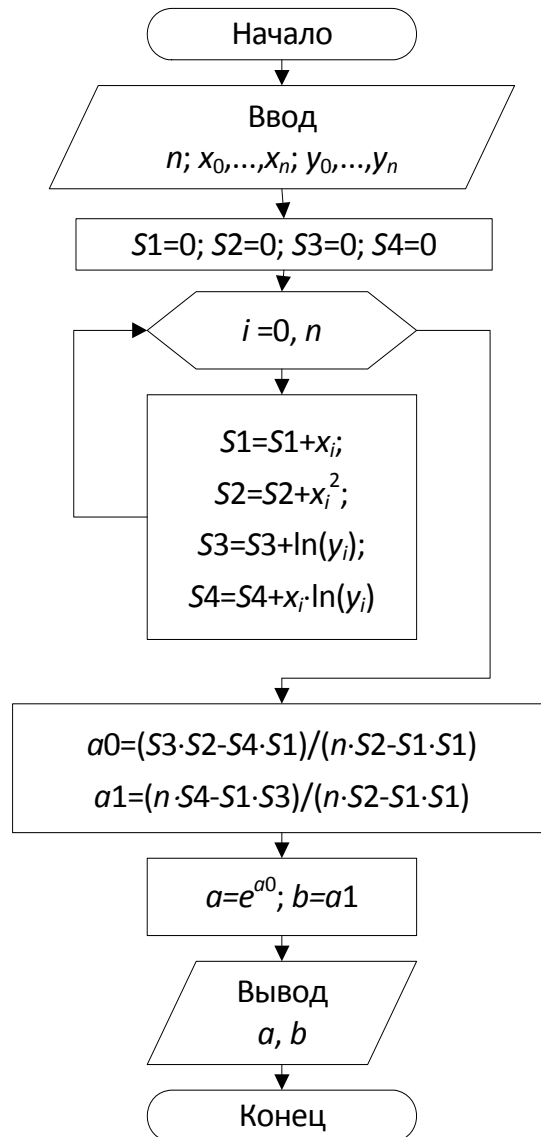


Рис. 5.11. Блок-схема аппроксимации показательной функцией

После определения коэффициентов A_0 и A_1 вернемся к принятым ранее обозначениям: $a_0 = 10^{A_0}$, $b = A_1$, $y_i = 10^{Y_i}$, $x_i = 10^{X_i}$.

Недостатком метода наименьших квадратов является громоздкость вычислений. Поэтому к нему прибегают обычно при обработке наблюдений высокой точности, когда нужно получить также весьма точные значения параметров.

6. ПРИБЛИЖЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

6.1. Постановка задачи

При решении практических задач часто нужно найти производную указанных порядков от функции $y=f(x)$, заданной таблично. Возможно также, что в силу сложности аналитического выражения функции $f(x)$ непосредственное дифференцирование ее затруднительно. В этих случаях обычно прибегают к *приближенному дифференцированию*.

Для вывода формул приближенного дифференцирования заменяют данную функцию $f(x)$ на интересующем отрезке $[a, b]$ интерполирующей функцией $P(x)$ (чаще всего полиномом), а затем полагают

$$f'(x) = P'(x) \quad (6.1)$$

при

$$a \leq x \leq b.$$

Аналогично поступают при нахождении производных высших порядков функции $f(x)$.

Если для интерполирующей функции $P(x)$ известна погрешность

$$R(x) = f(x) - P(x),$$

то погрешность производной $P'(x)$ выражается формулой

$$r(x) = f'(x) - P'(x) = R'(x), \quad (6.2)$$

т. е. погрешность производной интерполирующей функции равна производной от погрешности этой функции. То же самое справедливо и для производных высших порядков.

Следует отметить, что, вообще говоря, приближенное дифференцирование представляет собой операцию менее точную, чем интерполирование. Действительно, близость друг к другу ординат двух кривых

$$y=f(x) \text{ и } Y=P(x)$$

на отрезке $[a, b]$ еще не гарантирует близости на этом отрезке их производных $f'(x)$ и $P'(x)$, т. е. малого расхождения угловых коэффициентов касательных к рассматриваемым кривым при одинаковых значениях аргумента (см. рис. 6.1).

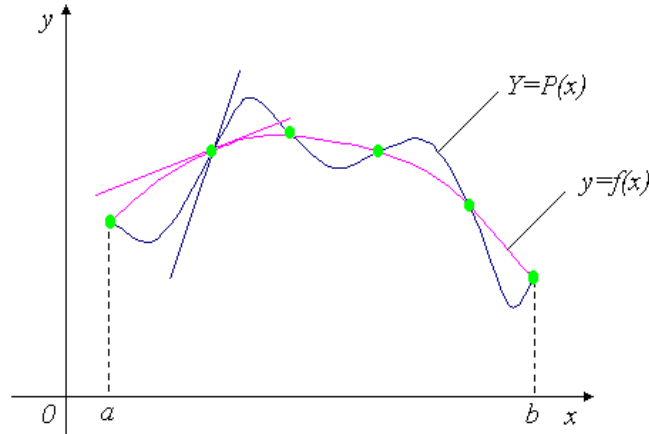


Рис. 6.1

6.2. Формулы, основанные на первой интерполяционной формуле Ньютона

Пусть имеем функцию $y(x)$, заданную в равноотстоящих точках x_i ($i=0, 1, 2, \dots, n$) отрезка $[a, b]$ с помощью значений $y_i=f(x_i)$. Для нахождения на $[a, b]$ производных $y'=f'(x)$, $y''=f''(x)$ и т. д. функцию y приближенно заменим интерполяционным полиномом Ньютона, построенным для системы узлов x_0, x_1, \dots, x_k ($k \leq n$).

Имеем:

$$y(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \\ + \frac{q(q-1)(q-2)(q-3)}{4!} \Delta^4 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)(q-3)(q-4)}{5!} \Delta^5 y_0 + \dots,$$

где

$$q = \frac{x - x_0}{h} \text{ и } h = x_{i+1} - x_i \text{ (} i=0, 1, \dots \text{)}.$$

Производя перемножение биномов, получим:

$$y(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q^2 - q}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{q^3 - 3q^2 + 2q}{6} \Delta^3 y_0 + \\ + \frac{q^4 - 6q^3 + 11q^2 - 6q}{24} \Delta^4 y_0 + \\ + \frac{q^5 - 10q^4 + 35q^3 - 50q^2 + 24q}{120} \Delta^5 y_0 + \dots \quad (6.3)$$

Так как

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \cdot \frac{dy}{dq},$$

то

$$y'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6} \Delta^3 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} \Delta^3 y_0 + \dots \right]. \quad (6.4)$$

Аналогично, так как

$$y''(x) = \frac{d(y')}{dx} = \frac{d(y')}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{d(y')}{dq} \cdot \frac{1}{h},$$

то

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 + (q-1) \Delta^3 y_0 + \frac{6q^2-18q+11}{12} \Delta^4 y_0 + \right. \\ \left. + \frac{2q^3-12q^2+21q-10}{12} \Delta^5 y_0 + \dots \right]. \quad (6.5)$$

Таким же способом, в случае надобности, можно вычислить и производные функции $y(x)$ любого порядка. Заметим, что при нахождении производных $y'(x)$, $y''(x)$, ... в фиксированной точке x в качестве x_0 следует выбирать ближайшее табличное значение аргумента. Отметим, что можно вывести также формулы приближенного дифференцирования исходя из второй интерполяционной формулы Ньютона.

Пример 6.1. Найти $y'(50)$ функции $y = \lg x$, заданной таблично.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
50	1,6990	0,0414	-0,0036	0,0005
55	1,7404	0,0378	-0,0031	
60	1,7782	0,0347		
65	1,8129			

Решение. Здесь $h=5$. Дополняем таблицу столбцами конечных разностей. Так как $x=50$ и $q=(x-x_0)/h=0$, то $y'(50) = (0,0414 + 0,0018 + 0/0,002) = 0,0087$.

Для оценки точности найденного значения заметим, что так как табулированная выше функция есть $y = \lg x$, то

$$y'(x) = \frac{1}{x \ln 10}.$$

Следовательно, $y'(50) = 1/50 \cdot 1/\ln(10) = 0,0087$. Таким образом, результаты совпадают с точностью до четвертого десятичного знака.

7. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Ряд технологических задач требует увязки в математическое описание всей информации о процессе. Например, для математических моделей химико-технологических процессов одними из основных параметров, характеризующих процессы, являются концентрации реагирующих веществ, температура процесса и др. Как правило, большинство балансовых уравнений в химической технологии представлены системой интегральных и дифференциальных уравнений, в результате решения которых могут быть получены зависимости, характеризующие протекание процесса. Интегральные уравнения встречаются при описании гетерогенной кинетики, в теории активированного комплекса, при описании процессов в химических реакторах и т. д.

Часто на практике не удается вычислить интеграл аналитическим путем. В этих случаях применяют приближенные методы численного интегрирования.

Постановка задачи. Вычислить определенный интеграл

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (7.1)$$

при условии, что a и b конечны и $F(x)$ является непрерывной функцией x на всем интервале $x \in [a, b]$. Во многих случаях, когда подынтегральная функция задана в аналитическом виде, интеграл от этой функции в пределах от a до b может быть вычислен по формуле *Ньютона–Лейбница*:

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a). \quad (7.2)$$

Однако этой формулой часто нельзя воспользоваться по следующим причинам:

- первообразная функция $f(x)$ слишком сложна и ее нельзя выразить в элементарных функциях;
- функция $f(x)$ задана в виде таблицы, что особенно часто встречается в задачах химической технологии при обработке экспериментальных данных.

В этих случаях используются методы численного интегрирования.

Задача численного интегрирования состоит в нахождении приближенного значения интеграла (7.1) по заданным или вычисленным значениям.

Общий подход к решению задачи будет следующим. Определенный интеграл представляет собой площадь, ограниченную кривой $f(x)$, осью x и переменными $x=a$ и $x=b$. Необходимо вычислить интеграл, разбивая интервал $[a, b]$ на множество меньших интервалов, находя приблизительно площадь каждой полоски и суммируя их.

В зависимости от способа вычисления подынтегральной суммы существуют различные методы численного интегрирования (методы прямоугольников, трапеций, парабол, сплайнов и др.).

7.1. Метод прямоугольников

Простейшим методом численного интегрирования является *метод прямоугольников*. Он непосредственно использует замену определенного интеграла интегральной суммой:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i) \cdot \Delta x_i; \xi_i \in [x_{i-1}, x_i]. \quad (7.3)$$

Разобьем интервал интегрирования $[a, b]$ на n равных частей. Обозначим $\Delta x_i = h$ шаг разбиения. Формула прямоугольника применяется к каждому отрезку. В качестве точек ξ_i выбираются левые ($\xi_i = x_{i-1}$) или правые ($\xi_i = x_i$) границы элементарных отрезков (см. рис. 7.1).

Соответственно, для этих двух случаев можно записать формулы метода прямоугольников:

$$\int_a^b f(x)dx = h_1 \cdot f(x_0) + h_2 \cdot f(x_1) + \dots + h_n \cdot f(x_{n-1}); \quad (7.4)$$

$$\int_a^b f(x)dx = h_1 \cdot f(x_1) + h_2 \cdot f(x_2) + \dots + h_n \cdot f(x_n). \quad (7.5)$$

Более точным является вид формулы прямоугольников, использующий значения функции в средних точках элементарных отрезков: точка \bar{x}_i . Таким образом, площадь криволинейной трапеции заменяется суммой прямоугольников с основанием h и высотами, равными значениям функции $f(x)$ в середине оснований $f(\bar{x}_i)$ (см. рис. 7.2).

Получим формулу:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n} \cdot \sum_{i=1}^n f(\bar{x}_i), \quad (7.6)$$

где $\frac{b-a}{n} = h$,

ИЛИ

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}\right). \quad (7.7)$$

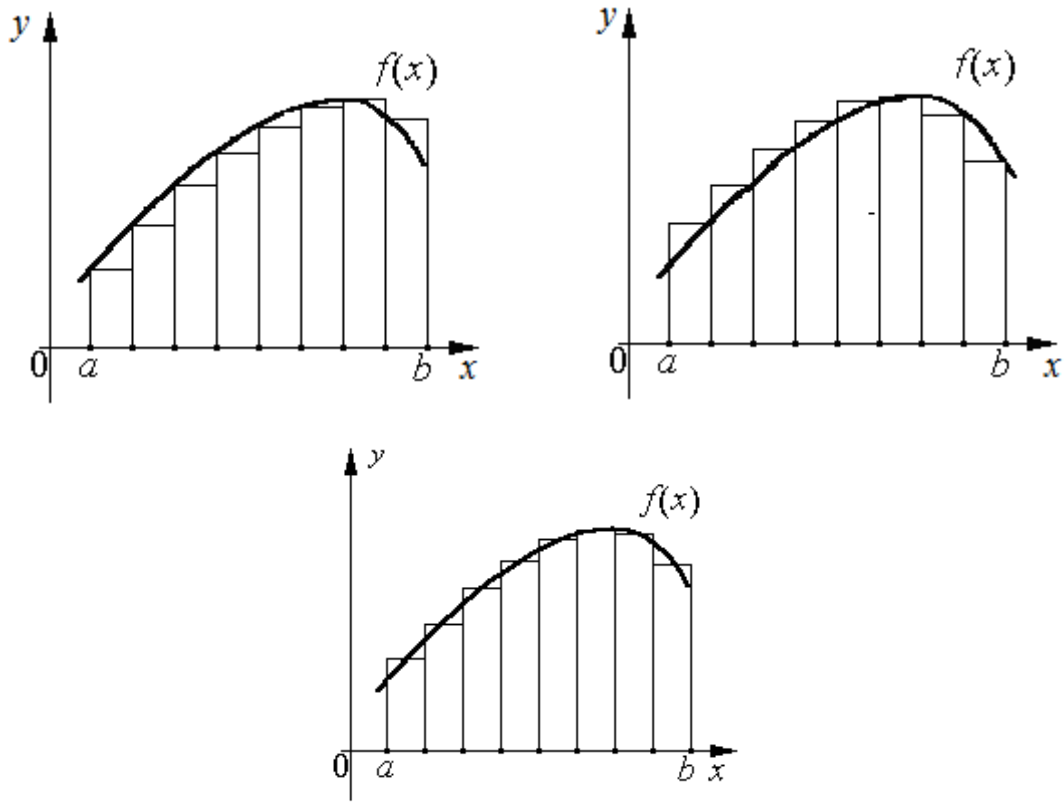


Рис. 7.1

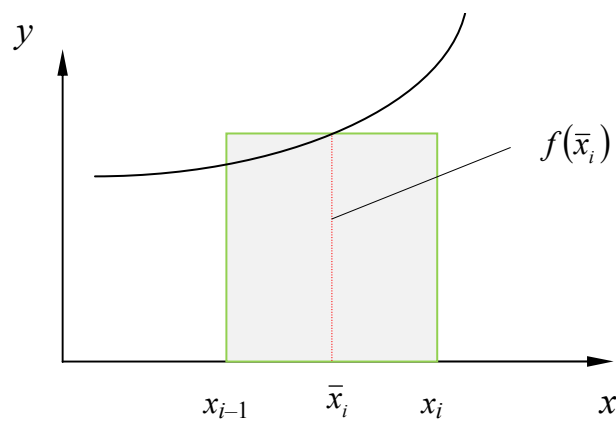


Рис. 7.2

На рис. 7.3 приведена блок-схема метода прямоугольников, в приложении – программа с графическим выводом интегральной кривой.

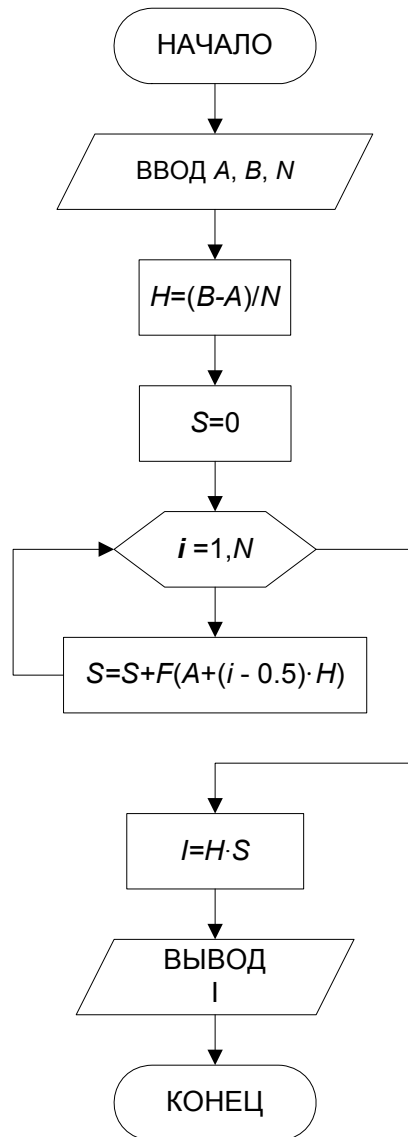


Рис. 7.3. Блок-схема метода прямоугольников

7.2. Метод трапеций

Метод трапеций использует линейную интерполяцию, т. е. график функции $y=f(x)$ представляется в виде ломаной, соединяющей точки (x_i, y_i) . В этом случае площадь всей криволинейной трапеции складывается из площадей элементарных прямоугольных трапеций (см. рис. 7.4, 7.5).

Площадь каждой такой трапеции определяется по формуле

$$S_i = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot h_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7.8)$$

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

где n – число интервалов разбиения.

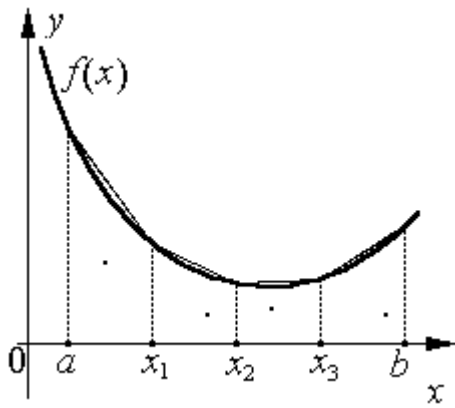


Рис. 7.4

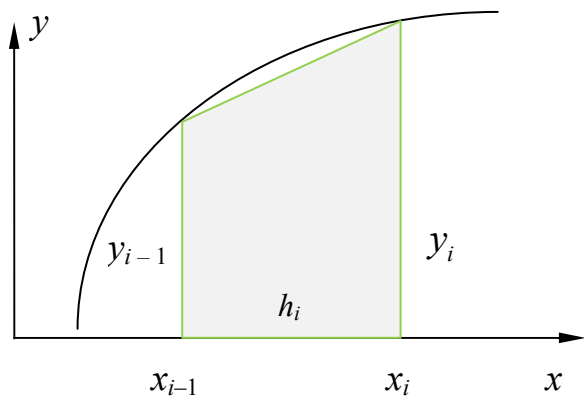


Рис. 7.5

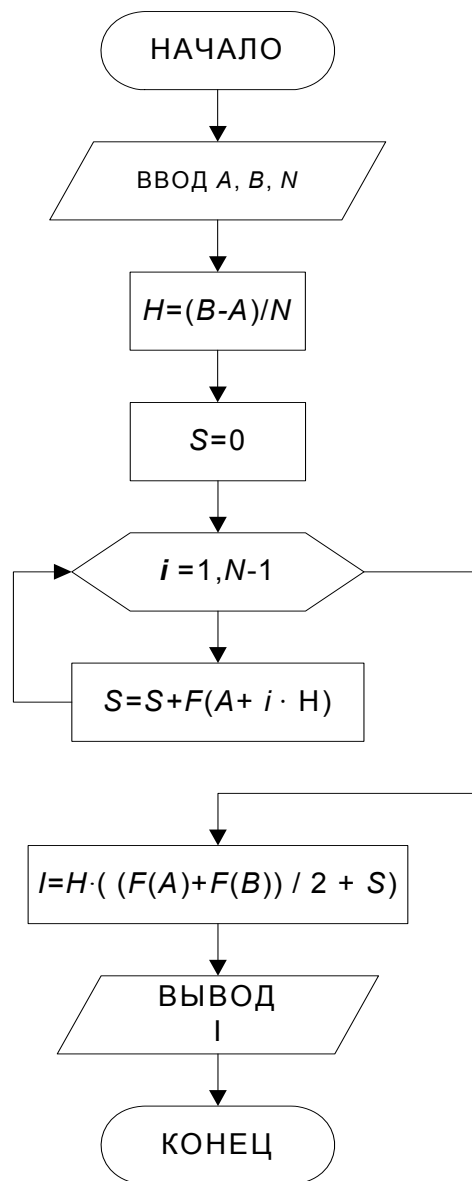


Рис. 7.6. Блок-схема метода трапеций

Складывая все эти равенства, получим *формулу трапеций* для численного интегрирования:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n s_i = \frac{h}{2} \cdot \sum_{i=1}^n (y_{i-1} + y_i), \quad (7.9)$$

или

$$\int_a^b f(x)dx = h \cdot \sum_{i=1}^n \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}. \quad (7.10)$$

Формулы (7.9) и (7.10) можно представить в виде:

$$\int_a^b f(x)dx = h \cdot \left(\frac{y_0 + y_1}{2} + \frac{y_1 + y_2}{2} + \dots + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} \right); \quad (7.11)$$

$$\int_a^b f(x)dx = h \cdot \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right). \quad (7.12)$$

Блок-схема алгоритма метода трапеций приведена на рис. 7.6.

7.3. Метод парабол (формула Симпсона)

Этот метод более точный по сравнению с методами прямоугольников и трапеций.

В основе формулы Симпсона лежит квадратичная интерполяция подынтегральной функции на отрезке $[a, b]$ по трем равноотстоящим узлам.

Разобьем интервал интегрирования $[a, b]$ на четное число n равных отрезков с шагом h .

Примем: $x_0 = a, x_1 = x_0 + h, \dots, x_n = x_0 + nh = b$.

Значения функций в точках обозначим соответственно:

$$y_0 = f(a); y_1 = f(x_1); y_2 = f(x_2); \dots; y_n = f(b).$$

На каждом отрезке $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{i-1}, x_{i+1}]$ подынтегральную функцию $f(x)$ заменим интерполяционным многочленом второй степени:

$$f(x) \approx P_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i, \quad (7.13)$$

где $x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}$.

В качестве $P_i(x)$ можно принять интерполяционный многочлен Лагранжа второй степени, проходящий через концы каждой трех ординат:

$$y_0, y_1, y_2; y_2, y_3, y_4; y_4, y_5, y_6; \dots; y_{n-2}, y_{n-1}, y_n.$$

Формула Лагранжа для интервала $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ имеет вид:

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

Элементарная площадь s_i (см. рис. 7.7) может быть вычислена с помощью определенного интеграла. Учитывая, что $x_i - x_{i-1} = x_{i+1} - x_i = h$, проведем вычисления и получим для каждого элементарного участка:

$$s_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P_i(x) dx = \frac{h}{3} \cdot (y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1}). \quad (7.14)$$

После суммирования интегралов по всем отрезкам, получим составную формулу Симпсона:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \cdot [y_0 + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2}) + y_n]. \quad (7.15)$$

Часто пользуются простой формулой Симпсона

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \cdot \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right). \quad (7.16)$$

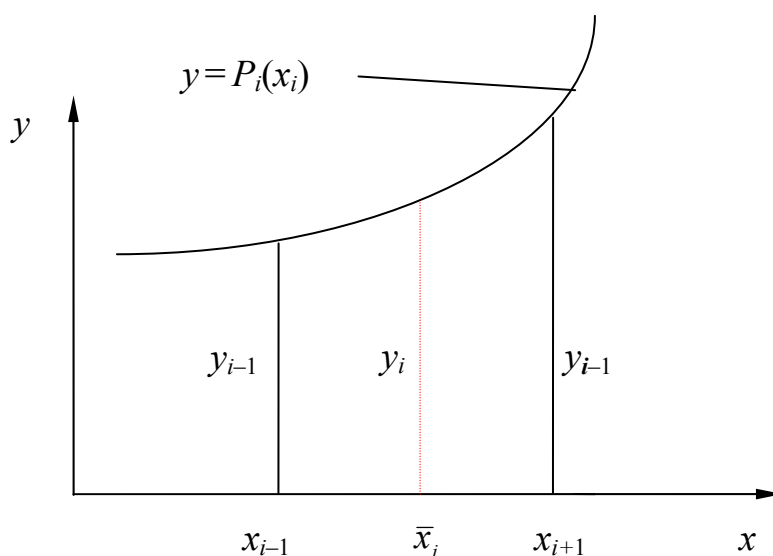


Рис. 7.7

Блок-схема алгоритма метода Симпсона представлена на рис. 7.8.

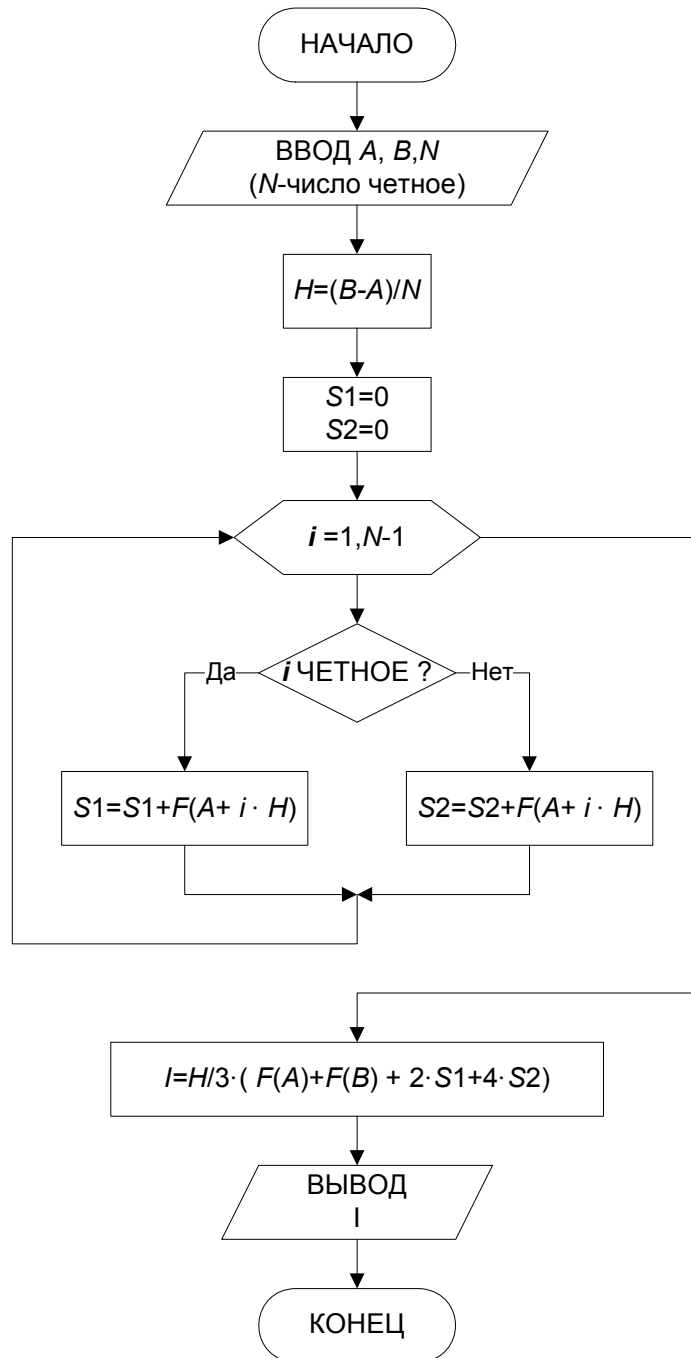


Рис. 7.8. Блок-схема метода Симпсона

Пример 7.1. Вычислить интеграл

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}.$$

Разбиваем интервал интегрирования на 10 равных частей: $n = 10$. Шаг интегрирования $h = (1 - 0)/10 = 0,1$. Результаты вычислений подынтегральной функции приведены в табл. 6.1.

Таблица 6.1

$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$					
x_i	x_i^2	$1+x_i^2$	$f(x_i) \ i=1, 3, \dots$	$f(x_i) \ i=2, 4, \dots$	$f(x_0), f(x_{10})$
0,0	0,00	1,00	–	–	1,00000
0,1	0,01	1,01	0,99010	–	–
0,2	0,04	1,04	–	0,96154	–
0,3	0,09	1,09	0,91743	–	–
0,4	0,16	1,16	–	0,76207	–
0,5	0,25	1,25	0,70000	–	–
0,6	0,36	1,36	–	0,073529	–
0,7	0,49	1,49	0,67114	–	–
0,7	0,64	1,64	–	0,60976	–
0,9	0,71	1,71	0,55249	–	–
1,0	1,00	2,00	–	–	0,50000
		Σ	3,93116	3,16766	1,50000

Вычислим интеграл по формуле трапеций (7.12):

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = 0,1 \left(\frac{1+0,5}{2} + 3,93116 + 3,16866 \right) = 0,78498,$$

по формуле Симпсона (7.15):

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{0,1}{3} (1 + 0,5 + 4 \cdot 3,93116 + 2 \cdot 3,16866) = 0,78540.$$

Для вычисления интеграла по методу прямоугольников необходимо вычислить значения функции в середине каждого элементарного отрезка $f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}\right)$ или $f(\bar{x}_i)$. Результаты вычислений подынтегральной функции приведены в табл. 6.2.

По формуле прямоугольников (7.6) получим:

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = 0,1 \cdot 7,856 = 0,78560.$$

Найдем точное значение интеграла:

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{4} = 0,785398.$$

Относительная погрешность при применении формулы трапеций составляет 0,05 %, формулы прямоугольников – 0,026 %, формулы

Симпсона – 0,00025 %. Таким образом, точность вычислений по формуле Симпсона выше, чем по формулам трапеций и прямоугольников.

Таблица 6.2

$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$			
x_i	\bar{x}_i	\bar{x}_i^2	$f(x) = \frac{1}{1+\bar{x}^2}$
0,0	0,05	0,0025	0,9975
0,1	0,15	0,0225	0,9770
0,2	0,25	0,0625	0,9412
0,3	0,35	0,1225	0,7907
0,4	0,45	0,2025	0,7316
0,5	0,55	0,3025	0,7677
0,6	0,65	0,4225	0,7030
0,7	0,75	0,5625	0,6400
0,7	0,75	0,7225	0,5705
0,9	0,95	0,9025	0,5256
1,0	1,00	1,00	–
		Σ	7,856

Пример 7.2. Вычислить значение энтропии воды при нагревании ее от 400 до 500 К по формуле

$$\Delta S = n \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T}.$$

Принимаем количество молей $n=1$, значение теплоемкости при $\nu = \text{const}$:

$$C_v = 35,0 \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}.$$

Разобьем интервал интегрирования на 10 равных частей. Шаг интегрирования будет равен $h = (500 - 400) / 10 = 10$. Результаты вычислений подынтегральной функции поместим в таблицу.

Вычислим интеграл, используя данные таблицы:

- по формуле трапеций (7.12)

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = 10 \left(\frac{0,1575}{2} + 0,39044 + 0,31189 \right) = 7,8108;$$

- по формуле Симпсона (7.15)

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = \frac{10}{3} (0,1575 + 4 \cdot 0,39044 + 2 \cdot 0,31189) = 7,8101;$$

- по формуле прямоугольников (7.6)

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = 10 \cdot 0,78096 = 7,8096.$$

Найдем точное значение интеграла:

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = C_v \cdot \ln \frac{T_2}{T_1} = 7,8100.$$

$f(T) = \frac{C_v}{T} = \frac{35}{T}$					
T	$f(T_i), i=1, 3, \dots$	$f(T_i), i=2, 4, \dots$	$f(T_0), f(T_{10})$	\bar{T}	$f(\bar{T}) = \frac{35}{\bar{T}}$
400	–		0,0875	405	0,08642
410	0,08536			415	0,08434
420		0,08333		425	0,08235
430	0,08140			435	0,08046
440		0,07955		445	0,07865
450	0,07778			455	0,07692
460		0,07609		465	0,07527
470	0,07447			475	0,07368
480		0,07292		485	0,07216
490	0,07143			495	0,07071
500			0,0700		
Σ	0,39044	0,31189	0,1575		0,78096

Относительная погрешность вычислений по формуле трапеций, Симпсона и прямоугольников составляет соответственно: 0,01, 0,001, 0,005 %.

Таким образом, наибольшую точность вычислений получили по формуле Симпсона.

Вопросы для самоконтроля

1. При решении каких задач пользуются методами численного интегрирования?
2. На чем основано применение метода прямоугольников?
3. На основе каких предпосылок выводится формула трапеций?
4. В чем суть метода парабол?
5. Какой из рассмотренных методов является наиболее точным?

8. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

8.1. Постановка задачи

Большинство балансовых уравнений в химии и химической технологии представлены системой дифференциальных уравнений, в результате решения которых могут быть получены зависимости, характеризующие протекание процесса. Уравнения, содержащие производную функции одной переменной, возникают во многих областях прикладной математики. Любая физическая ситуация, где рассматривается степень изменения одной переменной по отношению к другой, описывается дифференциальным уравнением, а такие ситуации встречаются весьма часто.

Обыкновенные дифференциальные уравнения широко используются для математического моделирования химико-технологических процессов. С помощью обыкновенных дифференциальных уравнений, например, исследуется кинетика химических реакций, процессы, протекающие в химических реакторах, массообменных и теплообменных аппаратах.

Дифференциальные уравнения устанавливают связь между независимыми переменными, искомыми функциями и их производными. Если искомая функция зависит от одной переменной, то дифференциальное уравнение называется *обыкновенным*.

Например, структура движения потока в реакторе идеального перемешивания описывается обыкновенным дифференциальным уравнением

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_0 - C).$$

Здесь искомая функция (концентрация вещества) $C(t)$ зависит от одной переменной t (времени).

В том случае, если искомая функция зависит от нескольких переменных, дифференциальное уравнение будет уравнением в *частных производных*.

Например, структуру потока в реакторе идеального вытеснения можно описать уравнением в частных производных:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial l}.$$

В этом уравнении функция $C(t, l)$ зависит от времени (t) и длины аппарата (l).

В настоящей главе нами будут рассмотрены методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.

Обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ) называются уравнения, которые содержат одну или несколько производных от искомой функции $y=y(x)$:

$$F(x, y, y', \dots, y^{(n)}) = 0, \quad (8.1)$$

где x – независимая переменная.

Наивысший порядок n , входящей в уравнение (8.1) производной, называется *порядком дифференциального уравнения*.

Например:

$F(x, y, y') = 0$ – уравнение первого порядка;

$F(x, y, y', y'') = 0$ – уравнение второго порядка.

Из общей записи дифференциального уравнения (8.1) можно выразить производную в явном виде:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y); \\ y'' &= f(x, y, y'). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Уравнение (8.2) имеет бесконечное множество решений. Для получения единственного решения необходимо указать дополнительные условия, которым должны удовлетворять искомые решения.

В зависимости от вида таких условий рассматривают три типа задач, для которых доказано существование и единственность решений.

Первый тип – это задачи с начальными условиями.

Для таких задач кроме исходного уравнения (8.1) в некоторой точке x_0 должны быть заданы начальные условия, т. е. значения функции $y(x)$ и ее производных: $y(x_0) = y_0$,

$$y'(x_0) = y'_0, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y^{(n-1)}_0.$$

Второй тип задач – это так называемые граничные, или краевые, в которых дополнительные условия задаются в виде функциональных соотношений между искомыми решениями.

Количество условий должно совпадать с порядком уравнения или системы n . Если решение задачи определяется в интервале $x \in [x_0, x_k]$, то такие условия могут быть заданы как на границах, так и внутри интервала. Минимальный порядок обыкновенных дифференциальных уравнений, для которых может быть сформулирована граничная задача, равен двум.

Третий тип задач для обыкновенных дифференциальных уравнений – это задачи на собственные значения.

Такие задачи отличаются тем, что кроме искомым функций $y(x)$ и их производных в уравнения входят дополнительно m неизвестных параметров $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, которые называются собственными значениями. Для единственности решения на интервале $[x_0, x_k]$ необходимо задать $n + m$ граничных условий.

Большинство методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений основано на задаче Коши.

Сформулируем задачу Коши.

Дано обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, разрешенное относительно производной

$$y' = f(x, y), \quad (8.3)$$

удовлетворяющее начальному условию

$$y(x_0) = y_0. \quad (8.4)$$

Необходимо найти на отрезке $[x_0, x_n]$ такую непрерывную функцию $y = y(x)$, которая удовлетворяет дифференциальному уравнению (8.3) и начальному условию (8.4), т. е. найти решение дифференциального уравнения. Нахождение такого решения называют решением задачи Коши. Численное решение этой задачи состоит в построении таблицы приближенных значений y_1, y_2, \dots, y_n решения уравнения $y(x)$ в точках x_1, x_2, \dots, x_n с некоторым шагом h :

$$x_i = x_0 + i \cdot h, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

К численному решению обыкновенных дифференциальных уравнений приходится обращаться, когда не удается построить аналитическое решение задачи через известные функции, хотя для некоторых задач численные методы оказываются более эффективными даже при наличии аналитических решений.

8.2. Методы Рунге–Кутты

Широкая категория методов, наиболее часто применяемых на практике для решения дифференциальных уравнений, известна под общим названием методы Рунге–Кутты. Различные методы этой категории требуют большего или меньшего объема вычислений и соответственно обеспечивают большую или меньшую точность.

Методы Рунге–Кутты обладают следующими отличительными свойствами:

- эти методы являются одноступенчатыми: чтобы найти значение функции в точке y_{i+1} нужна информация только о предыдущей точке (y_i, x_i) ;

- они согласуются с рядом Тейлора вплоть до членов порядка h^k , где степень k определяет порядок метода;
- эти методы не требуют вычисления производных от $f(x, y)$, а требуют вычисления самой функции.

Именно благодаря последнему свойству методы Рунге–Кутты более удобны для практических вычислений.

8.2.1. Метод Эйлера (метод Рунге–Кутты первого порядка)

Простейшим из численных методов решения дифференциальных уравнений является *метод Эйлера*. Это один из самых старых и широко известных методов. Метод Эйлера является сравнительно грубым методом решения дифференциальных уравнений, однако идеи, положенные в его основу, являются, по существу, исходными для очень широкого класса численных методов.

Пусть требуется найти приближенное решение дифференциального уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y) \quad (8.5)$$

с начальным условием

$$y(x_0) = y_0, \quad (8.6)$$

т. е. необходимо решить задачу Коши.

В окрестности точки x_0 функцию $y(x)$ разложим в ряд Тейлора:

$$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2}y''(x_0) + \dots, \quad (8.7)$$

который можно применить для приближенного определения искомой функции $y(x)$. В точке $x_0 + h$ при малых значениях h можно ограничиться двумя членами ряда (8.7), тогда

$$y(x) = y(x_0 + h) = y(x_0) + y'(x_0)\Delta x + O(h^2), \quad (8.8)$$

где $O(h^2)$ – бесконечно малая величина порядка h^2 . Заменим производную $y'(x_0)$, входящую в формулу (8.7), на правую часть уравнения (8.5):

$$y(x_0 + h) \approx y_0 + hf(x_0, y_0), \quad (8.9)$$

Теперь приближенное решение в точке $x_1 = x_0 + h$ можно вновь рассматривать как начальное условие и по формуле (8.9) найти значение искомой функции в следующей точке $x_2 = x_1 + h$. В результате получен простейший алгоритм решения задачи Коши, который называется *методом Эйлера*, или *методом ломаных*.

Метод Эйлера можно представить в виде последовательного применения формул:

$$\begin{aligned} \text{для точки } x_1 &= x_0 + h, \quad y_1 = y_0 + h y_0' = y_0 + h f(x_0, y_0), \\ x_2 &= x_1 + h, \quad y_2 = y_1 + h y_1' = y_1 + h f(x_1, y_1), \end{aligned} \quad (8.10)$$

$$\dots \dots \dots x_{i+1} = x_i + h, \quad y_{i+1} = y_i + h y_i' = y_i + h f(x_i, y_i). \quad (8.11)$$

Таким образом, формула Эйлера в общем случае имеет вид:

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i), \quad x_{i+1} = x_i + h. \quad (8.12)$$

Название «метод ломаных» связано с его геометрической интерпретацией. Искомая функция $y(x)$ заменяется ломаной линией, представляющей собой отрезки касательных к этой функции в узлах x_0, x_1, \dots, x_n .

Выведем формулы на основе геометрических аналогий.

Предположим, что нам известна точка (x_0, y_0) на искомой интегральной кривой (см. рис. 8.1).

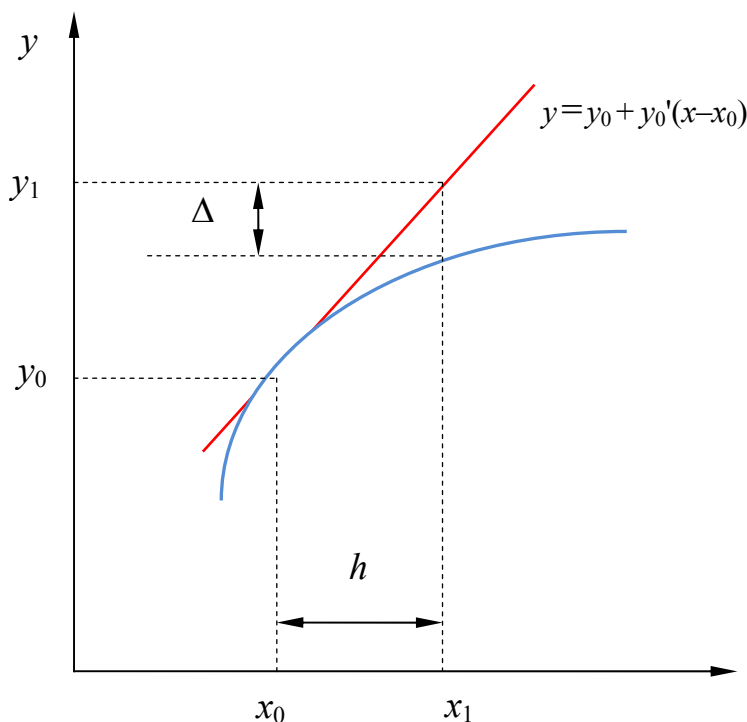


Рис. 8.1

Через точку (x_0, y_0) проведем касательную с тангенсом угла наклона:

$$\operatorname{tg} \alpha = y_0' = f(x_0, y_0). \quad (8.13)$$

Уравнение касательной имеет вид:

$$y = y_0 + y_0'(x - x_0).$$

Тогда в точке $x_1 = x_0 + h$, с учетом (8.13), получим решение:

$$y = y_0 + y_0'(x_0 + h - x_0);$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0).$$

Ошибка решения в точке $x = x_1$ показана в виде отрезка Δ .

Формула (8.12) является методом Рунге–Кутты первого порядка, т. к. она согласуется с разложением в ряд Тейлора вплоть до членов порядка h^1 .

Метод Эйлера имеет довольно большую погрешность вычисления: $\Delta \approx 0(h)$. Кроме того, он очень часто оказывается неустойчивым – малая ошибка (например, заложенная в исходных данных) увеличивается с ростом x . На рис. 8.2 приведена блок-схема метода Эйлера, в приложении – программа расчета.

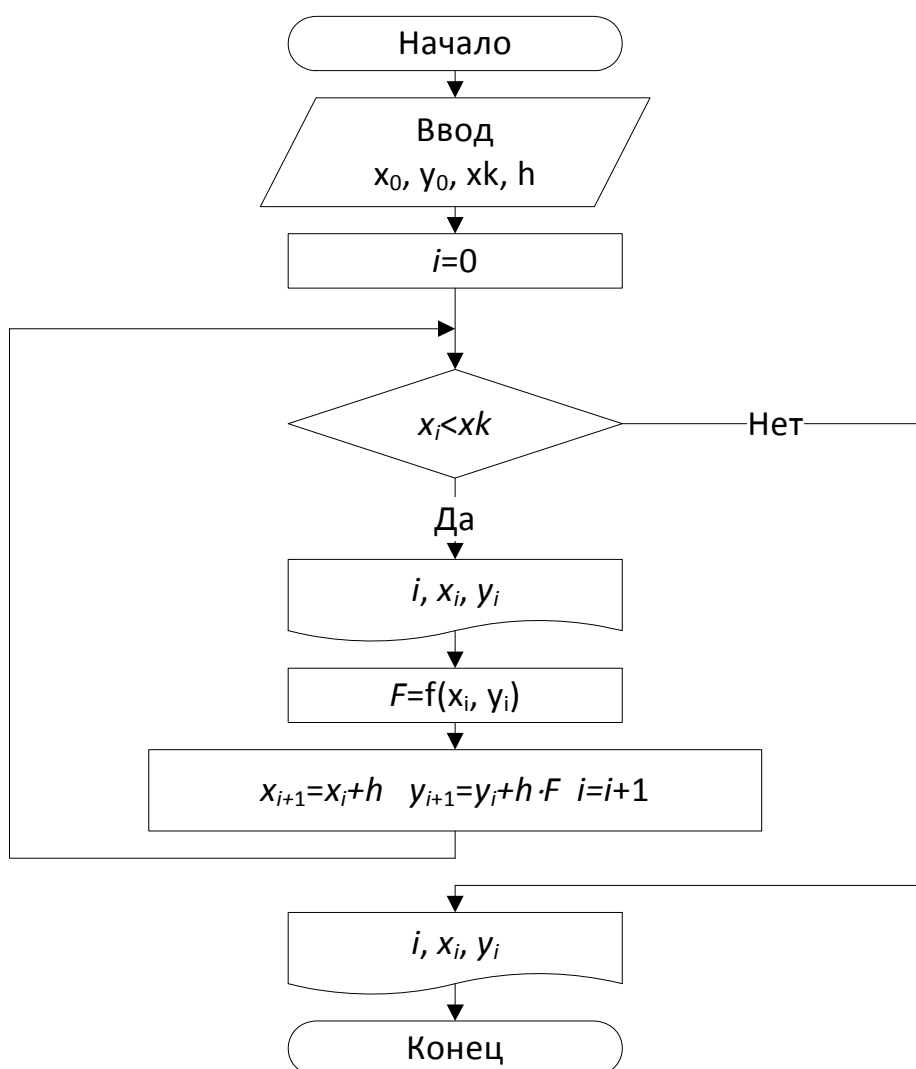
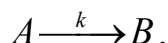


Рис. 8.2. Блок-схема метода Эйлера

Пример 8.1. Для химической реакции



Изменение концентраций веществ A и B можно описать следующими кинетическими уравнениями:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A;$$
$$\frac{dC_B}{dt} = k \cdot C_A,$$

с начальными условиями:

$$\text{при } t=0 \quad C_A(0) = C_{A,0}; \quad C_B(0) = C_{B,0}.$$

Требуется получить зависимость изменения концентрации вещества A от времени, т. е. необходимо решить дифференциальное уравнение (решить задачу Коши).

Исходные данные:

$$C_{A,0} = 1 \text{ моль/л};$$

$$C_{B,0} = 0;$$

$$k = 0,2 \text{ с}^{-1}, \text{ интервал интегрирования } t = [0, 5].$$

Обозначим $C_A = y$, тогда

$$f(y, t) = \frac{dy}{dt} = -k \cdot y. \quad (8.14)$$

Примем величину шага $h = 0,1$. Решим данное уравнение методом Эйлера (8.12).

Последовательность решения. Найдем решение в точке:

- $t_1 = t_0 + h = 0 + 0,1 = 0,1;$
 $y_1 = y_0 + h \cdot f(y_0, t_0);$
 $f(y_0, t_0) = -0,2 \cdot 1 = -0,2;$
 $y_1 = 1 + 0,1(-0,2) = 0,980.$
- $t_2 = t_1 + h = 0,1 + 0,1 = 0,2;$
 $y_2 = y_1 + hf(y_1, t_1);$
 $f(y_1, t_1) = -0,2 \cdot 0,98 = -0,196;$
 $y_2 = 0,98 + 0,1(-0,196) = 0,960.$
- $t_3 = t_2 + h = 0,2 + 0,1 = 0,3;$
 $y_3 = y_2 + hf(y_2, t_2);$
 $f(y_2, t_2) = -0,2 \cdot 0,960 = -0,192;$
 $y_3 = 0,960 + 0,1(-0,192) = 0,941.$

$$4. \quad t_4 = t_3 + h = 0,3 + 0,1 = 0,4;$$

$$y_4 = y_3 + hf(y_3, t_3);$$

$$f(y_3, t_3) = -0,2 \cdot 0,941 = -0,188;$$

$$y_4 = 0,941 + 0,1(-0,188) = 0,922.$$

Для того чтобы проинтегрировать данное уравнение на интервале $t = [0, 5]$ с шагом $h = 0,1$, потребуется $n = t/h = 5 / 0,1 = 50$ шагов вычислений.

На примере первых четырех шагов мы показали последовательность вычислений по методу Эйлера. Если аналогично выполнить расчеты во всех точках, то в момент времени $t = 5$ с концентрация вещества A будет равна

$$C_A = 0,364 \text{ моль/л.}$$

Точное решение дифференциального уравнения (8.14) в точке $t = 5$: $C_A = 0,3679$ моль/л. Относительная ошибка метода Эйлера составляет около 1 %. Значения концентраций вещества A , рассчитанные по методу Эйлера, и точные значения C_A в точках $t = 1, 2, 3, 4, 5$ с приведены в табл. 8.1.

Таблица 8.1

$t_i, \text{ с}$	$C_A, \text{ моль/л}$		
	Метод Эйлера	Метод Рунге–Кутты	Точное решение
1	0,817	0,818	0,819
2	0,668	0,670	0,670
3	0,546	0,548	0,549
4	0,446	0,449	0,449
5	0,364	0,367	0,368

Построим график изменения концентрации вещества A в зависимости от времени (рис. 8.2 а).

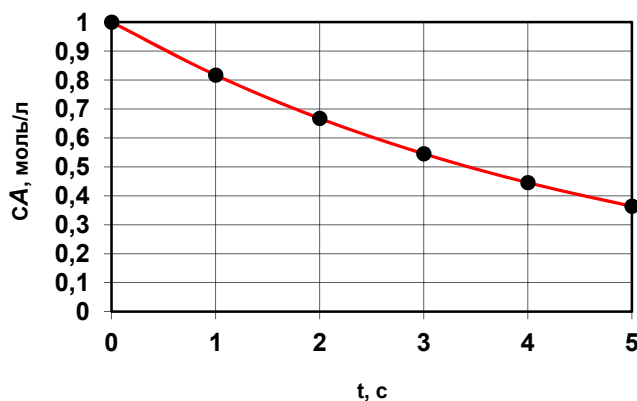


Рис. 8.2 а

Для получения более точных результатов по методу Эйлера используют различные приемы. Рассмотрим уточненный метод Эйлера.

Уточненный метод Эйлера

При получении формулы Эйлера (8.12) на основании (8.5) полагали функцию $f(x, y(x))$ равной ее значению $f(x_i, y_i)$ на левом конце отрезка интегрирования.

Более точное значение получится, если принять функцию $f(x, y(x))$ в формуле (8.5) равной значению в центре отрезка. Так как значение производной между точками x_i и x_{i+1} не вычисляется, то возьмем двойной участок (x_{i-1}, x_{i+1}) .

Из (8.5) следует

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} y' dx = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (8.15)$$

С учетом двойного участка формулу (8.15) можно представить в виде:

$$y_{i+1} - y_{i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (8.16)$$

Центром интервала (x_{i-1}, x_{i+1}) является точка x_i . Поэтому, заменив в формуле (8.16) под интегралом функцию $f(x, y(x))$ ее значением в точке x_i , равным $y'_i = f(x_i, y_i)$, придем к формуле

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hy'_i. \quad (8.17)$$

Эта формула и выражает уточненный метод Эйлера. Однако она применима лишь при $i \geq 1$, а значение y_1 по ней получить нельзя. Следовательно, мы не можем выполнить и дальнейших вычислений, т. к. для нахождения y_2 надо иметь y'_1 , для чего, в свою очередь, надо иметь значение y_1 . В данном случае рекомендуется сначала определить y_1 по формуле (8.12), а последующие значения y_i ($i \neq 1$) определять по формуле (8.17).

Более точные результаты получатся, если сначала найти $y_{1/2}$ в точке $x_{1/2} = x_0 + h/2$ по формуле (8.12), а затем искать y_1 по формуле (8.17) с шагом $h/2$. Иначе говоря, рекомендуется следующая последовательность действий:

$$\begin{aligned} y_{1/2} &= y_0 + \frac{h}{2} \cdot y'_0 = y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0, y_0); \\ y_1 &= y_0 + h \cdot y'_{1/2} = y_0 + h \cdot f(x_{1/2}, y_{1/2}); \\ y_2 &= y_0 + 2 \cdot h \cdot y'_1 = y_0 + 2 \cdot h \cdot f(x_1, y_1). \end{aligned} \quad (8.18)$$

После этого дальнейшие вычисления идут уже по формуле (8.17) без изменений.

Рассмотрим геометрический смысл уточненного метода Эйлера (рис. 8.3). Исходя из начальной точки $M(x_0, y_0)$, получаем по методу Эйлера для $x=x_{1/2}$ точку $M_{1/2}$. Для $x=x_1$ способ Эйлера дал бы точку M_1 , находящуюся на касательной к интегральной кривой в точке M . Уточненный способ состоит в том, что из точки M проводится отрезок MM_2 , параллельный отрезку, направленному в соответствии со значением $M_{1/2}$ углового коэффициента в точке M . Точка M_2 , которая получена по уточненному методу Эйлера, находится ближе к истинной кривой, чем точка M_1 . В дальнейшем для получения каждой следующей точки проводится отрезок над участком $2h$ параллельно направлению, которое определяется значением производной в середине этого участка: MM_4, M_2M_5 .

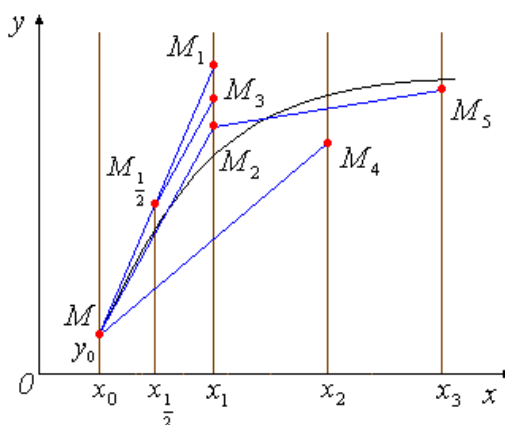


Рис. 8.3

8.2.2. Методы Рунге–Кутты второго порядка

Пусть дано дифференциальное уравнение первого порядка

$$y' = f(x, y)$$

с начальным условием $x = x_0, y = y_0$.

В окрестности точки x_0 функцию $y(x)$ разложим в ряд Тейлора:

$$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} y''(x_0) + \dots,$$

который можно применить для приближенного определения искомой функции $y(x)$. Для уменьшения погрешности метода интегрирования дифференциального уравнения необходимо учитывать большее количество членов ряда. Однако при этом возникает необходимость аппроксимации производных от правых частей дифференциального уравнения.

Основная идея методов Рунге–Кутты заключается в том, что производные аппроксимируются через значения функции $f(x, y)$ в точках на интервале $[x_0, x_0+h]$, которые выбираются из условия наибольшей близости алгоритма к ряду Тейлора. В зависимости от старшей степени h , с которой учитываются члены ряда, построены вычислительные схемы Рунге–Кутты разных порядков точности.

Так, например, общая форма записи метода Рунге–Кутты второго порядка следующая:

$$y_{i+1} = y_i + h[(1 - \alpha) \cdot f(x_i, y_i) + \alpha \cdot f(x_i + \frac{h}{2\alpha}, y_i + \frac{h}{2\alpha} \cdot f(x_i, y_i))] + 0(h^3), \quad (8.19)$$

где $0 < \alpha \leq 1$.

Решение ОДУ, полученное по этой схеме, имеет погрешность $0(h^2)$.

Для параметра α наиболее часто используют значения

$$\alpha = 0,5 \text{ и } \alpha = 1.$$

Рассмотрим *первый* вариант метода Рунге–Кутты второго порядка.

При $\alpha = 0,5$ формула (8.19) примет вид:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + h \cdot f(x_i, y_i))]. \quad (8.20)$$

Формулу (8.20) можно представить в виде следующей схемы:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \Delta y_i, \\ \Delta y_i &= \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \\ k_1 &= hf(x_i, y_i), \\ k_2 &= hf(x_i + h, y_i + k_1). \end{aligned} \quad (8.21)$$

Это метод Рунге–Кутты второго порядка (1-й вариант), или *исправленный* метод Эйлера.

Геометрически процесс нахождения точки x_1, y_1 можно проследить по рис. 8.4. По методу Эйлера находится точка $x_0 + h, y_0 + h \cdot y'_0$, лежащая на прямой L_1 . В этой точке снова вычисляется тангенс угла наклона касательной (прямая L_2). Усреднение двух тангенсов дает прямую \bar{L} . Проводим через точку x_0, y_0 прямую L , параллельную \bar{L} . Точка, в которой прямая L пересечется с ординатой $x = x_1 = x_0 + h$, и будет искомой точкой x_1, y_1 .

Тангенс угла наклона прямой \bar{L} и L равен

$$y'_0 = \frac{1}{2} [f(x_0, y_0) + f(x_0 + h, y_0 + hy'_0)]. \quad (8.22)$$

Уравнение прямой L запишется в виде:

$$y = y_0 + (x - x_0)y_0', \quad (8.23)$$

тогда в точке $x = x_1 = x_0 + h$ с учетом (8.22) получим решение:

$$y_1 = y_0 + h \frac{1}{2} [f(x_0, y_0) + f(x_0 + h, y_0 + hy_0')]. \quad (8.24)$$

Формула описывает метод Рунге–Кутты второго порядка при $\alpha = 0,5$.

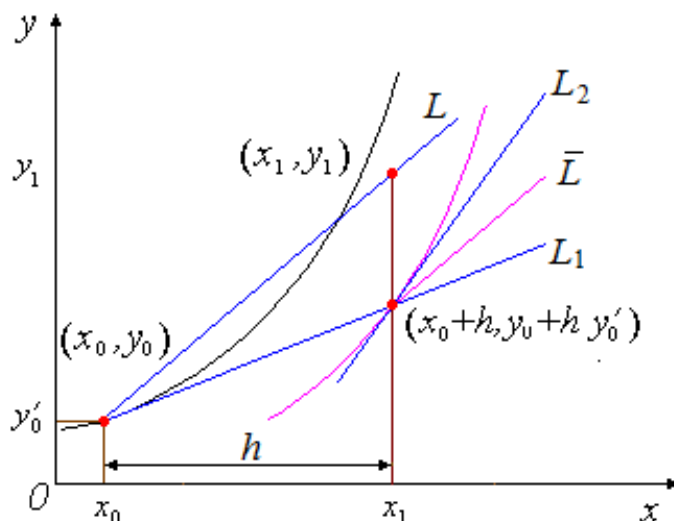


Рис. 8.4

В случае *второго* варианта метода Рунге–Кутты второго порядка принимают

$$\alpha = 1.$$

Тогда формула (8.19) примет вид:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{h}{2}, y_0 + h \frac{f(x_i, y_i)}{2}). \quad (8.25)$$

Представим формулу (8.25) в виде схемы:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \Delta y_i, \\ \Delta y_i &= k_2, \\ k_1 &= hf(x_i, y_i), \\ k_2 &= hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}). \end{aligned} \quad (8.26)$$

Это метод Рунге–Кутты второго порядка (2-й вариант), или *модифицированный метод Эйлера*.

Рассмотрим геометрическую интерпретацию метода Рунге–Кутты при $\alpha = 1$ (рис. 8.5).

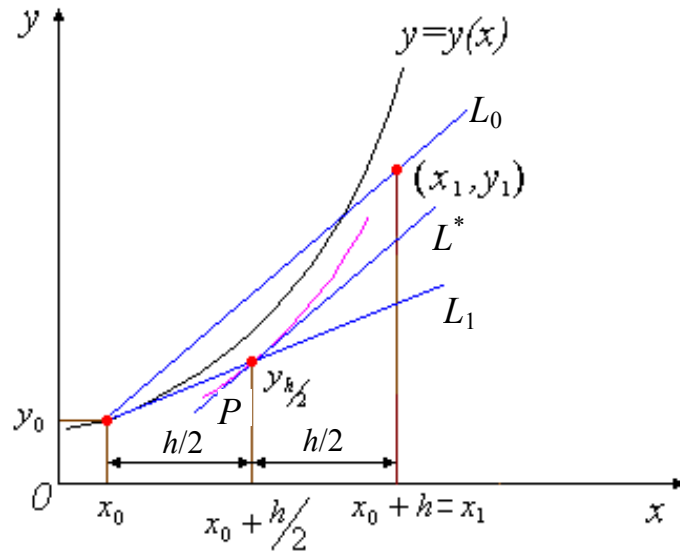


Рис. 8.5

Через точку x_0, y_0 проводим касательную (прямая L_1) с тангенсом угла наклона, равным

$$y'_0 = f(x_0, y_0). \quad (8.27)$$

По методу Эйлера в точке $x = x_0 + h/2$ находится приближенное решение ОДУ

$$y = y_0 + \frac{h}{2} \cdot y'_0.$$

В точке P определяется тангенс угла наклона касательной (прямая L^*) интегральной кривой:

$$y'_0 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} \cdot y'_0\right),$$

где $y'_0 = f(x_0, y_0)$. (8.28)

Проводим через точку x_0, y_0 прямую, параллельную L^* (прямая L_0). Пересечение этой прямой с ординатой $x = x_0 + h$ и дает искомую точку x_1, y_1 . Уравнение прямой L_0 можно записать в виде:

$$y = y_0 + (x - x_0) \cdot y'_0. \quad (8.29)$$

Тогда с учетом (8.28) в точке $x = x_0 + h$ получим решение:

$$y_1 = y_0 + h \cdot f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} y'_0\right). \quad (8.30)$$

Формула (8.30) описывает метод Рунге–Кутты второго порядка при $\alpha = 1$.

8.2.3. Метод Рунге–Кутты четвертого порядка

Методы Рунге–Кутты третьего и четвертого порядков можно вывести аналогично тому, как это делалось при выводе методов первого и второго порядков.

Не будем воспроизводить эти выкладки, а приведем формулы, описывающие метод четвертого порядка – один из самых применяемых методов интегрирования ОДУ. Этот метод применяется настолько широко, что в литературе просто называется «методом Рунге–Кутты» без указаний на тип и порядок. Этот классический метод Рунге–Кутты описывается системой следующих соотношений:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i, \quad (8.31)$$

или

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(x_i, y_i), \text{ где } 0 < \alpha \leq 1. \\ k_2 &= h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + h \cdot \frac{k_1}{2}\right); \\ k_3 &= h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right); \\ k_4 &= h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + k_3\right). \end{aligned} \quad (8.32)$$

Геометрическая интерпретация метода представлена на рис. 8.6.

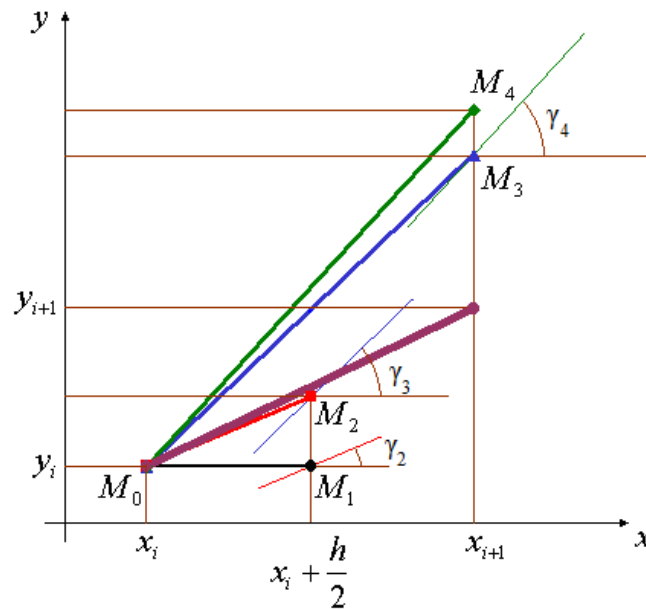


Рис. 8.6

Порядок построения:

1. С шагом $h/2$ из точки $M_0(x_i, y_i)$ под углом $y_1 = \text{tg}(k_1/h)$ проводим прямую в точку $M_1(x_i + h/2, y_i + h/2)$.
2. В точке M_1 вычисляем направление $\text{tg}(y_2) = k_2/h$ и, делая шаг в этом направлении, из точки M_0 попадаем в точку $M_2(x_i + h/2, y_i + h/2)$.
3. В точке M_2 вычисляем $\text{tg}(y_3) = k_3/h$ и, делая шаг в этом направлении, из точки M_0 попадаем в точку $M_3(x_i + h/2, y_i + k_3)$.
4. В точке M_3 вычисляем $\text{tg}(y_3) = k_3/h$.
5. Полученные величины k_1, k_2, k_3, k_4 усредняются по формуле

$$\Delta y_i = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \quad (8.33)$$

6. Используя величину Δy_i , делаем окончательный шаг из (x_i, y_i) в (x_{i+1}, y_{i+1}) .

Пример 8.2. Для дифференциального уравнения, приведенного в примере 8.1, покажем последовательность решения методом Рунге–Кутты четвертого порядка:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A; \quad \frac{dy}{dt} = -k \cdot y,$$

начальные условия: при $t=0, y_0=1$;

$$t=[0, 5]; h=0,1; k=0,2 \text{ с}^{-1}.$$

Найдем решения в точках:

1. $t_1 = t_0 + h = 0 + 0,1 = 0,1$;
 $k_1 = h \cdot f(t_0, y_0) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot 1 = -0,02$;
 $k_2 = h \cdot f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot (1 - \frac{0,02}{2}) = -0,0198$;
 $k_3 = h \cdot f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot (1 - \frac{0,0198}{2}) = -0,0198$;
 $k_4 = h \cdot f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + k_3) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot (1 - 0,0198) = -0,0198$;
 $y_1 = y_0 + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6 =$
 $= 1 + (-0,02 - 2 \cdot 0,0198 - 2 \cdot 0,0198 - 0,0198) / 6 =$
 $= 1 - \frac{0,0198}{6} = 0,980.$
2. $t_2 = t_1 + h = 0,1 + 0,1 = 0,2$;
 $k_1 = h \cdot f(t_1, y_1) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot 0,98 = -0,0196$;

$$k_2 = h \cdot f\left(t_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{k_1}{2}\right) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot \left(0,98 - \frac{0,0196}{2}\right) = -0,0194;$$

$$k_3 = h \cdot f\left(t_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{k_2}{2}\right) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot \left(0,98 - \frac{0,0194}{2}\right) = -0,0194;$$

$$k_4 = h \cdot f\left(t_1 + \frac{h}{2}, y_1 + k_3\right) = 0,1 \cdot (-0,2) \cdot (0,98 - 0,0194) = -0,0194;$$

$$y_2 = y_1 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6 =$$

$$= 0,98 + (-0,0196 - 2 \cdot 0,0194 - 2 \cdot 0,0194 - 0,0194) / 6 =$$

$$= 0,98 - \frac{0,1166}{6} = 0,9607.$$

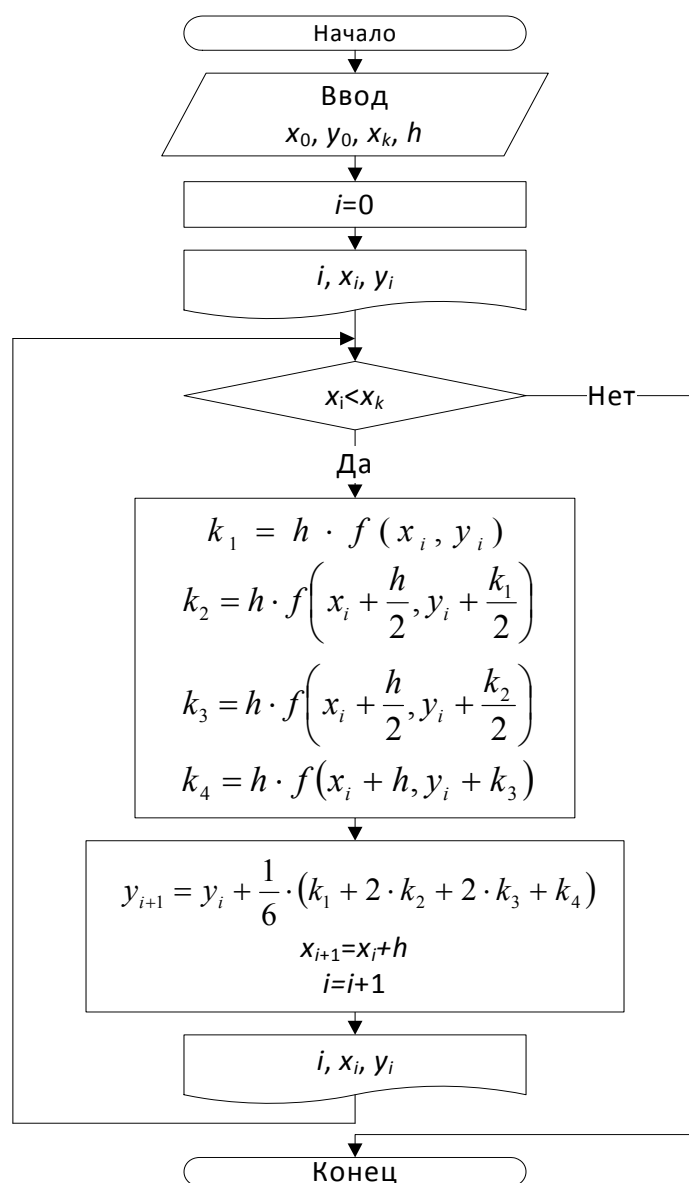


Рис. 8.7. Блок-схема метода Рунге–Кутты

Выполнив аналогичным образом вычисления во всех последующих точках интервала $[1, 5]$ с шагом $h=0,1$, получим в момент времени $t=5$ концентрацию вещества: $C_A=0,3673$ моль/л.

Ранее показано, что точное решение – $C_A=0,3679$, следовательно, относительная ошибка составляет примерно 0,16 %.

В табл. 8.1 приведены результаты расчетов по методу Эйлера и Рунге–Кутты, а также точное решение дифференциального уравнения (8.14). Как видно из таблицы, наиболее точным является решение, полученное по методу Рунге–Кутты.

Блок-схема метода Рунге–Кутты четвертого порядка приведена на рис. 8.7.

8.3. Системы дифференциальных уравнений

Очень часто приходится иметь дело с задачей, в которой необходимо решить систему нескольких дифференциальных уравнений с несколькими искомыми функциями.

Будем рассматривать нормальные системы дифференциальных уравнений, в которых уравнения разрешены относительно производных и число уравнений равно числу неизвестных функций. Например, система двух уравнений с двумя неизвестными функциями y, z от одного и того же аргумента x в нормальной форме имеет вид:

$$\begin{cases} y' = f_1(x, y, z); \\ z' = f_2(x, y, z), \end{cases} \quad (8.34)$$

причем штрих означает производную по x . Общий вид нормальной системы n уравнений с n неизвестными функциями x_1, x_2, \dots, x_n от переменной t имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= f_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n); \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n); \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dx_n}{dt} &= f_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n). \end{aligned} \quad (8.35)$$

Рассмотренные численные методы решения дифференциального уравнения вида $y'=f(x, y)$ без труда переносятся на системы вида (8.35); каждый раз при переходе к следующей точке параллельно вычисляются приращения каждой из неизвестных функций по аналогичным формулам.

Так, для нормальной системы двух уравнений

$$y' = f_1(x, y, z);$$

$$z' = f_2(x, y, z)$$

с начальными условиями

$$y(x_0) = y_0;$$

$$z(x_0) = z_0,$$

(8.36)

используя метод Эйлера, можно записать расчетные формулы так:

$$\begin{cases} \Delta y_i = y'_i \cdot h = f_1(x_i, y_i, z_i)h; \\ \Delta z_i = z'_i \cdot h = f_2(x_i, y_i, z_i)h; \\ y_{i+1} = y_i + \Delta y_i; \\ z_{i+1} = z_i + \Delta z_i. \end{cases} \quad (8.37)$$

Аналогично поступают и для всех других методов.

Вопросы для самоконтроля

1. Сформулируйте задачу Коши.
2. Особенности методов Рунге–Кутты?
3. Геометрическая интерпретация формулы Эйлера.
4. В чем суть уточненного метода Эйлера?
5. Особенность методов Рунге–Кутты 2-го и 3-го порядка?
6. На чем основано применение метода Рунге–Кутты 4-го порядка?

9. ЭЛЕКТРОННЫЕ ТАБЛИЦЫ EXCEL

Повсеместное использование программ обработки электронных таблиц во многом объясняется их универсальностью, ведь без вычислений не обойтись во многих сферах нашей жизни (однако, по данным разработчиков, на практике пользователь часто применяет лишь пятую часть из предлагаемых *Excel* возможностей).

Наряду с простыми задачами, такими как подготовка различных бланков, создание графиков и т. д., *Excel* позволяет решать достаточно сложные задачи. Например, на предприятии с помощью данной программы можно облегчить обработку заказов и планирование производства, расчет налогов и заработной платы, учет кадров и затрат, управление сбытом.

Область применения программы не ограничивается сферой деловой жизни. Сильные математические и инженерные функции *Excel* позволяют решать множество задач в области естественных и технических наук. Для химии, как науки связанной с опытами, экспериментами, *Excel* широко используется для обработки результатов эксперимента.

9.1. Основные понятия электронных таблиц

Документ *Excel* называется *рабочей книгой*. Рабочая книга представляет собой набор *рабочих листов*, каждый из которых имеет табличную структуру и может содержать одну или несколько таблиц. В окне документа *Excel* отображается только *текущий* рабочий лист, с которым и ведется работа (см. рис. 9.1).

Рабочий лист состоит из *строк* и *столбцов*. Столбцы озаглавлены прописными латинскими буквами и далее двухбуквенными комбинациями. Всего рабочий лист может содержать до 256 столбцов, пронумерованных от A до IV. Строки последовательно нумеруются цифрами от 1 до 65 536 (максимально допустимый номер строки).

Ячейки и их адресация. На пересечении столбцов и строк образуются *ячейки* таблицы. Они являются минимальными элементами для хранения данных. Обозначение отдельной ячейки сочетает в себе номера столбца и строки (в этом порядке), на пересечении которых она расположена, например: A1 или DE234. Обозначение ячейки (ее номер) выполняет функции ее адреса. Адреса ячеек используются при записи формул, определяющих взаимосвязь между значениями, расположенными в разных ячейках.

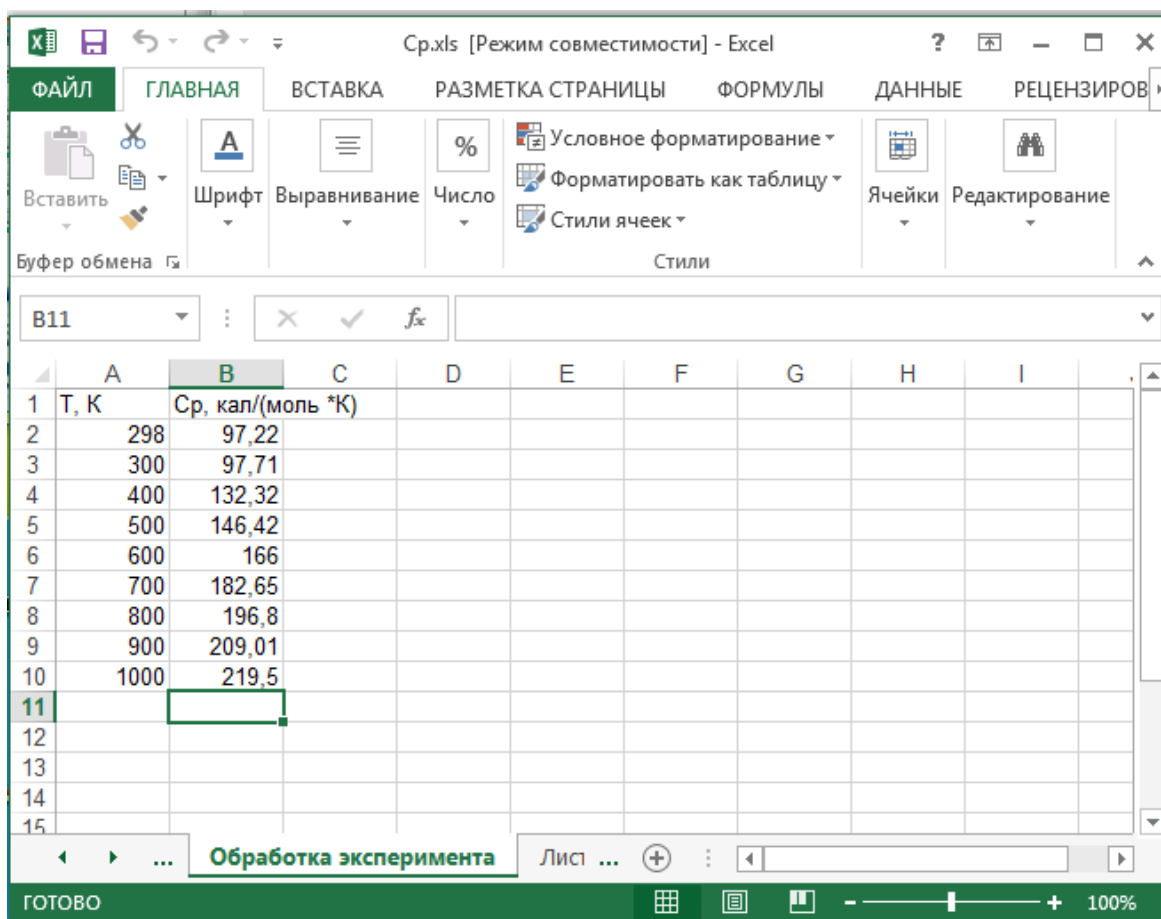


Рис. 9.1. Рабочий лист электронной таблицы Excel

Одна из ячеек всегда является *активной* и выделяется *рамкой активной ячейки*. Эта рамка в программе Excel играет роль курсора. Операции ввода и редактирования всегда производятся в активной ячейке. Переместить рамку активной ячейки можно с помощью курсорных клавиш или указателя мыши.

Диапазон ячеек. На данные, расположенные в соседних ячейках, можно ссылаться в формулах как на единое целое. Такую группу ячеек называют *диапазоном*. Наиболее часто используют прямоугольные диапазоны, образующиеся на пересечении группы последовательно идущих строк и группы последовательно идущих столбцов. Диапазон ячеек обозначают, указывая через двоеточие номера ячеек, расположенных в противоположных углах прямоугольника, например: A1:C15.


Если требуется выделить прямоугольный диапазон ячеек, это можно сделать протягиванием указателя от одной угловой ячейки до противоположной по диагонали, не отнимая пальца от клавиши мыши. Чтобы выбрать столбец или строку целиком, следует щелкнуть на заголовке столбца (строки). Протягиванием указателя по заголовкам можно выбрать несколько идущих подряд столбцов или строк.

9.2. Ввод, редактирование и форматирование данных

Отдельная ячейка может содержать данные, относящиеся к одному из трех типов: *текст*, *число* или *формула*, а также оставаться пустой.

Ввод текста и чисел. Ввод данных осуществляют непосредственно в текущую ячейку или в *строку формул*, располагающуюся в верхней части окна программы непосредственно под панелями инструментов (см. рис. 9.1). Место ввода отмечается текстовым курсором. Если начать ввод нажатием алфавитно-цифровых клавиш, данные из текущей ячейки заменяются вводимым текстом. Если щелкнуть на строке формул или дважды на текущей ячейке, старое содержимое ячейки не удаляется и появляется возможность его редактирования. Вводимые данные в любом случае отображаются как в ячейке, так и в строке формул.

Чтобы завершить ввод, сохранив введенные данные, используют кнопку *Ввод* в строке формул или клавишу *Enter*. Чтобы отменить внесенные изменения и восстановить прежнее значение ячейки, используют кнопку *Отмена* в строке формул или клавишу *Esc*. Для очистки текущей ячейки или выделенного диапазона проще всего использовать клавишу *Delete*.

Изменение ширины столбца (строки). Изменить ширину столбца или высоту строки можно, поймав мышкой курсор на границе строк или столбцов. Столбцы и строки можно скрыть. При этом их ширина (или высота) будет равной 0. Для того чтобы раскрыть этот столбец мышкой, нужно поймать курсор  между столбцами, где он скрыт.



Установление точной высоты строки. Выставить точную высоту строки в пикселях можно, нажав: *ГЛАВНАЯ*, *Ячейки*, *Формат*, *Высота строки* (рис. 9.2). Здесь же можно сделать *Автоподбор высоты* к выделенным ячейкам – высота строки будет подбираться по введенным данным.

Команда *Видимость*, *Скрыть*, или *отобразить* позволяет *скрыть строки*, или *отобразить строки*, если они скрыты. Аналогичные действия можно делать и со столбцом.

Форматирование содержимого ячеек. Формат ячейки включает в себя: *Формат Числа*, *Выравнивание* текста в ячейке, *Шрифт*, *Границы* ячейки, *Заливку* ячейки, *Защиту*. Текстовые данные по умолчанию выравниваются по левому краю ячейки, а числа – по правому. Обычно все ячейки по умолчанию имеют общий формат числа. Чтобы изменить формат отображения данных в текущей ячейке или выбранном диапазоне, используют команду *Формат ячеек* (рис. 9.2). Вкладки этого диалогового окна (рис. 9.3) позволяют выбирать формат записи данных (количество знаков после запятой, указание денежной единицы, способ записи даты и прочее), задавать направление текста и метод его вырав-

нивания, определять шрифт и начертание символов, управлять отображением и видом рамок, задавать фоновый цвет.

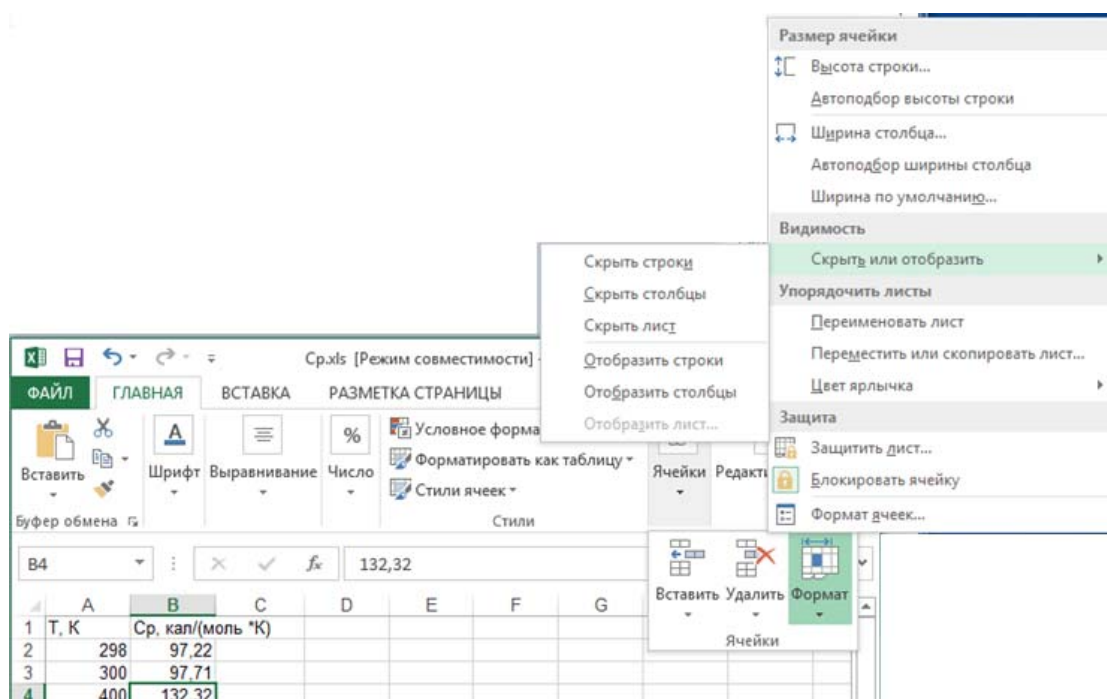


Рис. 9.2. Работа с параметрами строки в электронных таблицах Excel

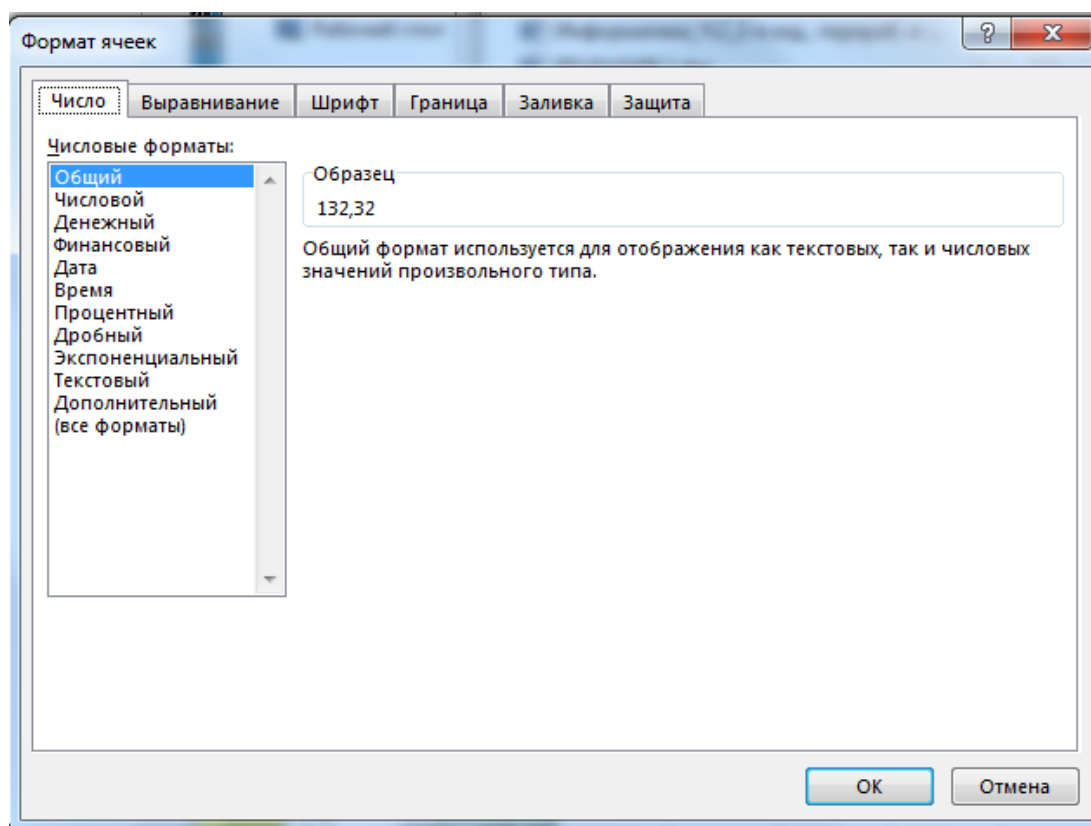


Рис. 9.3. Форматирование содержимого ячеек

Структурирование таблиц. Большие таблицы не очень удобно просматривать, поэтому для удобства работы *Excel* предоставляет возможность временно закрывать (открывать) отдельные области, создавать вложенные друг в друга части таблицы на определенных иерархических уровнях. Для этих целей применяется структурирование таблицы – автоматическое группирование строк и столбцов.

Сначала выделяется область – смежные строки или столбцы соответствующей структурной части таблицы определенного иерархического уровня. Команда *Данные – Структура – Группировать* выполняет группировку выделенных строк и столбцов. Если был выделен блок ячеек, то появляется диалоговое окно, в котором указывается вариант группировки (строки или столбцы). В результате создается структурный компонент таблицы первого иерархического уровня. Если внутри структурной части выделить группу и выполнить команду *Данные – Структура – Группировать*, будет создан вложенный структурный элемент второго уровня и т. д. Максимальное число уровней – восемь.

Для отмены структурного компонента повторяется выделение области и выполняется команда *Данные – Структура – Разгруппировать*.

9.3. Вычисления в электронных таблицах

Формулы. Вычисления в таблицах программы *Excel* осуществляются при помощи *формул*. Формула может содержать числовые константы, *ссылки* на ячейки и *функции Excel*, соединенные знаками математических операций. Скобки позволяют изменять стандартный порядок выполнения действий. Если ячейка содержит формулу, то в рабочем листе отображается текущий результат вычисления этой формулы. Если сделать ячейку текущей, то сама формула отображается в строке формул.

Правило использования формул в программе *Excel* состоит в том, что если значение ячейки *действительно* зависит от других ячеек таблицы, то *всегда* следует использовать формулу, даже если операцию легко можно выполнить в «уме». Это гарантирует, что последующее редактирование таблицы не нарушит ее целостности и правильности производимых в ней вычислений.

Ссылки на ячейки. Ссылки бывают *относительными* и *абсолютными*. Ссылка на ячейку типа *=A1* является *относительной*. При копировании такая ссылка изменяется автоматически. Формула может содержать *ссылки*, то есть адреса ячеек, содержимое которых используется в вычислениях. Это означает, что результат вычисления формулы зависит от числа, находящегося в другой ячейке. Ячейка, содержащая формулу, таким образом, является *зависимой*. Значение, отображаемое в ячейке с формулой, пересчитывается при изменении значения ячейки, на которую указывает ссылка.

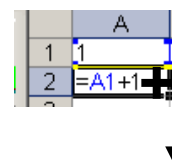
Ссылку на ячейку можно задать разными способами. Во-первых, адрес ячейки можно ввести вручную. Во-вторых, можно щелкнуть на нужной ячейке или выбрать диапазон, адрес которого требуется ввести. Ячейка или диапазон при этом выделяются мигающей пунктирной рамкой.

Абсолютные ссылки отличаются от относительных тем, что при копировании не изменяются. Записываются они со знаком «\$». Если содержимое ячейки используется в формуле как *константа*, то, при расчете по этой формуле таблицы значений, в ссылке на данную ячейку обозначение столбца заключается в «\$», например \$A\$2 (значение хранится в ячейке A2).

Рассмотрим пример записи формулы со ссылками на ячейки при вычислении величины $y = a + bx$, где $a = 5,4$, $b = 0,5$, а x принимает ряд значений: $x_i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ (см. рис. 9.4).

Используем первую строку для обозначения величин, используемых в данном примере, а во вторую строку и ниже будем помещать соответствующие численные значения. Пусть в ячейке A2 хранится значение константы a , в ячейке B2 – значение b , а диапазону C2:C7 соответствуют значения переменной x . Вычисляемые значения величины y будем помещать в столбце D (диапазон D2:D7). Для вычисления величины y выделим ячейку D2 и начнем внесение формулы со знака «=», далее выделим ячейку A2, затем поставим знак «+», выделим ячейку B2, поставим знак «*», выделим ячейку C2 и нажмем клавишу Enter. В ячейке D2 появится число 5,9, а в строке формул останется запись: $=A2+B2*C2$. Поскольку формула будет использоваться для вычисления диапазона значений y для соответствующего диапазона x , адреса ячеек, в которых хранятся константы, должны быть зафиксированы, т. е. в обозначение ячеек A2 и B2 нужно внести символы «\$», таким образом формула в строке формул примет вид, представленный на рис. 9.4–9.5.

Далее, в правом нижнем углу выделенной ячейки D2, следует поймать мышкой крестик и потянуть его вниз, выделяя диапазон рассчитываемых значений y – D2:D7. В ячейках появятся вычисленные значения (см. рис. 9.5).



Такая процедура называется *Автозаполнением ячеек*.

Для расчетов в документах можно использовать и *смешанные ссылки*. Например, $=\$A1$ или $=A\$1$. Знак \$ не позволяет меняться параметру, перед которым он поставлен. Если знак поставлен перед названием строки, то не меняется номер строки, если перед столбцом, то не меняется название столбца.

Все диалоговые окна программы *Excel*, которые требуют указания номеров или диапазонов ячеек, содержат кнопки, присоединенные к соответствующим полям. При щелчке на такой кнопке диалоговое окно сворачивается до минимально возможного размера, что облегчает выбор нужной ячейки (диапазона) с помощью щелчка или протягивания.

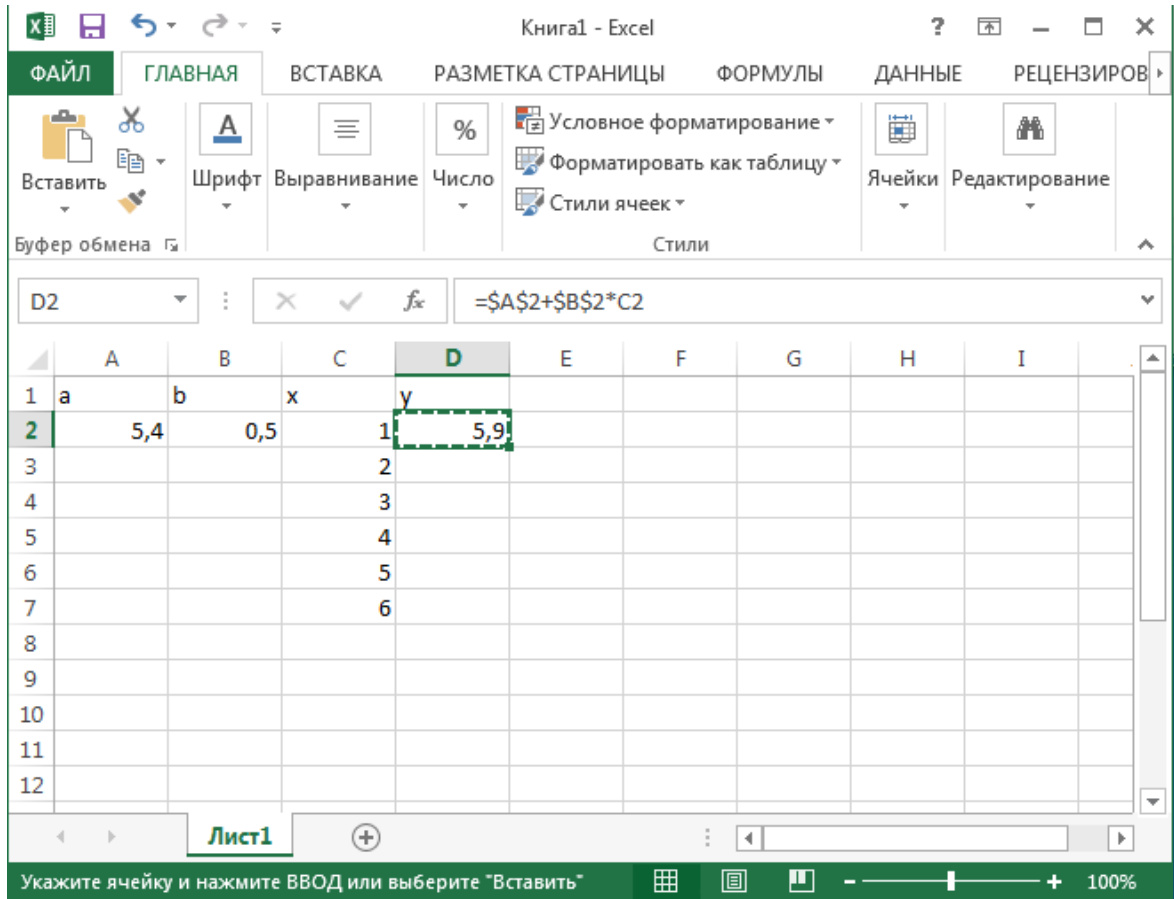


Рис. 9.4. Вычисления по формуле

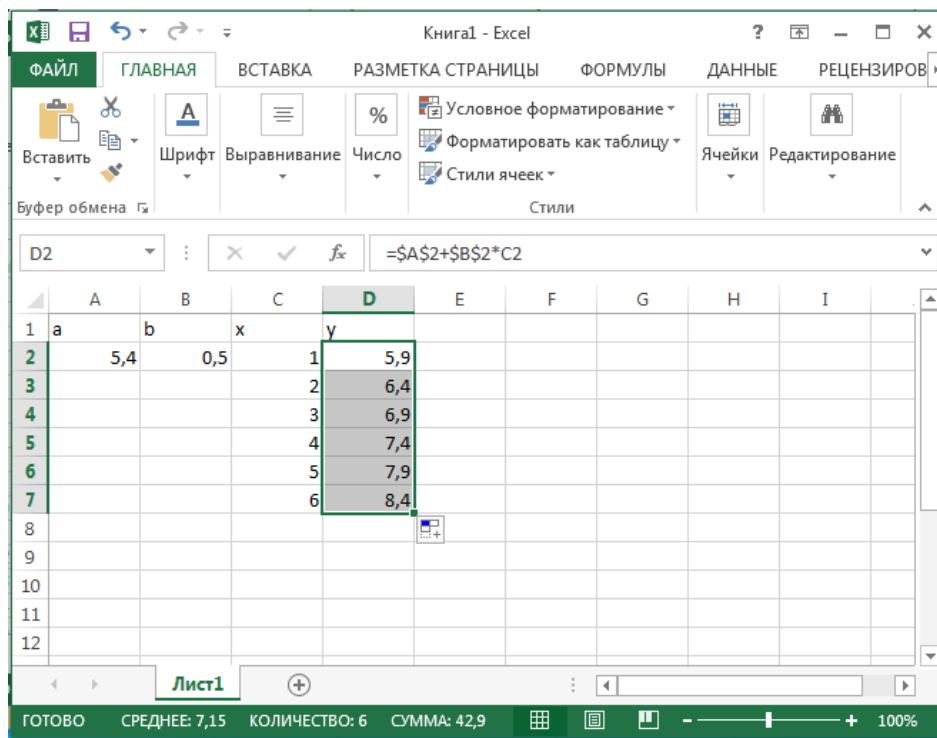


Рис. 9.5. Копирование формулы

Для редактирования формулы следует дважды щелкнуть на соответствующей ячейке. При этом ячейки (диапазоны), от которых зависит значение формулы, выделяются на рабочем листе цветными рамками, а сами ссылки отображаются в ячейке и в строке формул тем же цветом. Это облегчает редактирование и проверку правильности формул.

Копирование содержимого ячеек. Копирование и перемещение ячеек в программе *Excel* можно осуществлять методом перетаскивания или через буфер обмена. При работе с небольшим числом ячеек удобно использовать первый метод, при работе с большими диапазонами – второй.

Если необходимо скопировать численные значения, являющиеся результатами вычислений по формулам, то нужно выделить ячейки, в которых они помещены, скопировать в буфер, перенести курсор в ячейку, с которой будет начинаться копия, затем в меню **ГЛАВНАЯ** – Вставить (рис. 9.6) выбрать соответствующий режим, или перейти к меню **Специальная вставка** (рис. 9.7), отметить значения – **ОК**.

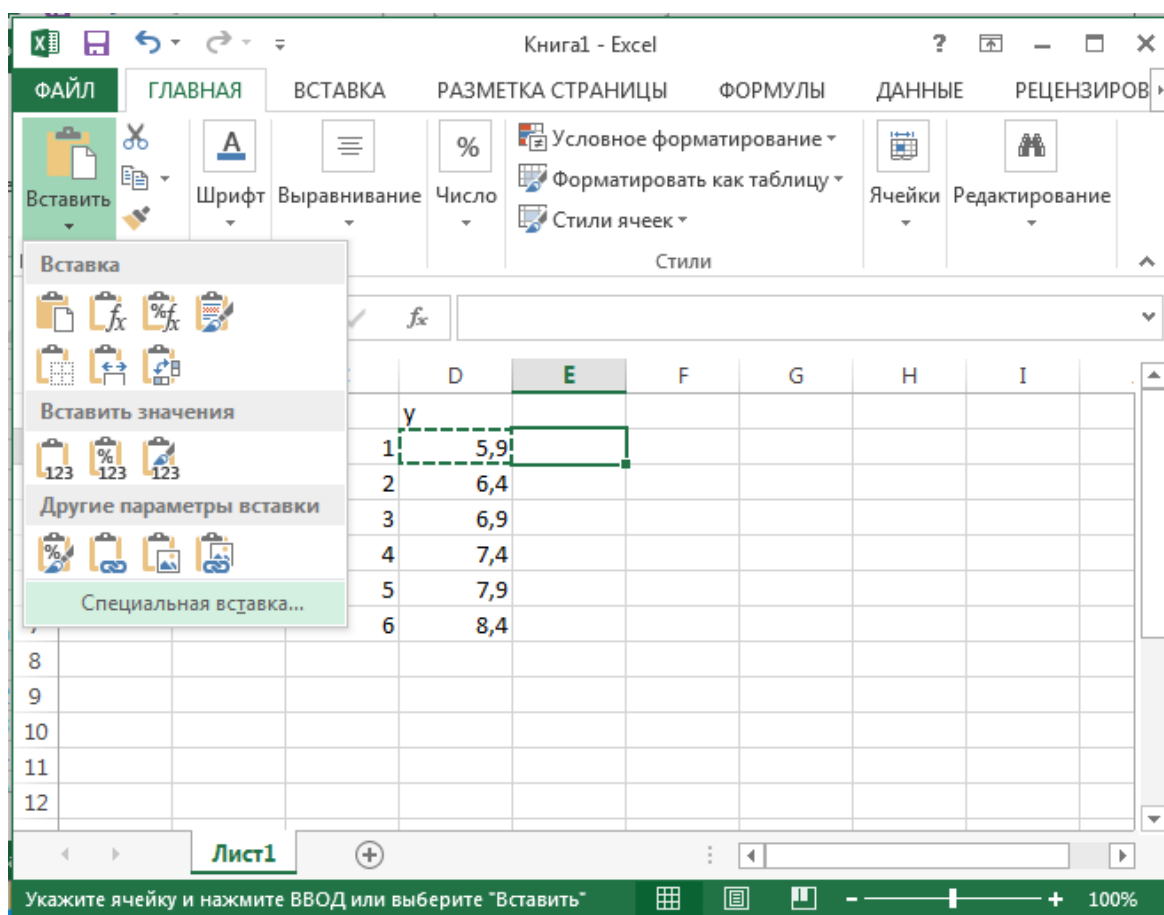


Рис. 9.6. Копирование содержимого ячеек

Использование стандартных функций. Стандартные функции используются в программе *Excel* только в формулах. *Вызов функции*

осуществляется путем указания в формуле *имени функции*, после которого в скобках указывается *список параметров*. Отдельные параметры разделяются в списке точкой с запятой. В качестве параметра может использоваться число, адрес ячейки или произвольное выражение, для вычисления которого также могут использоваться функции.

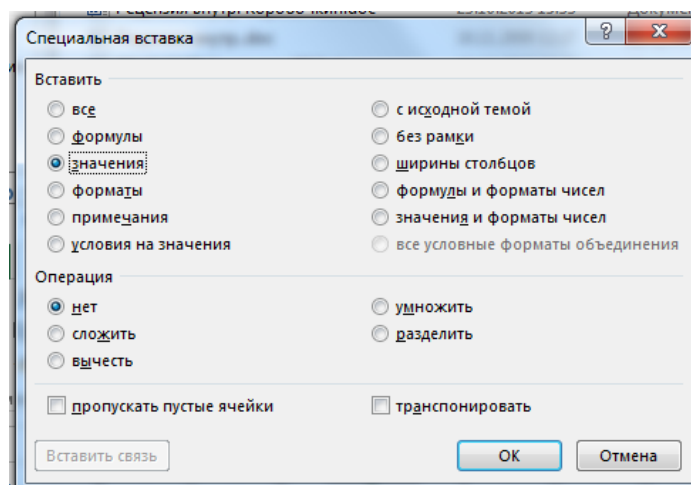


Рис. 9.7. Меню Специальная вставка

Например, чтобы сложить ячейки можно записать формулу: $=A1+B1+C1$, а можно воспользоваться функцией $=СУММ(A1:C1)$. Как наиболее используемая функция, Суммирование имеет на панели инструментов собственную кнопку « Σ ».

Использование мастера функций. Для запуска Мастера функций следует нажать кнопку « f_x » или воспользоваться меню **ФОРМУЛЫ** (рис. 9.8).

Если поставить знак « $=$ » в строку формул, то в окне слева можно открыть контекстное меню с десятью недавно использовавшимися функциями.

При выборе из списка данного меню последнего пункта *Другие функции* в окне *Категория* выбирается категория, к которой относится функция (если определить категорию затруднительно, используют пункт *Полный алфавитный перечень*), а в окне *Выберите функцию* – конкретная функция данной категории. После щелчка на кнопке **OK** имя функции заносится в строку формул вместе со скобками, ограничивающими список параметров. Текстовый курсор устанавливается между этими скобками.

После того, как выбрали функцию, появляется диалоговое окно для ввода аргументов функции. Аргументом может быть число, ячейка или диапазон ячеек. Для некоторых функций, например ABS или КОРЕНЬ, аргументом может быть только одно число или ячейка с числовыми данными. Для других функций, например СУММ, МАХ, МИН, аргументом может быть диапазон ячеек.

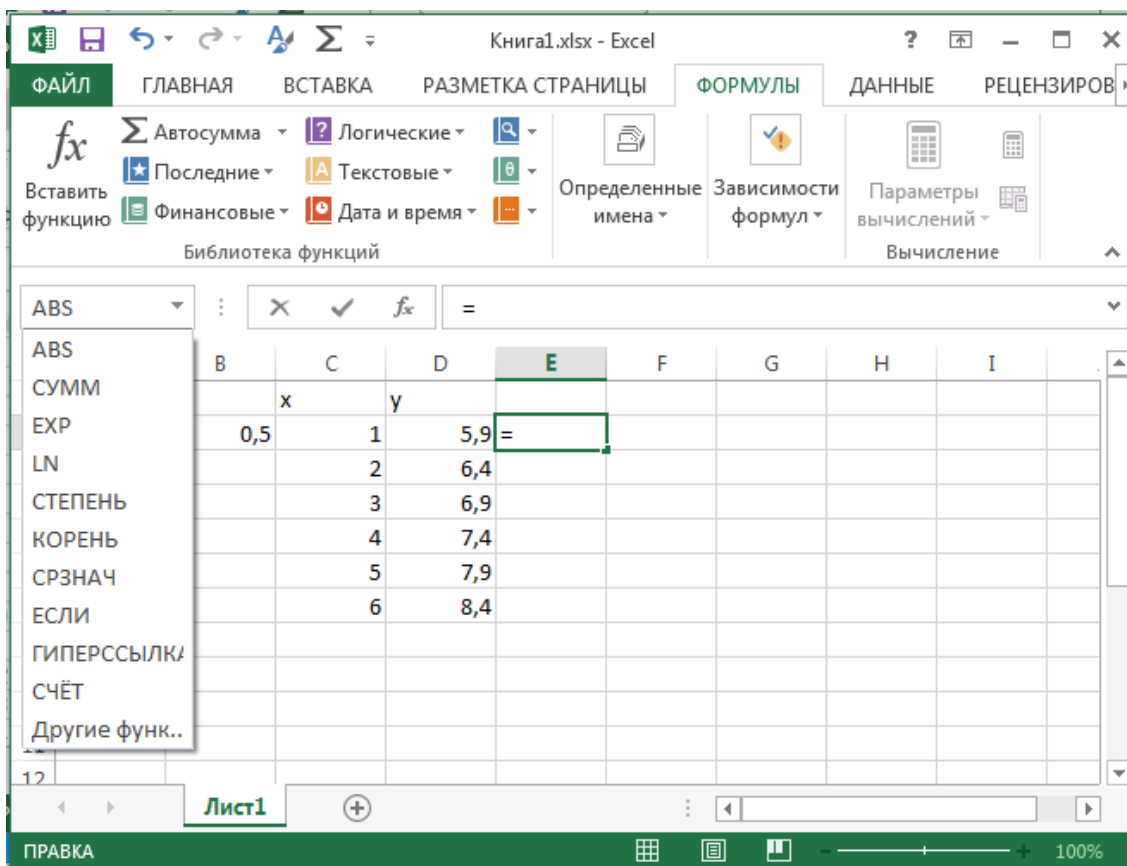


Рис. 9.8. Возможности меню ФОРМУЛЫ

Параметры можно вводить непосредственно в строку формул или в поля палитры формул, а если они являются ссылками – выбирать на рабочем листе. Если параметр задан, в палитре формул указывается его значение, а для упущенных параметров – значения, принятые по умолчанию. Здесь можно также увидеть значение функции, вычисленное при заданных значениях параметров (см. рис. 9.9).

Подбор параметров в EXCEL. Вычислительные возможности *Excel* позволяют решать как «прямые», так и «обратные» задачи. Выполнять исследование области допустимых значений аргументов, подбирать значение аргументов под заданное значение функции.

Для удобства пользования команду *Подбор параметра* следует вынести на панель инструментов. Делается это следующим образом: правой кнопкой мыши кликнуть в области панели инструментов, в появившемся диалоговом окне (рис. 9.10) во вкладке *Панель быстрого доступа* в настройках указать *Все команды*, из появившегося списка выбрать команду *Подбор параметра*, нажать клавиши *Добавить* и *ОК*. В панели инструментов быстрого доступа появится соответствующая иконка.

При запуске команды *Подбор параметра*, кликом левой кнопки мыши по иконке панели быстрого доступа, в диалоговом окне в поле *Зна-*

чение задается требуемое значение функции. В поле *Изменяя значение ячейки* указывается адрес ячейки, содержащей значение одного из аргументов функции. *Excel* решает обратную задачу: подбор значения аргумента для заданного значения функции. В случае успешного завершения подбора выводится окно, в котором указан результат – текущее значение функции для выбранного значения аргумента, новое значение аргумента функции содержится в соответствующей ячейке. *Пример решения нелинейного уравнения с использованием данной команды* приведен ниже (см. пример 9.4).

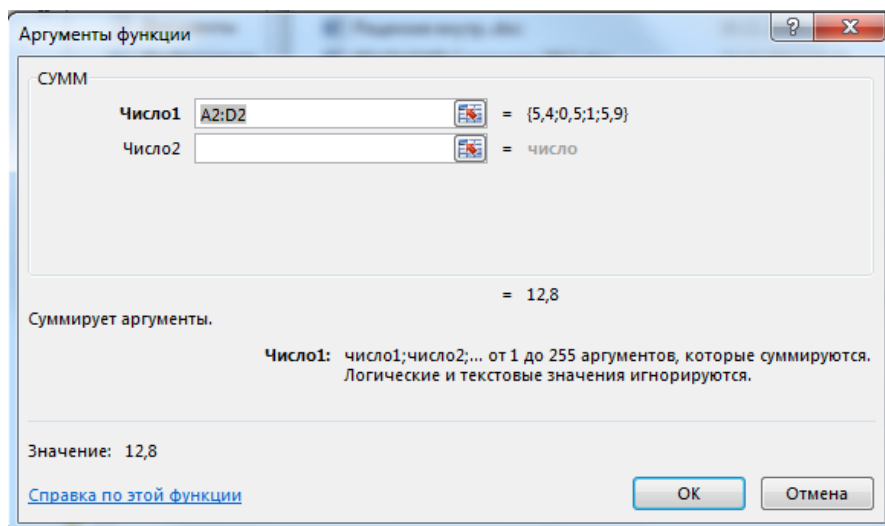
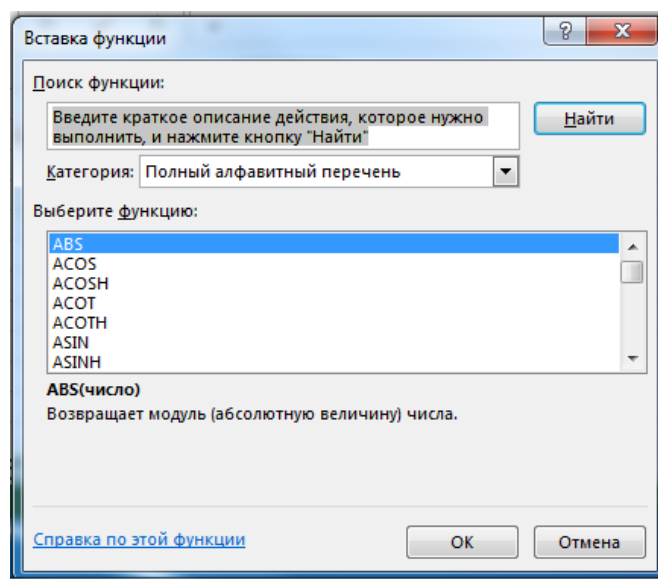


Рис. 9.9. Диалоговые окна меню *Вставка функции*

При нажатии кнопки *OK* выбранное значение аргумента сохраняется в ячейке аргумента, при нажатии кнопки *Отмена* происходит восстановление значения аргумента. При неуспешном завершении подбора

параметра выдается соответствующее сообщение о невозможности подбора аргументов.

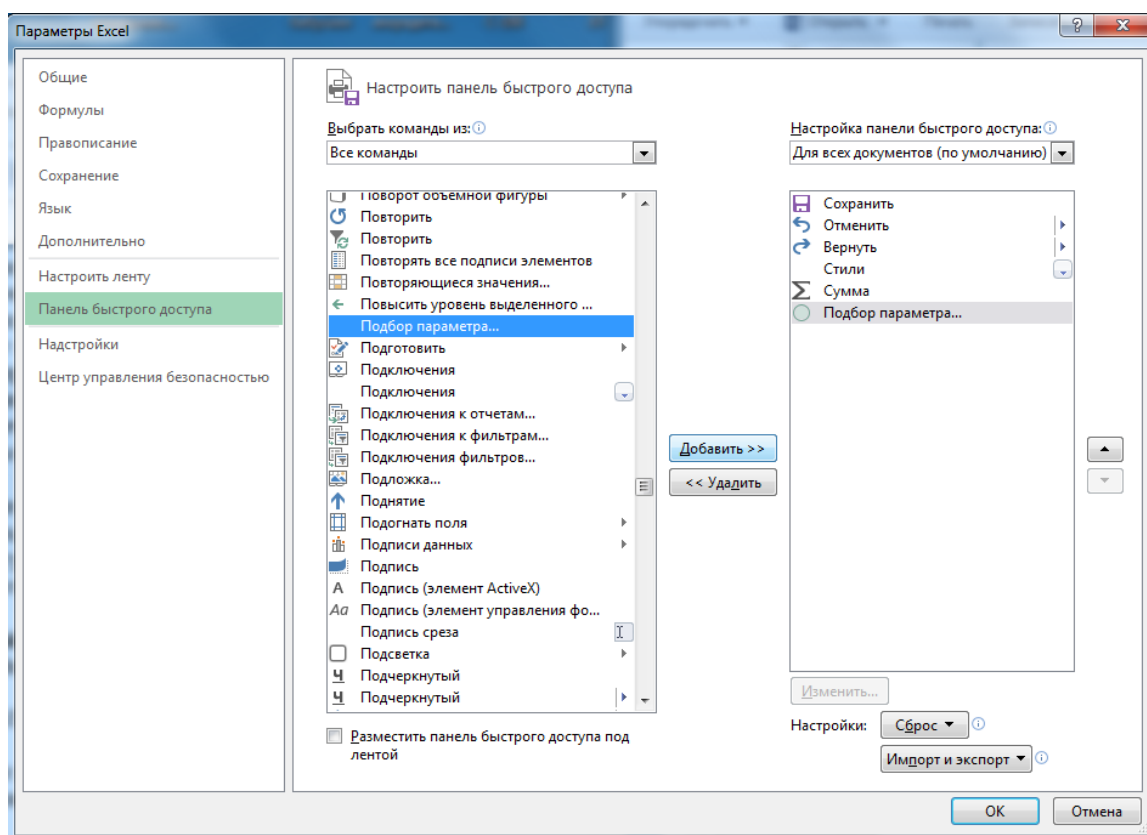


Рис. 9.10. Диалоговые окна меню Вставка функции

9.4. Печать документов Excel

Перед печатью рабочего листа следует предварительно посмотреть расположение информации на страницах. Для этого необходимо войти в меню *Вид* → *Режимы просмотра книги* → *Страничный режим* (рис. 9.11).

Предварительный просмотр не допускает редактирования документа, но позволяет увидеть его на экране точно в таком виде, в каком он будет напечатан.

Завершить работу в режиме предварительного просмотра можно перейдя в *Обычный режим*.

Чтобы распечатать просмотренный документ нужно войти в меню *ФАЙЛ* → *Печать*, выбрать принтер, указать параметры настройки, номера страниц, отправляемых на печать, или их диапазон, число копий (рис. 9.12). Окно настройки содержит стандартные средства управления, применяемые для печати документов в любых приложениях. После указания всех необходимых параметров следует нажать клавишу *Печать*.

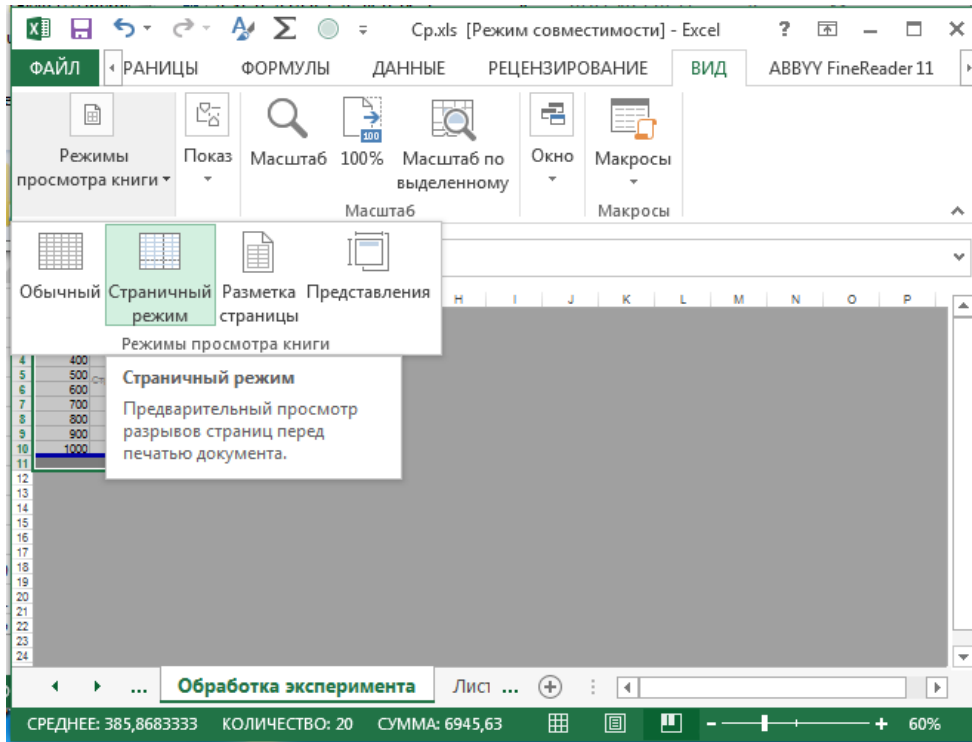


Рис. 9.11. Диалоговое окно перехода к страничному режиму

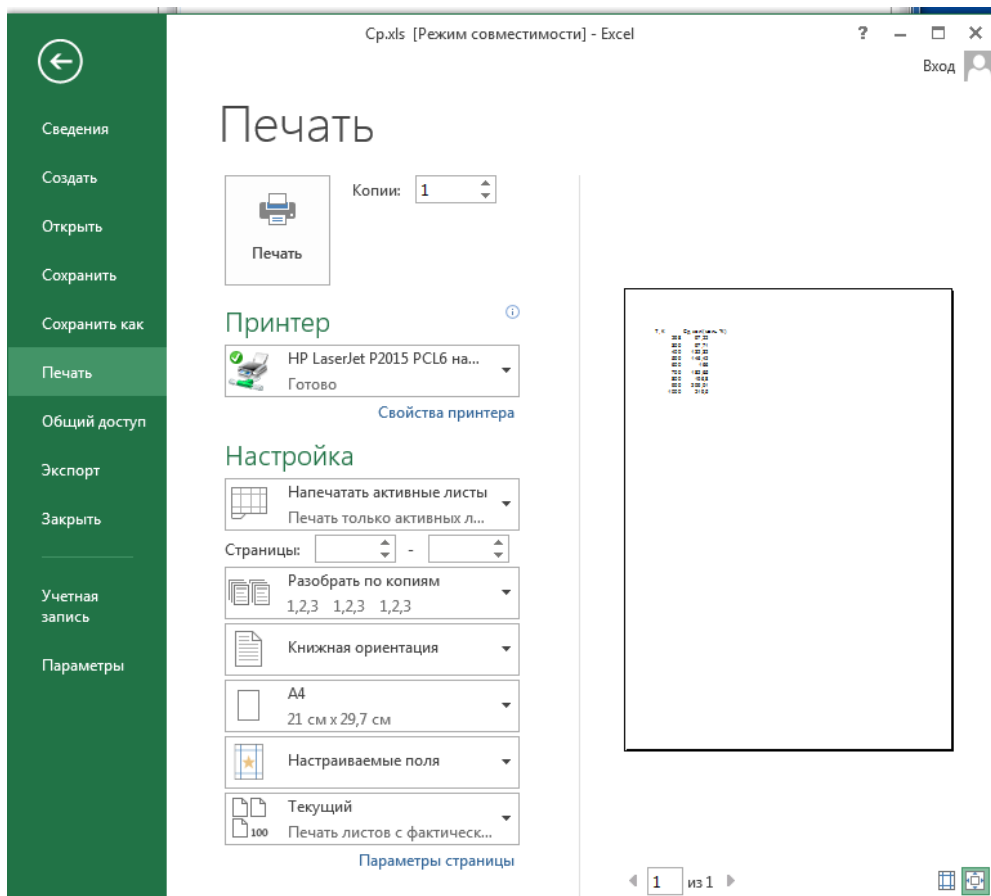


Рис. 9.12. Диалоговое окно меню Печать

9.5. Построение диаграмм и графиков

В программе *Excel* термин *диаграмма* используется для обозначения всех видов графического представления числовых данных. Построение графического изображения производится на основе *ряда данных*. Так называют группу ячеек с данными в пределах отдельной строки или столбца. На одной диаграмме можно отображать несколько рядов данных.

Следует отметить, что удобнее заранее выделить область ячеек, содержащую данные, которые будут отображаться на диаграмме. Далее воспользоваться меню *Вставка* → *Диаграммы* → *Рекомендуемые диаграммы* (рис. 9.13). Есть варианты выбора и других видов диаграмм, представленных на панели инструментов.

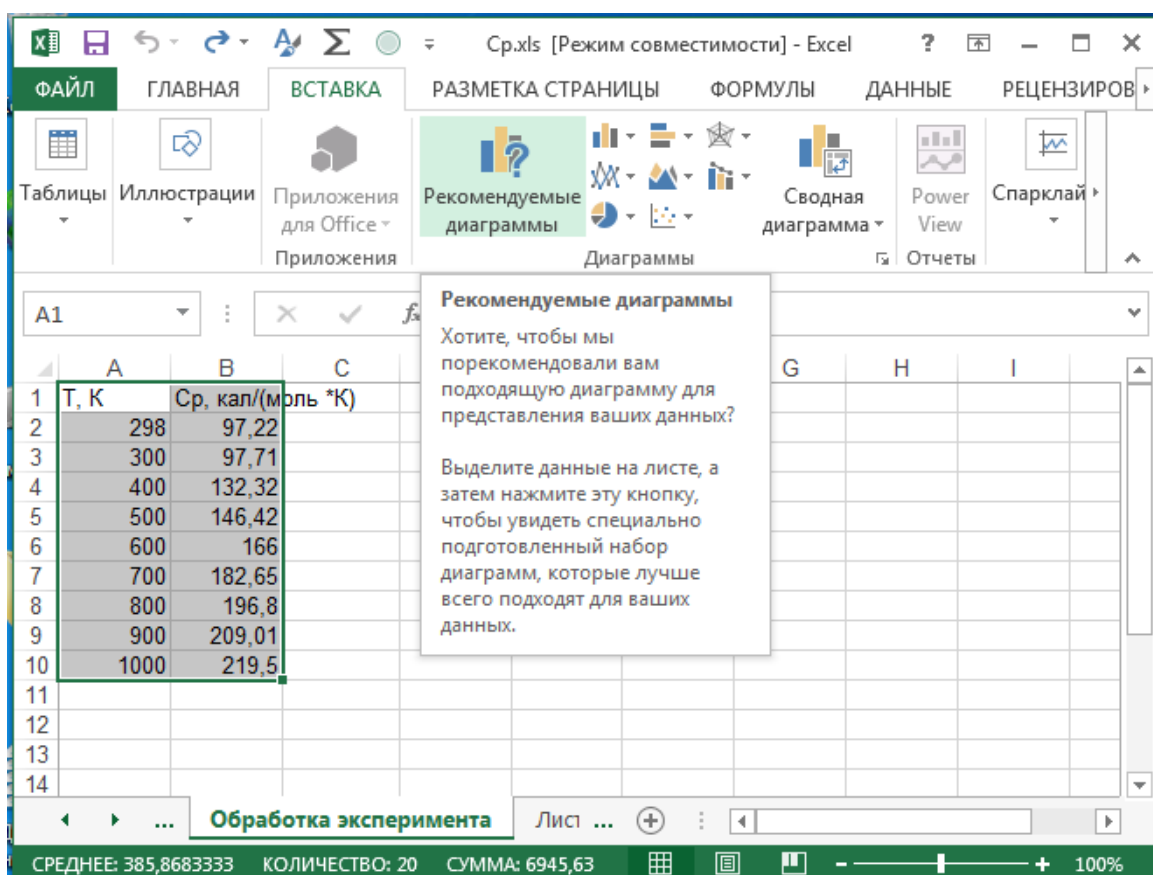


Рис. 9.13. Построение диаграмм

Если диапазон данных был выбран заранее и воспользовались вариантом *Рекомендуемые диаграммы*, то в области предварительного просмотра в правой части диалогового окна появится приблизительное отображение будущей диаграммы (рис. 9.14). Нажатием клавиши *ОК* выбранный тип диаграммы помещается на рабочий лист. Диаграмму

можно перемещать по полю рабочего листа. Предварительное представление диаграммы автоматически обновляется при изменении набора отображаемых данных.

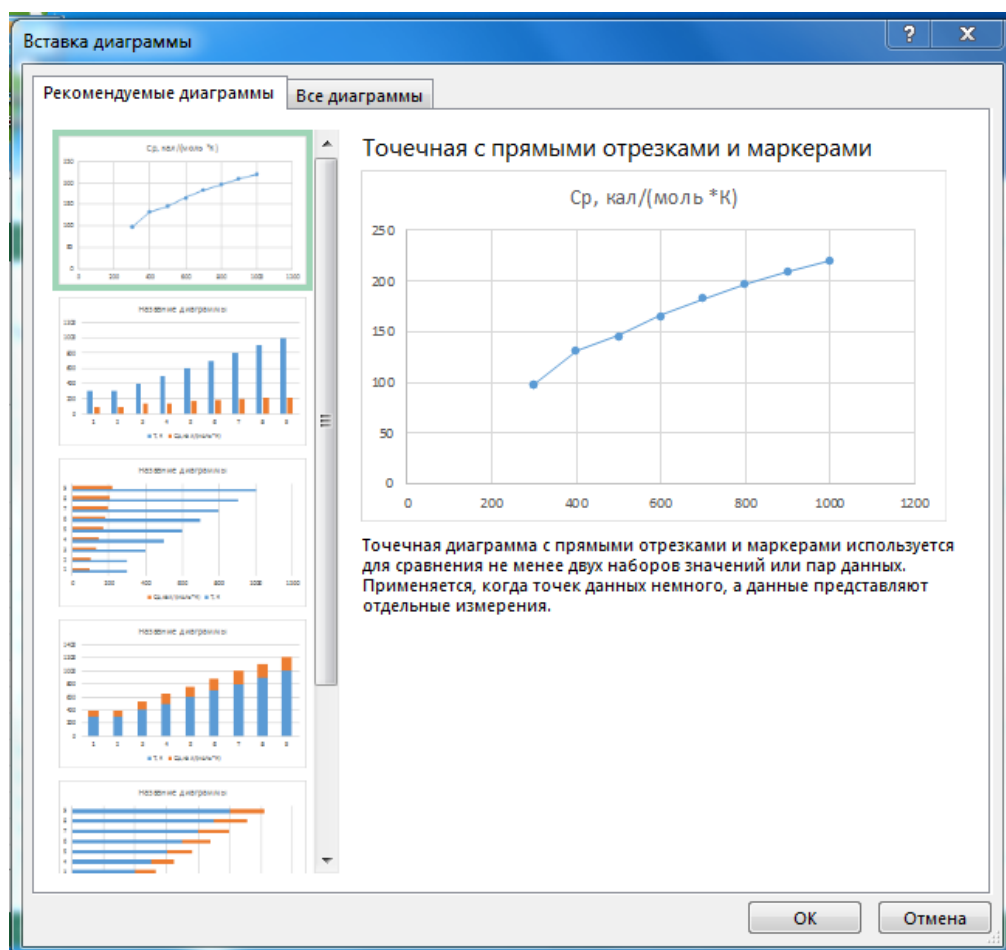


Рис. 9.14. Выбор вида диаграммы

С помощью меню **КОНСТРУКТОР** → **Добавить элемент диаграммы** можно выбрать и реализовать вариант оформления диаграммы (рис. 9.15). На вкладках вертикального меню задаются:

- отображение и маркировка осей координат (вкладка *Оси*);
- название осей;
- название диаграммы;
- отображение надписей, соответствующих отдельным элементам данных на графике (вкладка *Подписи данных*);
- представление данных, использованных при построении графика, в виде таблицы (вкладка *Таблица данных*).
- отображение на графике областей стандартной, относительной погрешностей, стандартного отклонения (вкладка *Предел погрешностей*);

- отображение сетки линий, параллельных осям координат (вкладка *Сетка*);
- описание построенных графиков (вкладка *Легенда*);
- построение аппроксимирующих зависимостей (вкладка *Линия тренда*);

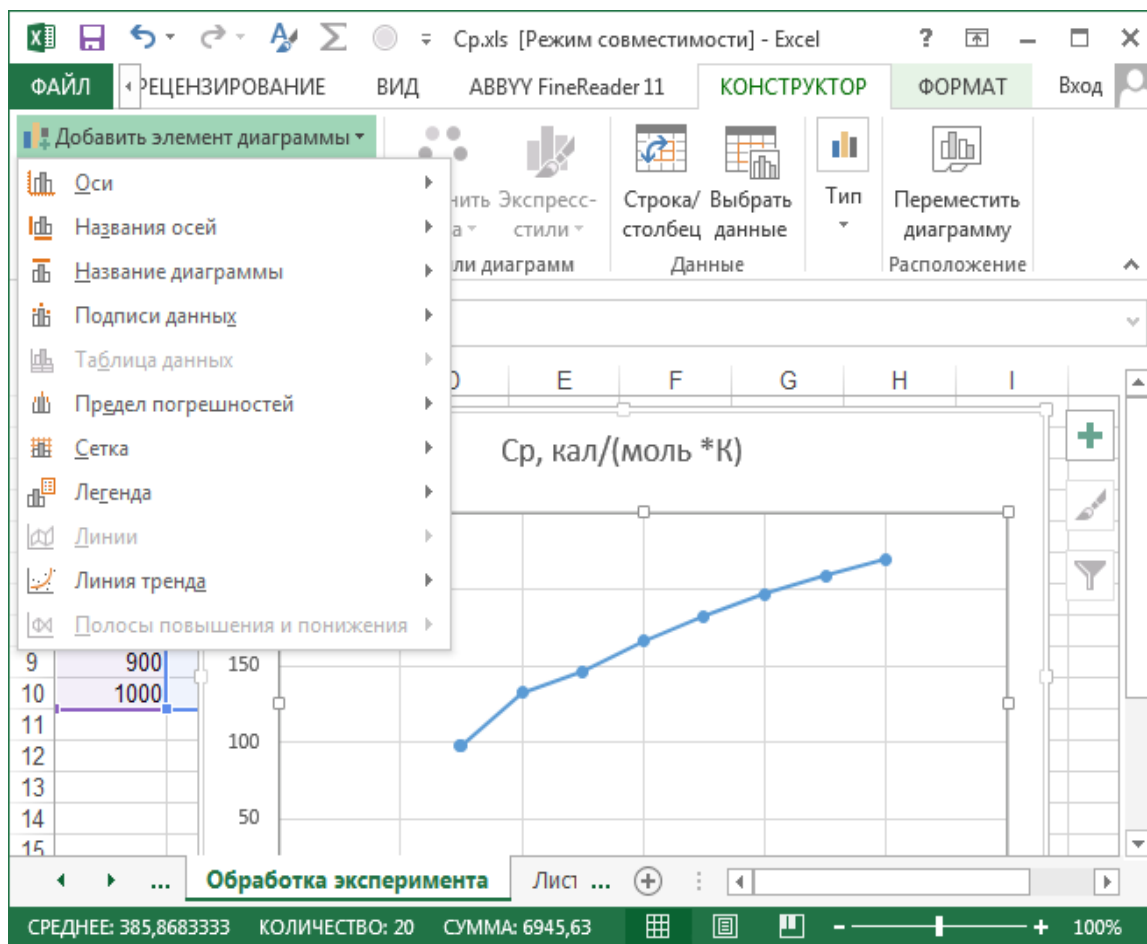


Рис. 9.15. Оформление диаграммы

В зависимости от типа диаграммы некоторые из перечисленных вкладок могут отсутствовать.

После реализации выбранного варианта оформления, готовую диаграмму (рис. 9.16) можно перемещать по полю листа, редактировать (изменять). Она состоит из набора отдельных элементов, таких как сами графики (ряды данных), оси координат, заголовок диаграммы, область построения и прочее. При щелчке на элементе диаграммы он выделяется маркерами, а при наведении на него указателя мыши – описывается всплывающей подсказкой.

Чтобы удалить диаграмму, нужно ее выделить щелчком левой клавиши мыши и нажать на клавиатуре клавишу *Delete*.

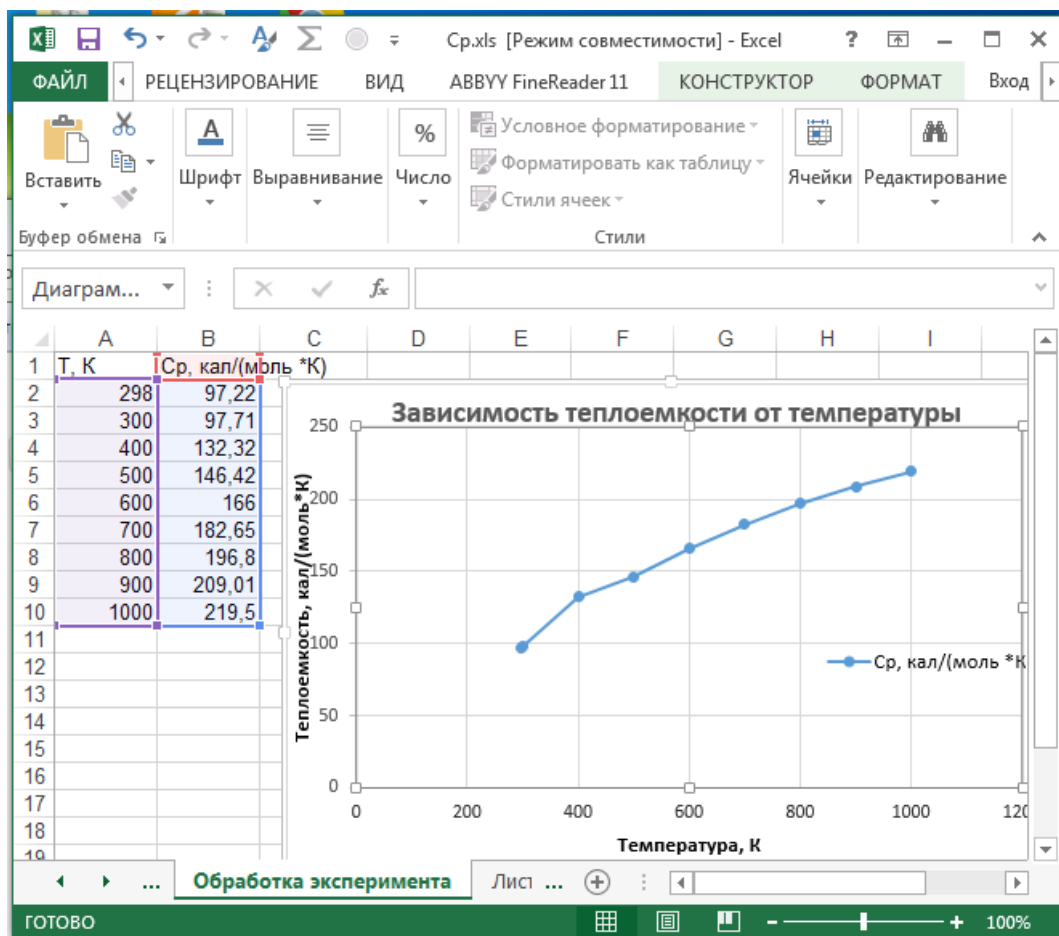


Рис. 9.16. Готовая диаграмма Excel

9.6. Примеры использования возможностей приложения Excel

Пример 9.1. Построить график зависимости теплоемкости компонента $C_{18}H_{36}$ от температуры. Значения теплоемкостей и соответствующие температуры приведены в табл. 9.1.

Таблица 9.1

Температура, К	300	400	500	600	700	800	900	1000
Теплоемкость, кал/(моль · К)	97,71	132,32	146,42	166,00	182,65	196,80	209,01	219,50

Последовательность выполнения операций:

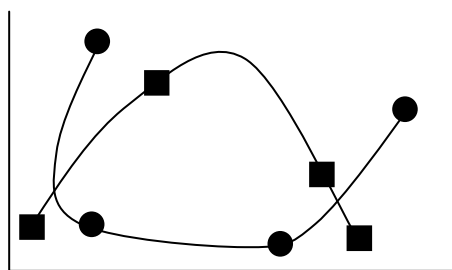
1. Запустите программу *Excel*.
2. Поставьте курсор в ячейку A1 и, пользуясь клавиатурой, приступите к набору табличных данных (вещественная часть отделяется запятой). В верхнюю строку помещается шапка таблицы, в левый столбец – значения аргумента.

Примечание: переход в ячейку *A2* и последующие ячейки осуществляется с помощью клавиши *Enter*; переход в начало следующего столбца (*B*, *C* и т. д.) – с помощью клавиши *Tab*. По области таблицы перемещаться можно также и с помощью мыши, нажатием левой кнопки, при этом выбранная ячейка становится активной.

3. Выделите данные, по которым строится график, следующим образом: переместите курсор с помощью мыши в ячейку *A1*; нажав на левую клавишу мыши обведите область, содержащую данные для построения графика, при этом область будет выделена контрастным цветом (кроме ячейки *A1*).

4. На верхней панели инструментов выберите раздел *ВСТАВКА – Рекомендуемые диаграммы* и откройте его.

5. Перейдите на вкладку *Все диаграммы* и выберите тип диаграммы: *Точечная – Точечная с гладкими кривыми и маркерами*, т. к. исходные данные содержат координаты точек:



6. Мышью нажмите клавишу *OK*, на поле листа рабочей книги будет помещена диаграмма, ее можно переместить, если она закрывает ячейки с данными.

7. Оформите диаграмму: добавьте название осей, легенду, измените название диаграммы (см. раздел 9.5).

8. Сохраните рабочую книгу в файл под именем, например, *Ср.xls*.

Пример 9.2. Выполнить аппроксимацию зависимости теплоемкости $C_{18}H_{36}$ от температуры (см. табл. 9.1).

Последовательность выполнения операций:

1. Запустите программу *Excel* и откройте рабочую книгу *Ср.xls*, созданную ранее.

2. На графике (экспериментальные данные табл. 9.1) выделите ряд данных щелчком мыши на экспериментальной точке.

3. На верхней панели откройте раздел *КОНСТРУКТОР* и подразделы – *Добавить элемент диаграммы – Линия тренда – Дополнительные параметры линии тренда*. На экране появится окно формата линии тренда (рис. 9.17).

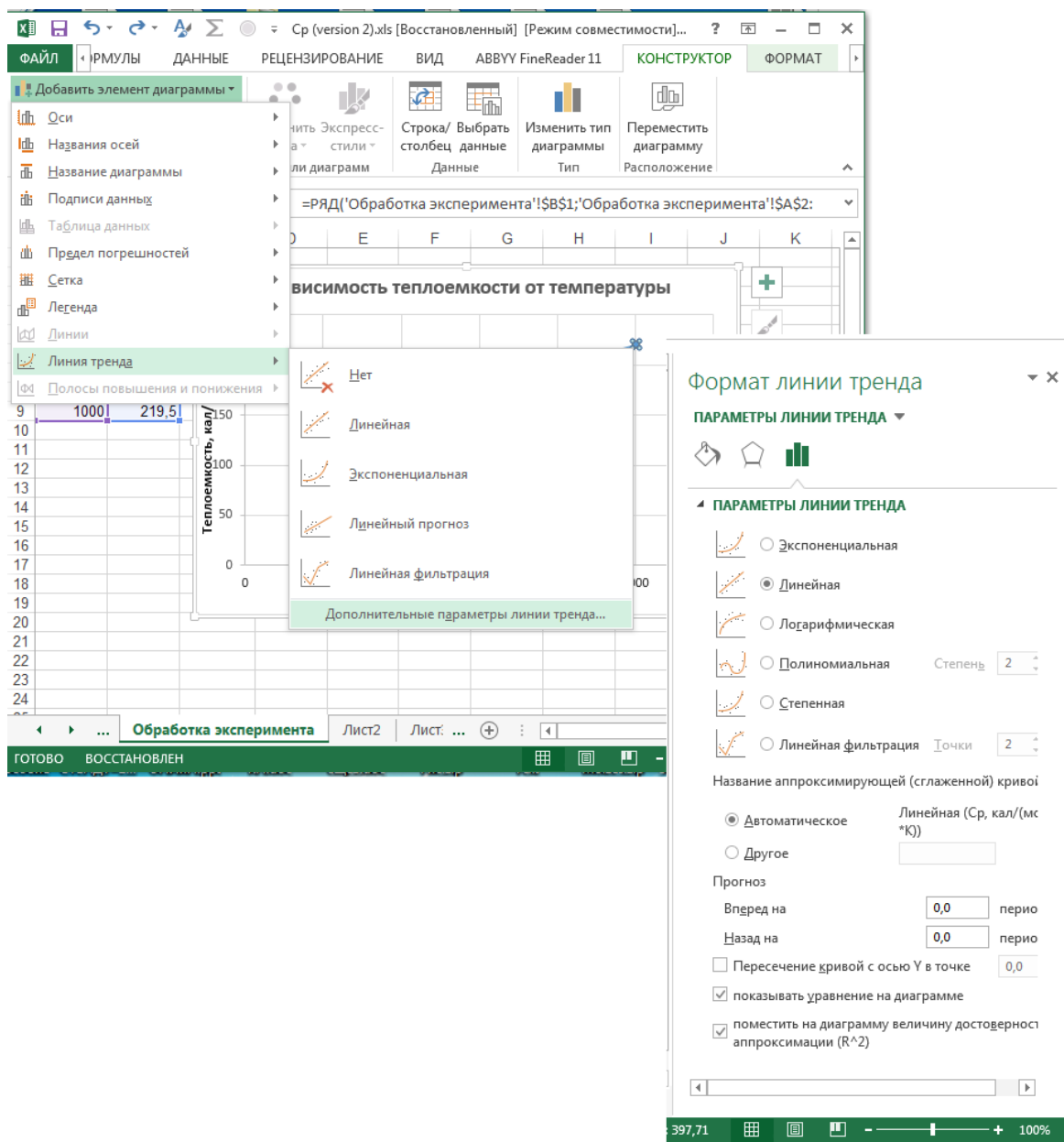



Рис. 9.17. Добавление линии тренда

В открывшемся окне выберите один из типов функции (линейная, логарифмическая, полиномиальная, степенная, экспоненциальная). Пометьте его щелчком мыши. В этом же окне отметьте строки:

- показывать уравнение на диаграмме;
- поместить на диаграмму величину достоверности аппроксимации (R^2).

Нажмите клавишу ОК.

Примечание: если необходимо построить несколько типов линий тренда, то на верхней панели нажмите клавишу со значком  (отменить) и укажите следующий тип линии.

Повторите последовательно пункты 2, 3 для всех указанных выше типов функции и зафиксируйте у себя в рабочей тетради полученные уравнения и соответствующие им величины достоверности аппроксимации.

4. По величине достоверности аппроксимации (R^2) определите, какой тип линии тренда дает наибольшую точность при обработке экспериментальных данных.

В результате обработки экспериментальных данных получены следующие зависимости:

- линейная $Y = (0,1671x + 60,176), R^2 = 0,9729;$
- логарифмическая $Y = (99,684\ln(x) - 469,83), R^2 = 0,9966;$
- полиномиальная 2-го порядка $Y = -0,0001x^2 + 0,3305x + 13,682, R^2 = 0,9949;$
- степенная $Y = 2,5858x^{0,6476}, R^2 = 0,9829;$
- экспоненциальная $Y = 82,05e^{0,0011x}, R^2 = 0,921,$

где R^2 – степень достоверности аппроксимации.

Анализ полученных зависимостей показывает, что наибольшая достоверность (значение R^2 близко к 1) наблюдается при использовании логарифмического уравнения и полинома 2-го порядка. Следовательно, эти уравнения можно эффективно использовать для описания экспериментальных данных.

Пример 9.3. Получить коэффициенты аппроксимирующих уравнений с использованием метода наименьших квадратов.

Для заданного набора пар значений независимой переменной (температура) и функции (теплоемкость) (табл. 9.1) определить линейное приближение в виде прямой $y = ax + b$ и показательное приближение в виде $y = b \cdot a^x$.

Последовательность выполнения операций:

1. Запустите программу *Excel* и откройте рабочую книгу *Ср.xls*, созданную ранее.

2. Сделайте ячейку *C1* текущей и выберите элементы меню **ФОРМУЛЫ – Вставить функцию** в строке формул. В раскрывшемся окне выберите категорию *Ссылки и массивы* и функцию **ИНДЕКС** (рис. 9.18). В новом диалоговом окне выберите первый вариант набора параметров (массив: номер строки; номер столбца).

4. Установите текстовый курсор в первое поле для ввода параметров в палитре формул и снова выберите пункт *Другие функции* в раскрываемом списке в строке формул.

5. С помощью Мастера функций выберите функцию **ЛИНЕЙН** категории *Статистические* (рис. 9.19).

6. В качестве первого параметра функции **ЛИНЕЙН** выберите диапазон, содержащий значения функции (массив *B2 : B9*, столбец *B*).

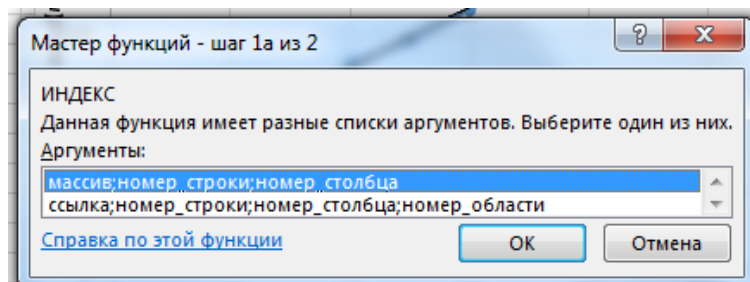
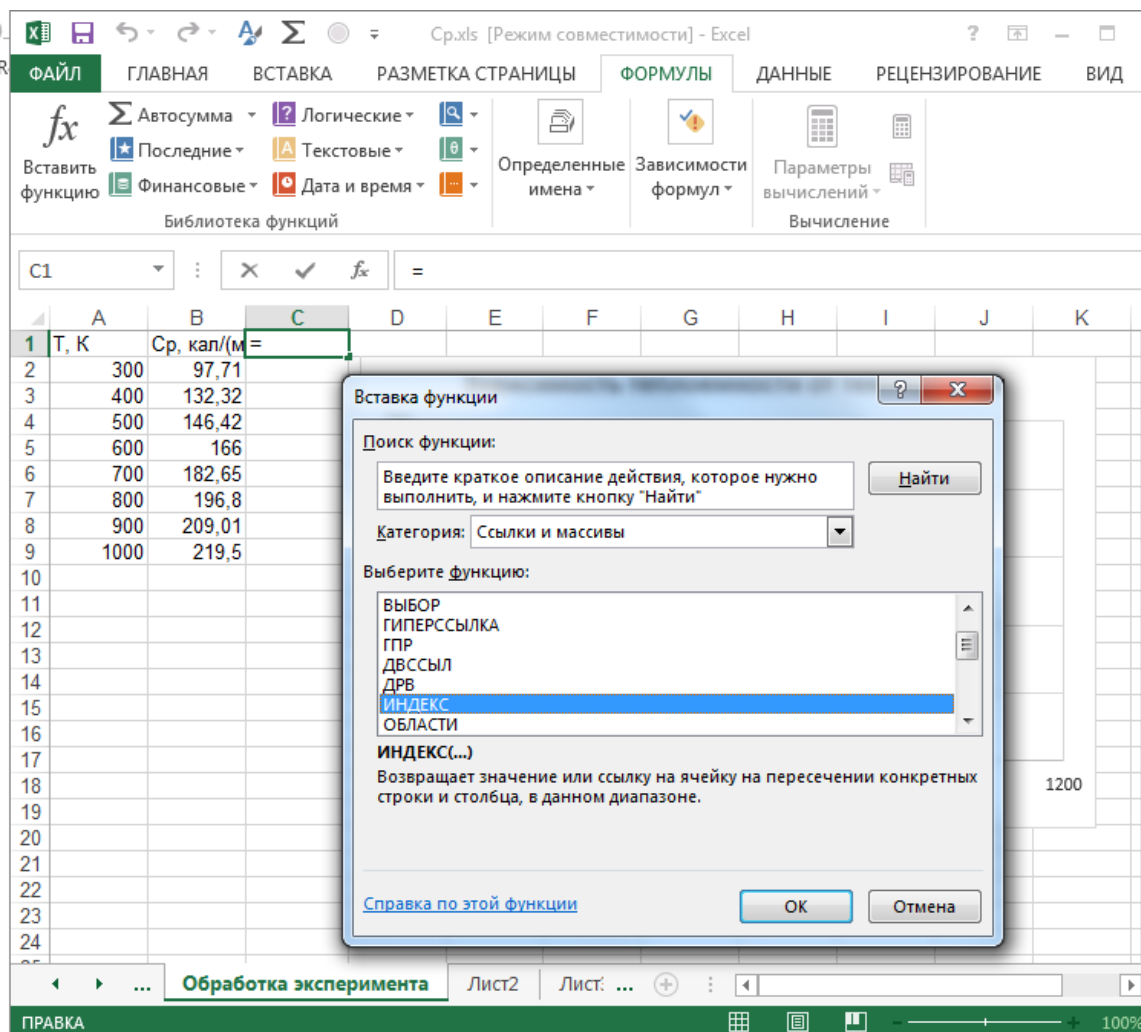


Рис. 9.18. Выбор функции ИНДЕКС

7. В качестве второго параметра функции *ЛИНЕЙН* выберите диапазон, содержащий значения независимой переменной (массив $A2 : A9$, столбец A).

8. Переместите текстовый курсор в строке формул так, чтобы он стоял на имени функции *ИНДЕКС*. В качестве второго параметра функции *ИНДЕКС* (номер строки) задайте число «1». Щелкните на кнопке *ОК* на палитре формул (рис. 9.20). Функция *ЛИНЕЙН* возвращает коэффициенты уравнения прямой в виде массива из двух элементов. С помощью функции *ИНДЕКС* выбирается нужный элемент.

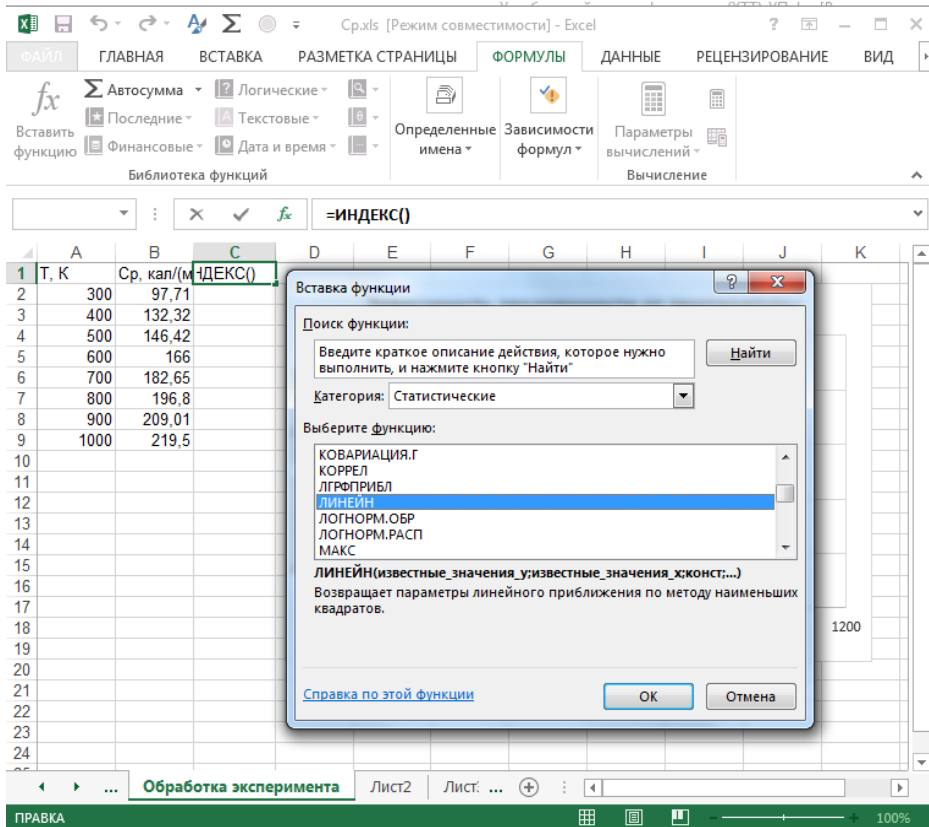


Рис. 9.19. Выбор функции ЛИНЕЙН

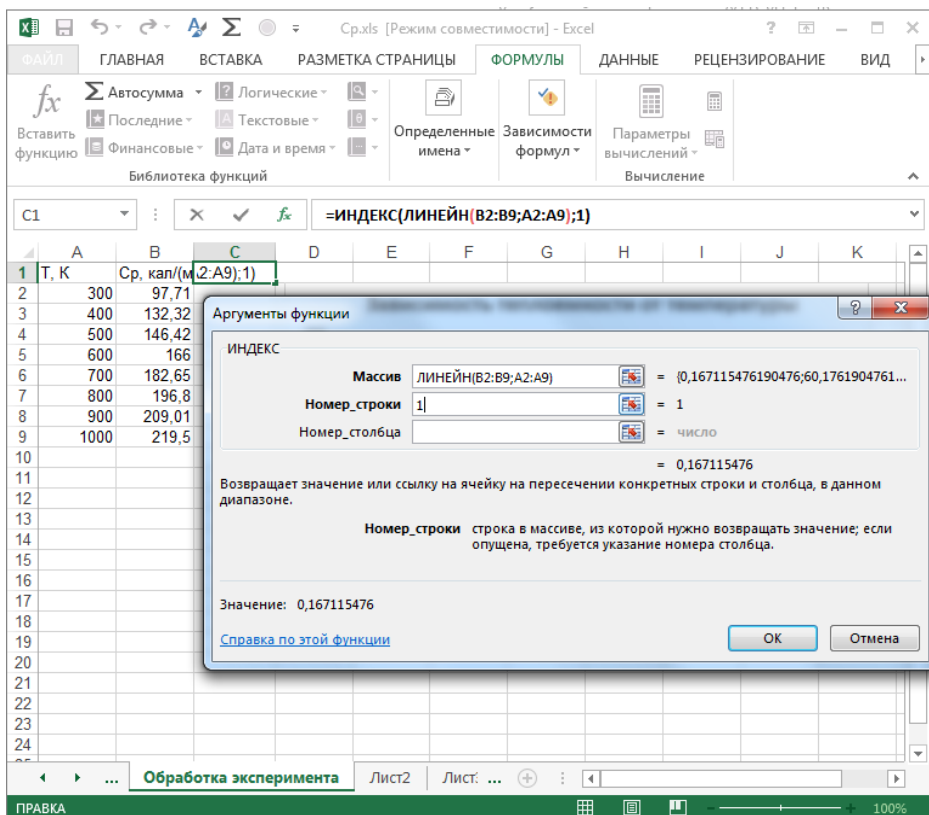


Рис. 9.20. Выбор аргументов функции ИНДЕКС

9. Сделайте текущей ячейку D1. Повторите операции, описанные в пп. 3–9, чтобы в итоге в этой ячейке появилась формула:

$$= \text{ИНДЕКС}(\text{ЛИНЕЙН}(B2:B9; A2:A9); 2).$$

Ее можно ввести и вручную (посимвольно). Теперь в ячейках C1 и D1 вычислены соответственно коэффициенты $a = 0,167115$ и $b = 60,17619$ уравнения прямой, наилучшим образом описывающей эксперимент (рис. 9.21).

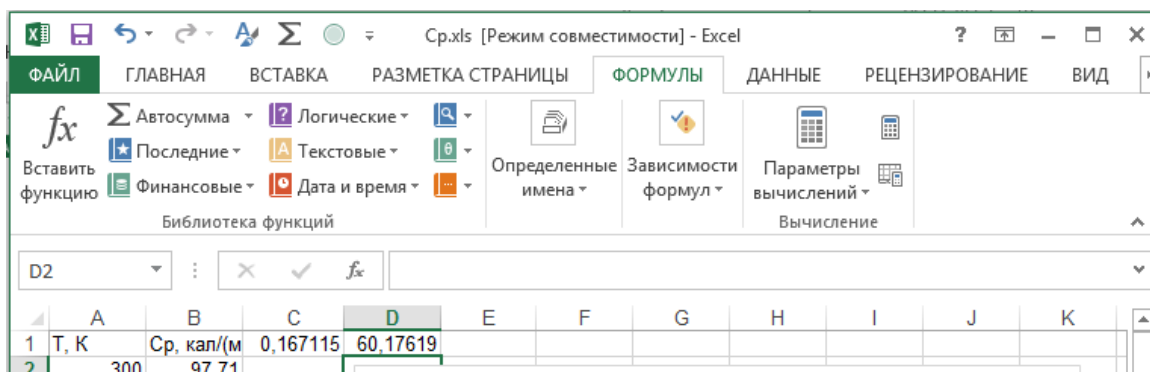


Рис. 9.21. Значения коэффициентов линейной аппроксимации

10. Активизируйте ячейку C2. Повторите операции, описанные в пп. 3–9, только вместо ЛИНЕЙН, следует выбрать функцию ЛГРФПРИБЛ или ввести вручную следующую формулу:

$$= \text{ИНДЕКС}(\text{ЛГРФПРИБЛ}(B2:B9; A2:A9); 1).$$

11. Активизируйте ячейку D2. Повторите операции, описанные в пп. 3–9, выбрав функцию ЛГРФПРИБЛ или введите вручную следующую формулу:

$$= \text{ИНДЕКС}(\text{ЛГРФПРИБЛ}(B2 : B9; A2 : A9); 2).$$

Теперь ячейки C2 и D2 содержат, соответственно, коэффициенты a и b уравнения наилучшего приближения показательной функции (рис. 9.22):

$$a = 1,001064, \quad b = 82,05022, \quad Cp = 82,05022 \cdot (1,001064)^T.$$

Примечание: для интерполяции или экстраполяции оптимальной кривой без явного определения ее параметров можно использовать функции ТЕНДЕНЦИЯ (для линейной зависимости) и РОСТ (для показательной зависимости), ссылаясь в окне Известные значения Y на диапазон (B2:B10), в окне Известные значения X на диапазон (A2:A10) и подставляя в окно Новые значения X численные значения аргумента.

12. Сохраните рабочую книгу.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	T, K	Ср. кал/м	0,167115	60,17619	Линейная	Показательная					
2	300	97,71	1,001064	82,05022	110,3108	112,8885					
3	400	132,32			127,0224	125,5567					
4	500	146,42			143,7339	139,6464					
5	600	166			160,4455	155,3173					
6	700	182,65			177,157	172,7468					
7	800	196,8			193,8686	192,1321					
8	900	209,01			210,5801	213,6928					
9	1000	219,5			227,2917	237,6731					
10											
11											

Рис. 9.22. Аппроксимация линейной и показательной функцией

Пример 9.4. Решение уравнений средствами Excel

Найти решение нелинейного уравнения $x^3 - 3x^2 + x = -1$.

Последовательность выполнения операций:

1. Запустите программу *Excel* и откройте рабочую книгу *Sr.xls*, созданную ранее.

2. Перейдите на новый рабочий лист, дважды щелкните на его ярлычке и присвойте ему имя *Уравнение*.

3. Поместите в ячейку *A1* значение «0».

4. Поместите в ячейку *B1* левую часть уравнения, используя в качестве независимой переменной ссылку на ячейку *A1*. Соответствующая формула будет иметь вид: =СТЕПЕНЬ(A1;3)-3*СТЕПЕНЬ(A1;2)+A1.

5. Выполните команду **ДАННЫЕ** ► **Анализ «что если»** ► **Подбор параметра**.

6. В поле **Установить в ячейке** укажите *B1*, в поле **Значение задайте** «-1», в поле **Изменяя значение ячейки** укажите *A1* (рис. 9.23).

7. Щелкните на кнопке **ОК** и посмотрите на результат подбора, отображаемый в диалоговом окне **Результат подбора параметра**. Щелкните на кнопке **ОК**, чтобы сохранить полученные значения ячеек, участвовавших в операции (рис. 9.24).

8. Повторите расчет, задавая в ячейке *A1* другие начальные значения, например «0,5» или «2». Проверьте, совпали ли результаты вычислений. Чем можно объяснить различия?

9. Сохраните рабочую книгу *Sr.xls*.

Таким образом, вы научились решать с помощью программы *Excel* уравнения, содержащие одно неизвестное и задаваемые формулой. Вы-

яснили, что при наличии нескольких корней результат решения уравнения будет зависеть от выбора начального приближения.

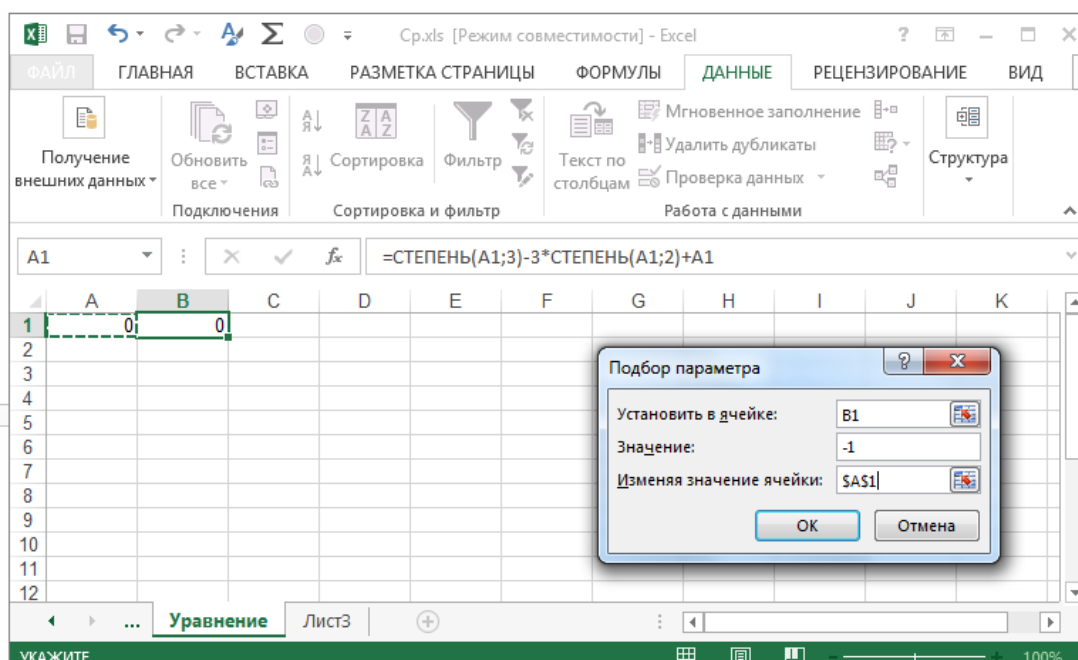


Рис. 9.23. Выполнение команды Подбор параметра

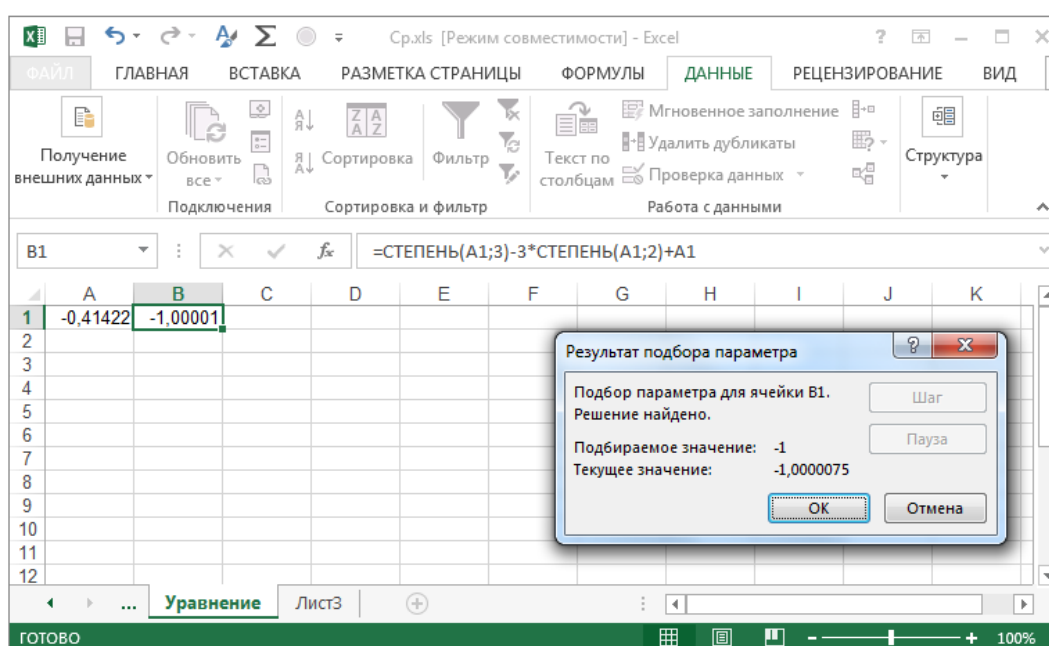


Рис. 9.24. Выполнение команды Подбор параметра

Пример 9.5. Рассчитать значения констант скорости химической реакции при различных температурах, используя уравнение Аррениуса:

$$k = k_0 \cdot e^{-E/RT},$$

где k_0 – предэкспоненциальный множитель ($k_0 = 4,802 \cdot 10^7$); E – энергия активации, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ ($E = 9,305 \cdot 10^4 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$); R – газовая постоянная, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ ($R = 8,314 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$); T – температура, К (550, 560, 570, 580, 590, 600 К).

Последовательность выполнения операций:

1. Запустите программу *Excel* и откройте рабочую книгу *Ср.xls*, созданную ранее.

2. Создайте новый рабочий лист.

3. Поместите в ячейку *A1* обозначение « k_0 », а в ячейку *A2* – соответствующее значение, в ячейки *B1* и *C1* – обозначения « E » и « R », а в ячейки *B2* и *C2* – соответствующие значения, в ячейку *D1* – обозначение « T », а в ячейки *D2*, *D3*, *D4*, *D5*, *D6*, *D7* – соответствующие значения температуры, в ячейку *E1* поместите обозначение « k » (рис. 9.25).

4. Сделайте ячейку *E2* текущей и внесите знак « $=$ »; далее мышью выполните ссылку на ячейку *A2* и добавьте знак « $*$ », с помощью *Мастера функций* вызовите стандартную функцию *EXP*, в окне «Число» палитры формул наберите выражение аргумента ($-E/RT$), с помощью ссылок на соответствующие ячейки. В строке формул появится выражение: $=A2*EXP(-B2/(C2*D2))$ (рис. 9.25). После щелчка на кнопке *OK* в ячейке *E2* появится вычисленное при температуре 550 К значение константы скорости химической реакции – 0,070077.

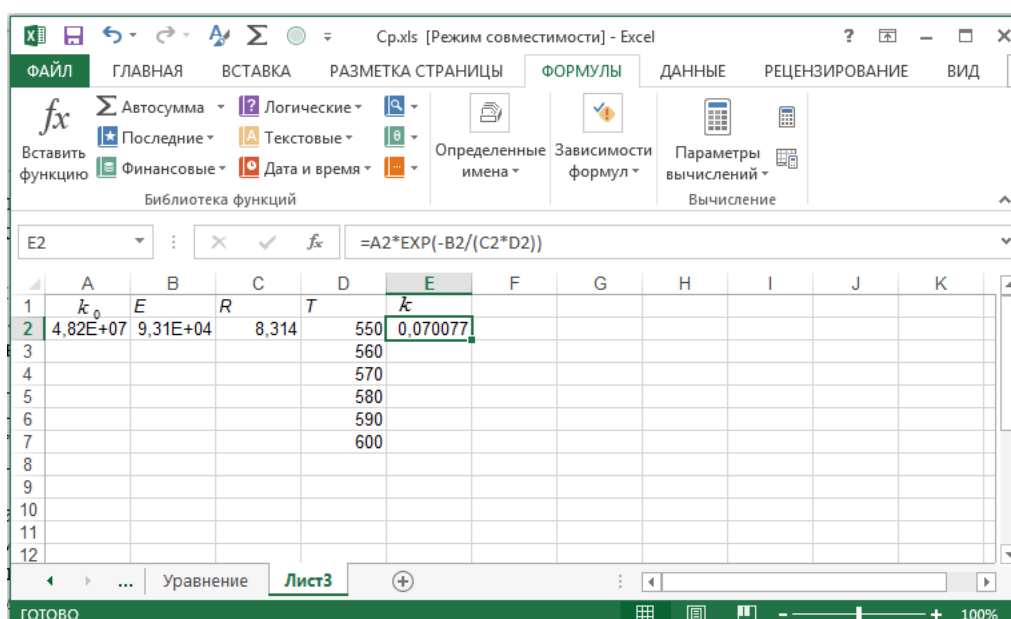


Рис. 9.25

Для того чтобы выполнить расчеты по данной формуле при других значениях температуры, сделаем ссылки на ячейки, содержащие значения k_0 , E и R абсолютными, т. е. введем в адреса ячеек $A2$, $B2$ и $C2$ в строке формул символ «\$»: $=\$A\$2*EXP(-\$B\$2/(\$C\$2*D2))$ и выполним расчет по отредактированной формуле. Результат останется прежним.

5. Вновь сделаем активной ячейку $E2$. Поймаем мышью крестик в правом нижнем углу ячейки и протянем его вниз по ячейку $E7$ включительно. В столбце E появятся результаты (рис. 9.26).

Таким образом, вы научились с помощью программы *Excel* выполнять расчеты по введенной с помощью Мастера формул зависимости для диапазона данных.

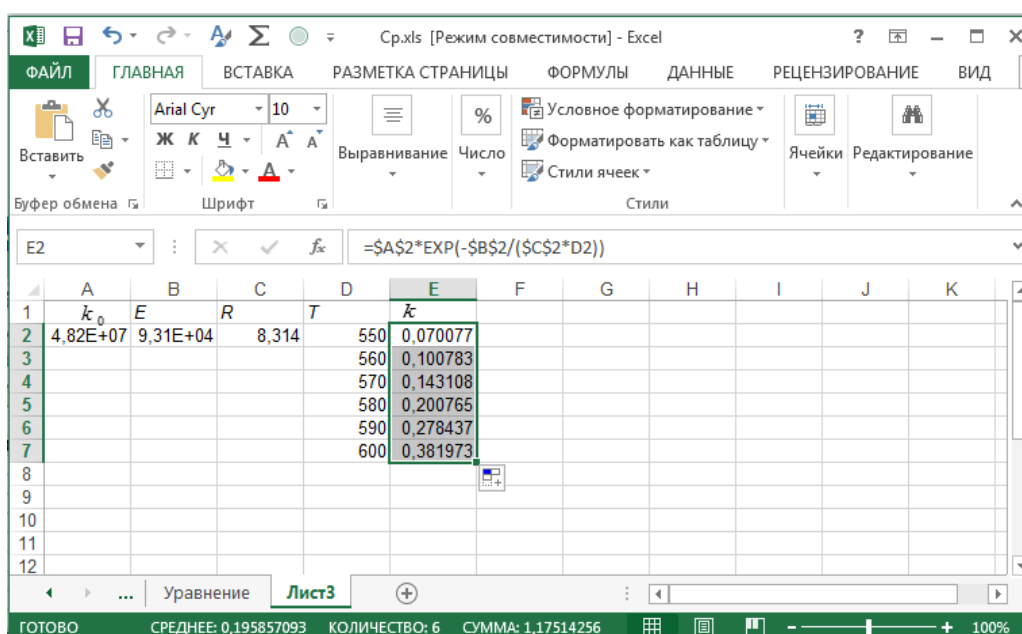


Рис. 9.26

Пример 9.6. Состав газовой смеси представлен в объемных процентах (см. таблицу). Выполнить пересчет состава в массовых долях. Определить среднюю молекулярную массу смеси.

Компонент	N_2	CO_2	CH_4	C_2H_6	C_3H_8	$i-C_4H_{10}$	$n-C_4H_{10}$	$i-C_5H_{12}$	$n-C_5H_{12}$
Содержание, об. %	1,15	3,98	79,21	9,86	4,68	0,59	0,46	0,04	0,02

При разработке алгоритма расчета данной задачи следует помнить, что один моль идеального газа, независимо от его состава, занимает 22,4 л, поэтому объемные проценты соответствуют мольным. Для пересчета, кроме данных по составу, необходимы значения молекулярных

масс компонентов. Средняя молекулярная масса смеси рассчитывается по формуле

$$C_pMM = \sum_i \frac{C_{i\text{ об}} \cdot MM_i}{100},$$

где $C_{i\text{ об}}$ – процент объемный i -го компонента; MM_i – молекулярная масса i -го компонента.

Пересчет состава смеси в массовые проценты выполняется по формуле

$$C_{i\text{ масс}} = \frac{C_{i\text{ об}} \cdot MM_i}{C_pMM} \cdot 100.$$

Последовательность выполнения операций:

1. Запустите программу *Excel* (Пуск ► Программы ► *Microsoft Excel*) и откройте рабочую книгу *Sr.xls*, созданную ранее.

2. Перейдите на новый рабочий лист, дважды щелкните на его ярлычке и присвойте ему имя *Пересчет*.

3. На рабочем листе *Пересчет* в первой строке введите обозначения столбцов: в ячейке *A1* – «Компоненты», в ячейке *B1* – «% об», в ячейке *C1* – «MM» (молекулярная масса), в ячейке *D1* – «масса» (масса компонента в 1 моле смеси), и в ячейке *E1* – «% масс».

4. В диапазон *A2:A10* поместите обозначения компонентов, в диапазон *B2:B10* – соответствующие значения концентраций, в диапазон *C2:C10* – соответствующие молекулярные массы.

5. Для проверки правильности введения значений концентраций выделим диапазон *B2:B10* и щелкнем кнопкой « Σ » на панели инструментов. В ячейке *B11* появится значение, которое должно соответствовать 100. В соседней ячейке *A11* введем комментарий «Сумма».

6. Сделаем активной ячейку *D2*. С помощью ссылок на ячейки *B2* и *C2* введем запись: $=B2*C2/100$. В ячейке *D2* появится рассчитанное значение. Поймаем мышью крестик в правом нижнем углу ячейки *D2* и протянем его вниз по ячейку *D10* включительно. В ячейках выделенного диапазона появятся соответствующие каждому компоненту рассчитанные значения массы в одном моле смеси. Щелкнем кнопкой « Σ » на панели инструментов, и в ячейке *D11* появится сумма масс компонентов одного моля смеси, т. е. средняя молекулярная масса смеси. В соседнюю ячейку *C11* введем комментарий « C_pMM » (см. рис. 9.27).

7. Активизируем ячейку *E2*. С помощью ссылок на ячейки *B2*, *C2* и абсолютной ссылки на ячейку *D11* введем запись $=B2*C2/\$D\11 . В ячейке *E2* появится рассчитанное значение концентрации компонента N_2 в массовых процентах. Поймаем мышью крестик в правом нижнем

углу ячейки $E2$ и протянем его вниз по ячейку $E10$ включительно. В ячейках выделенного диапазона появятся соответствующие каждому компоненту рассчитанные значения концентраций в массовых процентах. Щелчком кнопкой « Σ » на панели инструментов, и в ячейке $E11$ появится сумма, которая должна соответствовать 100.

Таким образом, вы закрепили навыки работы с электронными таблицами *Excel*, лучше освоили работу с диапазонами данных и ссылками, освоили функцию суммирования, вынесенную на панель инструментов.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Компоненты	% об.	М.М.	масса	% масс.						
2	N ₂	1,15	28	0,322	1,576828						
3	CO ₂	3,978	44	1,75032	8,571286						
4	CH ₄	79,212	16	12,67392	62,06396						
5	C ₂ H ₆	9,86	30	2,958	14,48527						
6	C ₃ H ₈	4,687	44	2,06228	10,09895						
7	i-C ₄ H ₁₀	0,594	58	0,34452	1,687108						
8	n-C ₄ H ₁₀	0,457	58	0,26506	1,297994						
9	i-C ₅ H ₁₂	0,043	72	0,03096	0,151611						
10	n-C ₅ H ₁₂	0,019	72	0,01368	0,066991						
11	Сумма	100	СрММ=	20,42074	100						
12											

Рис. 9.27

Пример 9.7. Построить таблицу конечных разностей зависимости теплоемкости компонента $C_{18}H_{36}$ от температуры в диапазоне 300–1000 К для интерполирования по формулам Ньютона. Значения теплоемкостей при соответствующих температурах приведены в табл. 9.1. Результаты оформить в виде таблицы.

1. Запустите программу *Excel* и откройте рабочую книгу *Ср.xls*, созданную ранее.
2. Создайте новый рабочий лист, дважды щелкните на его ярлычке и присвойте ему имя **Конечные разности**.
3. В ячейку $A1$ впишите: «Таблица конечных разностей для интерполирования по формулам Ньютона», в ячейку $A2$ – «№», в ячейку $B2$ – «Табличные значения», в ячейку $D2$ – «Конечные разности».
4. Щелчком на ярлычке выберите рабочий лист **Обработка эксперимента**, Выделите диапазон $A1:B9$, скопируйте его в буфер.

5. Перейдите на рабочий лист *Конечные разности*, щелчком мыши сделайте активной ячейку *B3* и вставьте из буфера скопированные на листе *Обработка эксперимента* табличные данные температур и соответствующих значений теплоемкости. Данные расположатся в диапазоне *B3:C11*.

6. Теперь рассчитаем столбец первых конечных разностей ($\Delta C_{pi}^1 = C_{pi+1} - C_{pi}$). Для этого активизируйте ячейку *D4* и, пользуясь ссылками на адреса ячеек, введите формулу: «=C5-C4». В ячейке *D4* появится соответствующее значение конечной разности. Чтобы рассчитать все конечные разности первого порядка, сделайте активной вновь ячейку *D4*, поймите крестик в правом нижнем углу и протяните его вниз по ячейку *D10* включительно. В выделенном диапазоне появятся рассчитанные значения первых конечных разностей.

8. Для расчета столбца вторых конечных разностей ($\Delta C_{pi}^2 = C_{pi+1}^1 - C_{pi}^1$) выполните аналогичную процедуру, только переместитесь на столбец вправо, активной ячейкой первоначально сделайте *E4*, а завершение расчета выполните соответственно в ячейке *E9*. При расчете каждого последующего порядка конечных разностей их количество уменьшается на единицу.

9. Перемещаясь на столбец вправо, повторяйте процедуру расчета конечных разностей, пока столбец не будет содержать один элемент. В результате получите треугольную таблицу значений конечных разностей (см. рис. 9.28).

10. Оформим эту таблицу. Начнем с корректировки ширины столбцов. Мышью в строке обозначений столбцов переместим соответствующие границы по максимальной длине записи (правую границу столбца *A* – влево, а правую границу столбца *C* – вправо). Отформатируем название таблицы. Для этого выделите диапазон *A1:J1* и нажмем кнопку «Объединить и поместить в центре» на развернутой панели меню *ГЛАВНАЯ*.

11. Выполните аналогичные операции с диапазонами *A2:A3*, *D2:J2*.

12. В ячейку *A4* введите «1», а в ячейку *A5* – «2». Выделите диапазон *A4:A5*, поймите крестик в правом нижнем углу выделенного фрагмента и протяните его вниз по ячейку *A11* включительно. В результате автозаполнения строки таблицы последовательно пронумеруются.

13. В ячейки *D3:J3* введите обозначения $\Delta C_{p1}^1 \div \Delta C_{p7}^7$ и выровняйте по центру.

14. Диапазон численных значений *A4:J11* также выровняйте по центру.

15. Чтобы дробные числа были представлены одинаковым числом знаков после запятой, выделите диапазон *C2:J11*, в меню *ГЛАВНАЯ* ► *Число* ► *Числовой* ► *разрядность должна соответствовать числу десятичных знаков* – 2.

16. Для оформления таблицы воспользуйтесь кнопкой «Границы» меню *ГЛАВНАЯ*, выбрав «Все границы».

Рабочий лист с выполненным заданием представлен на рис. 9.28.

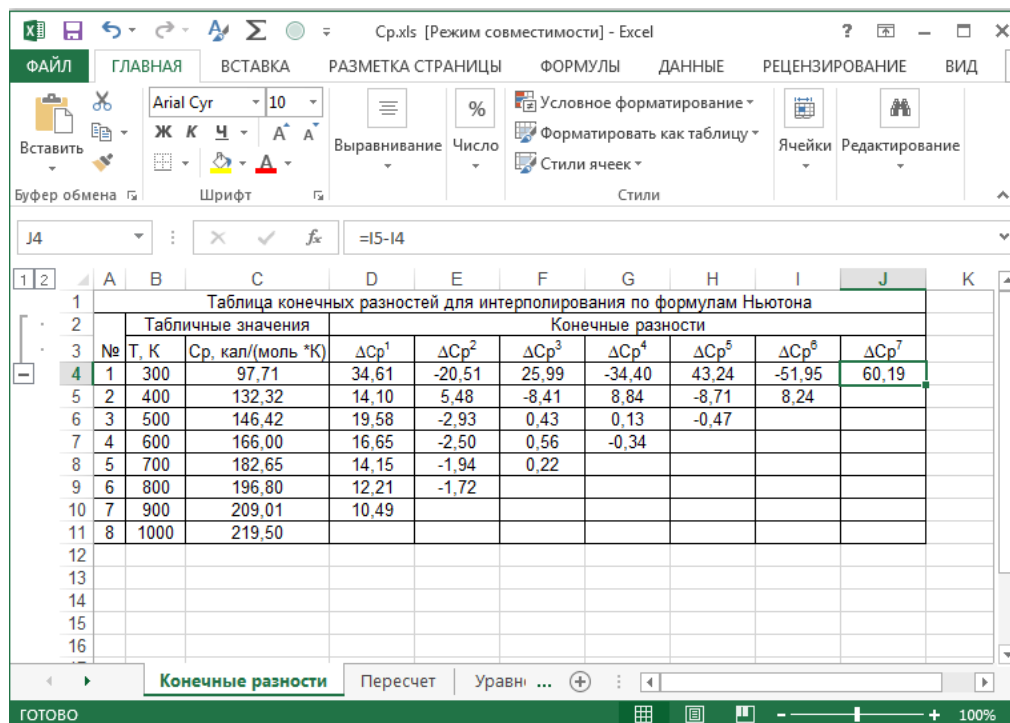


Рис. 9.28

Таким образом, вы закрепили навыки копирования данных, автозаполнения ячеек формулами, научились оформлять таблицы в приложении *Microsoft Excel*.

Вопросы для самоконтроля

1. Войдите в рабочую книгу *Microsoft Excel*.
2. Сделайте активной ячейку C3.
3. Как обозначается диапазон ячеек?
4. Как ввести текст или число?
5. Редактирование содержимого ячейки?
6. Как изменить ширину столбца и высоту строки?
7. Как выполняются вычисления по формулам?
8. Как задаются ссылки на ячейку?
9. Копирование содержимого ячеек?
10. Как использовать стандартные функции?
11. Последовательность работы с *Мастером диаграмм*.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Конец XX и начало XXI века ознаменовались широким внедрением и практическим использованием в химической науке и технологической практике метода математического моделирования. При этом решаются проблемы повышения эффективности и совершенствования технологии химического производства с использованием компьютерных моделирующих систем, создание которых требует, с одной стороны, глубокого понимания и адекватного количественного описания физико-химических закономерностей протекающих процессов, а с другой – знания вычислительных методов и основ программирования с применением ЭВМ и компьютерных технологий.

В целом пособие состоит из девяти глав.

Излагаемый теоретический материал сопровождается большим количеством примеров вычислений и обработки опытных данных. Приведены примеры и алгоритмы для решения химических задач на ЭВМ с применением численных методов, а также примеры программ на языке Паскаль. В сжатой форме описана технология работы с программой Microsoft Excel, рассматриваются различные варианты выполнения действий с табличными данными Excel.

Даны примеры работающих программ для решения прикладных задач, встречающихся в деятельности будущего специалиста.

Представленное учебное пособие ориентировано, прежде всего, на студентов химических специальностей вузов. Сведения и навыки, полученные в ходе изучения разделов данного пособия, успешно могут быть использованы и при изучении других дисциплин, которые требуют использования вычислительной техники и основ программирования, при обработке результатов химического эксперимента и математическом моделировании химико-технологических процессов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гумеров А.Н., Валеев А.Н и др. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие.– М.: КолосС, 2008. – 160 с.
2. Кравцов А.В., Мойзес О.Е., Кузьменко Е.А., Баженов Д.А., Коваль П.И. Информатика и вычислительная математика: учебное пособие для студентов химических специальностей технических вузов (гриф Минобр). – Томск: изд-во ТПУ, 2003. – 246 с.
3. Мойзес О.Е., Кузьменко Е.А., Кравцов А.В. Информатика. Ч. 2: учебное пособие. – Томск: изд-во ТПУ, 2010. – 152 с.
4. Турчак Л.И., Плотников П.В. Основы численных методов: учебное пособие. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Физматлит, 2005. – 304 с.
5. <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2013/m073.pdf>
6. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы: учебное пособие. – 8-е изд. – М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001. – 624 с.
7. Ракитин В.И. Практическое руководство по методам вычислений. – М.: Высш. шк., 1998. – 383 с.
8. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
9. Вержбицкий В.М. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения: учебное пособие для вузов. – М.: Высшая школа, 2001. – 382 с.
10. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1970. – 660 с.
11. Гутер Р.С., Резниковский П.Т. Программирование и вычислительная математика. – М.: Наука, 1971. – 264 с.
12. Воробьева Г.Н., Данилова А.Н. Практикум по вычислительной математике. – М.: Высшая школа, 1990. – 208 с.
13. Джонсон К. Численные методы в химии: пер. с англ. – М.: Мир, 1983. – 504 с.
14. Кравцов А.В., Чеканцев Н.В., Шарова Е.С., Гынгазова М.С., Смышляева Ю.А., Иванчина Э.Д. Проблемно-ориентированная информатика химико-технологических процессов (гриф СИБРУМЦ). – Томск, 2011. – 158 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Программа решения системы линейных уравнений методом Гаусса

```
Program Gauss;
  Const n = 3;
  Var a,a1:array[1..n,1..n+1] of real;
      x:array[1..n+1] of real;
      as:real;
      i,j,s,k:integer;
      f1,f2:text;
  Begin
    assign(f1,'dgaus.pas');
    assign(f2,'rgaus.pas');
    reset(f1);
    rewrite(f2);
    for i:= 1 to n do
      begin
        for j:= 1 to n+1 do
          read(f1,a[i,j]);
          readln(f1);
        end;
        close(f1);
        writeln(f2,' Решение системы линейных уравнений методом Гаусса');
        for s:= 1 to n do
          begin
            for j:= s+1 to n+1 do
              begin
                a[s,j]:= a[s,j]/a[s,s];
                for i:= s+1 to n do
                  a[i,j]:= a[i,j]-a[i,s]*a[s,j];
                end;
              end;
            end;
            x[n+1]:= 0.0;
            for i:= n downto 1 do
              begin
                as:= 0.0;
                for k:= i to n do
                  as:= as+a[i,k+1]*x[k+1];
                x[i]:= a[i,n+1]-as;
              end;
            writeln(f2,' Значения неизвестных');
            for i:= 1 to n do
              writeln(f2,' x',i,' = ',x[i]:7:3);
            close(f2);
          end.
end.
```

2. Программа решения системы линейных уравнений методом Зейделя

```
Program Zeidel;
  Label 1,2;
  Const n = 3; eps = 1e-5;
  Var a:array[1..n,1..n+1] of real;
      x,x1:array[1..n+1] of real;
      s:real;
      i,j:integer;
      f1,f2:text;
  Begin
    assign(f1,'dzeidel.pas');
    assign(f2,'rzeidel.pas');
    reset(f1);
    rewrite(f2);
    for i:= 1 to n do
    begin
      for j:= 1 to n+1 do
        read(f1,a[i,j]);
        readln(f1);
      end;
      close(f1);
      writeln(f2,' Решение системы линейных уравнений методом Зейделя');
      for i:= 1 to n do
      begin
        s:= 0.0;
        for j:= 1 to n do
          if i<>j then s:= s+abs(a[i,j]);
          if abs(a[i,i])< s then
            begin
              writeln(f2,' Условие сходимости метода не выполняется');
              goto 1;
            end;
        end;
        for i:= 1 to n do
        begin
          x[i]:= 0.0;
          x1[i]:= 0.0;
        end;
        2: for i:= 1 to n do
        begin
          s:= 0.0;
          for j:= 1 to n do
            if i<>j then s:= s+a[i,j]/a[i,i]*x[j];
          x[i]:= a[i,n+1]/a[i,i]-s;
        end;
        for i:= 1 to n do
          if abs(abs(x[i])-abs(x1[i])) > eps then
            begin
              for j:= 1 to n do
```



```

    x1[j] := x[j];
    goto 2;
end;
writeln(f2, ' Значения неизвестных');
for i := 1 to n do
    writeln(f2, '  x', i, ' = ', x[i]:7:3);
1: close(f2);
end.

```

3. Программа расчета коэффициентов параболической аппроксимации по методу наименьших квадратов с применением метода Гаусса для решения системы линейных уравнений

```

Program Parabol;
Const n = 3; m = 9;
Var aa:array[1..n,1..n+1] of real;
    a:array[1..n+1] of real;
    x,y,yr:array[1..m] of real;
    as:real;
    s1,s2,s3,s4,s5,s6,s7:real;
    i,j,s,k:integer;
    f1,f2:text;
Begin
    assign(f1, 'dparabol.pas');
    assign(f2, 'rparabol.pas');
    reset(f1);
    rewrite(f2);

    for i := 1 to m do
        read(f1,x[i]);
        readln(f1);
    for i := 1 to m do
        read(f1,y[i]);
        close(f1);
    { Формирование матрицы коэффициентов системы линейных уравнений}
    s1 := 0.0;  s2 := 0.0;  s3 := 0.0;  s4 := 0.0;  s5 := 0.0;  s6 := 0.0;
    s7 := 0.0;
    for i := 1 to m do
        begin
            s1 := s1+x[i];
            s2 := s2+sqr(x[i]);
            s3 := s3+exp(3*ln(x[i]));
            s4 := s4+exp(4*ln(x[i]));
            s5 := s5+y[i];
            s6 := s6+y[i]*x[i];
            s7 := s7+y[i]*sqr(x[i]);
        end;
    aa[1,1] := m; aa[1,2] := s1; aa[1,3] := s2; aa[1,4] := s5;
    aa[2,1] := s1; aa[2,2] := s2; aa[2,3] := s3; aa[2,4] := s6;
    aa[3,1] := s2; aa[3,2] := s3; aa[3,3] := s4; aa[3,4] := s7;

```

```

writeln(f2, ' Матрица коэффициентов системы линейных уравнений');
writeln(f2);
for i: = 1 to n do
begin
  for j: = 1 to n+1 do
    write(f2, aa[i, j]:10);
    writeln(f2);
  end;
  writeln(f2);
{ Решение системы линейных уравнений}
for s: = 1 to n do
begin
  for j: = s+1 to n+1 do
  begin
    aa[s, j]: = aa[s, j]/aa[s, s];
    for i: = s+1 to n do
      aa[i, j]: = aa[i, j]-aa[i, s]*aa[s, j];
    end;
  end;
end;
a[n+1]: = 0.0;
for i: = n downto 1 do
begin
  as: = 0.0;
  for k: = i to n do
    as: = as+aa[i, k+1]*a[k+1];
  a[i]: = aa[i, n+1]-as;
end;
writeln(f2, ' Значения коэффициентов параболической аппроксимации');
writeln(f2);
for i: = 1 to n do
  writeln(f2, ' a', i-1, ' = ', a[i]:11:5);
  writeln(f2);
{ Расчет теплоемкости циклопропана по аппроксимирующему уравнению}
writeln(f2, ' Результаты расчета теплоемкости циклопропана');
writeln(f2);
writeln(f2, ' Т, К      Ср, Дж/моль*К      Ср расч., Дж/моль*К');
for i: = 1 to m do
begin
  yr[i]: = a[1]+a[2]*x[i]+a[3]*sqr(x[i]);
  writeln(f2, x[i]:6:0, ' ', y[i]:12:2, yr[i]:15:2);
end;
close(f2);
end.

```

4. Демонстрационная программа по теме «Интерполяция»

```

program Lagrange;
(*
  Демонстрационная программа по теме
  "Интерполяционная формула Лагранжа".
*)

```

```

uses Graph;
const
  Nmax = 10;      {Максимальное количество элементов в массивах X и Y}

  {      Параметры графика      }
  Xmin = 0.1;    {Минимальное значение на оси OX. }
  Xmax = 4.7;    {Максимальное значение на оси OX. }
  Ymin = 1;      {Минимальное значение на оси OY. }
  Ymax = 4.5;    {Максимальное значение на оси OY. }
  dNx1 = 40;     {Отступ рамки слева.      }
  dNx2 = 20;     {Отступ рамки справа.      }
  dNy1 = 20;     {Отступ рамки сверху.      }
  dNy2 = 20;     {Отступ рамки снизу.      }
  X1 = 0.5;      {Точка начала нумерации по оси OX.}
  Y1 = 1;        {Точка начала нумерации по оси OY.}
  dX = 0.5;      {Шаг нумерации по оси OX.      }
  dY = 0.5;      {Шаг нумерации по оси OY.      }

var
  X,Y:array[1..Nmax] of real;      {Массивы исходных данных.      }
  N,                                {Количество элементов в массивах X и Y}
  Nx1,Nx2,                          {Границы рамки: левая, правая,  }
  Ny1,Ny2:integer;                  {верхняя, нижняя.      }
  {Прочие служебные переменные}
  F:text;
  xx,yy,h:real;
  S:string;
  dr,dm,i,j,xcr:integer;
  P:real;

  {функция масштабирования по оси OX}
  function Kx(x:real):integer;
  begin
    Kx:= round(Nx1+(Nx2-Nx1)*(X-Xmin)/(Xmax-Xmin))
  end;
  {функция масштабирования по оси OY}
  function Ky(y:real):integer;
  begin
    Ky:= round(Ny2-(Ny2-Ny1)*(Y-Ymin)/(Ymax-Ymin))
  end;

BEGIN
  {      Ввод исходных данных      }
  {-----}
  {Считывание массивов X и Y из файла "Lagrange.dat"}
  { с одновременным подсчетом количества данных }
  Assign(F,'Lagrange.dat');      {Открытие файла "Lagrange.dat"}
  ReSet(F);                      {для счивания данных}
  N:= 0;
  while not seekeof(F) do        {Если в файле есть еще данные,}
  begin

```

```

N: = N+1;
readln(F,X[N],Y[N])          {то считываем их из файла.}
end;
Close(F);                    {Закрытие файла.}

{ Построение рамки, осей и сетки графика. }
dr: = detect;
InitGraph(dr,dm,'c:\bp\bgi'); {Переход в графический режим.}
                               {Графический драйвер должен быть записан
                               в каталоге c:\bp\bgi}
Nx1: = dNx1; Nx2: = GetMaxX-dNx2; {Расчет левой и правой границ рамки}
Ny1: = dNy1; Ny2: = GetMaxY-dNy2; {Расчет верхней и нижней границ рам-
ки}

SetColor(LightGray);        {Установка цвета сетки-светлосерый}
SetLineStyle(DottedLn,0,NormWidth); {Установка типа линии сетки-
штриховая, тонкая}

{Вычерчивание вертикальных линий сетки.}
xx: = x1;                    {Начиная с точки x1-начала нумерации,}
repeat
line(kx(xx),Ny1,kx(xx),Ny2); {вычерчиваем вертикальные линии сетки}
xx: = xx+dX                   {с шагом dX}
until xx>Xmax;                {вдоль всей оси OX.}

{Вычерчивание горизонтальных линий сетки.}
yy: = y1;                    {Начиная с точки y1-начала нумерации,}

repeat
line(Nx1,ky(yy),Nx2,ky(yy)); {вычерчиваем горизонтальные линии сет-
ки}
yy: = yy+dY                   {с шагом dY}
until yy>Ymax;                {вдоль всей оси OY.}

{Вывод заголовка графика}
{Установка выравнивание текста-заголовка графика-относительно точки
вывода: по горизонтали - по центру, по вертикали - снизу}
SetTextJustify(CenterText,BottomText);
xcr: = (Nx1+Nx2) div 2;        {Вычисление центра рамки}
SetColor(LightBlue);         {Установка цвета букв}
OutTextXY(xcr,Ny1-2,'Интерполяционный полином Лагранжа'); {Вывод заго-
ловка}

{Зарисовка рамки}
SetColor(White);              {Установка цвета рамки-белый}
SetLineStyle(SolidLn,0,NormWidth); {Установка типа линии рамки-
сплошная, тонкая}
rectangle(Nx1,Ny1,Nx2,Ny2);  {Зарисовка рамки}

{Простановка нумерации по оси OX}
{Установка выравнивание текста-нумерации оси OX-относительно точки
вывода: по горизонтали - по центру, по вертикали - сверху}
SetTextJustify(CenterText,TopText);
xx: = x1;                    {Начиная с точки X1-начала нумерации,}

```

```

repeat
str(хх:3:1,S);{Преобразование числа хх в строку символов S. Оно необхо-
димо,
поскольку процедура OutTextXY выводит на экран только переменные типа
String.}
OutTextXY(kx(хх),Ny2+5,S);      {проставляем нумерацию оси OX}
хх:= хх+dX                      {с шагом dX}
until хх>Xmax;                  {вдоль всей оси OX.}

{Простановка нумерации по оси OY}
{Установка выравнивание текста-нумерации оси OY-относительно точки
вывода: по горизонтали - справа, по вертикали - по центру}
SetTextJustify(RightText,CenterText);
уу:= у1;                        {Начиная с точки у1-начала нумерации,}
repeat
str(уу:3:1,S);
OutTextXY(Nx1-3,ку(уу),S);      {проставляем нумерацию оси OY}
уу:= уу+dY                      {с шагом dY}
until уу>Ymax;                  {вдоль всей оси OY.}

{Вычисление и зарисовка полинома Лагранжа на отрезке от Xmin до Xmax.}
хх:= Xmin;
h:= (Xmax-Xmin)/1000;           {Вычисление шага}
repeat
{Вычисление значения полинома Лагранжа в точке хх.}
уу:= 0;
for i:= 1 to N do
begin
P:= 1;
for j:= 1 to N do
if i<>j then
P:= P*(хх-x[j])/(x[i]-x[j]);
уу:= уу+y[i]*P
end;
PutPixel(kx(хх),ку(уу),LightGreen); {Вывод точки на экран. Цвет светло-
зеленый}
хх:= хх+h
until хх>Xmax;

{Установка цвета точек}
SetColor(LightRed);            {Цвет линий}
SetFillStyle(SolidFill,LightRed); {Цвет закраски}
for i:= 1 to N do
PieSlice(kx(x[i]),ку(y[i]),0,360,3); {Зарисовка точек}

readln;                        {Пауза. Нажмите Enter.}
CloseGraph;                     {Выход из графического режима}
END.

```

Файл с исходными данными 'Lagrange.dat'

```

0.5 1.125
1.0 1.250
1.5 1.875

```

2.2 3.102
 2.7 3.782
 3.0 4.001
 3.7 3.879
 4.1 3.501
 4.5 3.196

5. Демонстрационная программа по теме «Численное интегрирование»

```

program Integral;
(*
  Демонстрационная программа по теме
  "Численное интегрирование. Метод прямоугольников."
*)
uses Graph;
const
  {          Параметры графика          }
  Xmin = 0.25;  Xmax = 2.75;  Ymin = 0;   Ymax = 0.9;
  dNx1 = 40;   dNx2 = 20;   dNy1 =      20;   dNy2 =      40;
  X1 = 0.5;   Y1 = 0;   dX = 0.5;   dY = 0.2;

  {          Данные для расчета интеграла          }
  a = 0.5;           {Левая граница интеграла}
  b = 2.5;           {Правая граница интеграла}
  N = 7;             {Количество отрезков разбиения}
  {          Подынтегральная функция          }
  function F(x:real):real;
  begin F:= 2*x*exp(-x) end;

var
  Nx1,Nx2,Ny1,Ny2:integer;
  x,y,h,xc,yc,Int:real;
  S:string;
  dr,dm,i,j,xcr:integer;

{функция масштабирования по оси OX}
function Kx(x:real):integer;
begin
  Kx:= round(Nx1+(Nx2-Nx1)*(X-Xmin)/(Xmax-Xmin))
end;
{функция масштабирования по оси OY}
function Ky(y:real):integer;
begin
  Ky:= round(Ny2-(Ny2-Ny1)*(Y-Ymin)/(Ymax-Ymin))
end;

BEGIN
  { Построение рамки, осей и сетки графика.  }
  dr:= detect;
  InitGraph(dr,dm,'c:\bp\bgi');

```

```

Nx1: = dNx1; Nx2: = GetMaxX-dNx2;
Ny1: = dNy1; Ny2: = GetMaxY-dNy2;

SetColor(LightGray);
SetLineStyle(DottedLn,0, NormWidth);
{Вычерчивание вертикальных линий сетки.}
x: = x1;
repeat
line(kx(x), Ny1, kx(x), Ny2);
x: = x+dX
until x>Xmax;
{Вычерчивание горизонтальных линий сетки.}
y: = y1;
repeat
line(Nx1, ky(y), Nx2, ky(y));
y: = y+dY
until y>Ymax;

{Вывод заголовка графика}
SetTextJustify(CenterText, BottomText);
xcr: = (Nx1+Nx2) div 2;
SetColor(LightBlue);
OutTextXY(xcr, Ny1-2, 'Метод прямоугольников'); {Вывод заголовка}

{Построение прямоугольников}
SetColor(LightMagenta); {Установка цвета рамки прямоугольников}
{светло-розовый}
SetFillStyle(WideDotFill, LightRed); {Установка типа и цвета закрашки}
{точечная, светло-красный}
SetLineStyle(SolidLn, 0, NormWidth); {Установка типа линии рамки-
сплошная, тонкая}
x: = a;
h: = (b-a)/n; {Ширина прямоугольника}
Int: = 0;
for i: = 1 to n do
begin
xc: = x+h/2; {Расчет центра очередного прямоугольника}
yc: = f(xc); {Расчет высоты очередного прямоугольника}
Int: = Int+yc*h;
bar(kx(x), Ny2, kx(x+h), ky(yc)); {Зарисовка прямоугольника}
rectangle(kx(x), Ny2, kx(x+h), ky(yc));
x: = x+h
end;

{Построение графика подынтегральной функции по точкам}
x: = Xmin; h: = (Xmax-Xmin)/1000;
repeat
PutPixel(kx(x), ky(f(x)), 10);
x: = x+h
until x>Xmax;

```

```

{Зарисовка точек пересечения высот прямоугольников
с подынтегральной функцией}
SetColor(Yellow);
SetFillStyle(SolidFill,Yellow);
x:= a; h:= (b-a)/n;
for i:= 1 to N do
begin
  xc:= x+h/2;
  yc:= f(xc);
  PieSlice(kx(xc),ky(yc),0,360,3);
  x:= x+h
end;

{Зарисовка рамки}
SetColor(White);
SetLineStyle(SolidLn,0,NormWidth);
rectangle(Nx1,Ny1,Nx2,Ny2);

{Простановка нумерации по оси OX}
SetTextJustify(CenterText,TopText);
x:= x1;
repeat
str(x:3:1,S);
OutTextXY(kx(x),Ny2+5,S);
x:= x+dX
until x>Xmax;

{Простановка нумерации по оси OY}
SetTextJustify(RightText,CenterText);
y:= y1;
repeat
str(y:3:1,S);
OutTextXY(Nx1-3,ky(y),S);
y:= y+dY
until y>Ymax;

{Ответ}
SetTextJustify(CenterText,TopText);
str(Int:8:5,S);
S:= 'Интеграл = '+S;
OutTextXY(Xcr,Ny2+20,S);

readln;
CloseGraph;
END.

```

6. Демонстрационная программа по теме «Дифференциальные уравнения»

```

program Euler;
(*
  Демонстрационная программа по теме
  "Интегрирование дифференциальных уравнений. Метод Эйлера".
*)

```



```

uses Graph;
const
  {          Параметры графика          }
  Xmin = 0.0;  Xmax = 2.2;  Ymin = 0;  Ymax = 1.0;
  dNx1 = 40;   dNx2 =      20;   dNy1 =      20;   dNy2 =      20;
  X1 = 0.0;   Y1 = 0;   dX = 0.5;   dY = 0.2;

  { Исходные данные для решения дифференциального уравнения }
  x0 = 0.0; y0 = 1.0;          {Начальные условия}
  xk = 2.0; h = 0.1;          {Граничное условие и шаг}
  {  Функция-правая часть дифференциального уравнения      }
  function F(x,y:real):real;
  begin F := x-3*sqrt(y)+0.3 end;
var
  Nx1,Nx2,Ny1,Ny2:integer;
  x,y,xs,ys:real;
  S:string;
  dr,dm,i,j,xcr:integer;

  {Функция масштабирования по оси OX}
  function Kx(x:real):integer;
  begin
  Kx := round(Nx1+(Nx2-Nx1)*(X-Xmin)/(Xmax-Xmin))
  end;
  {Функция масштабирования по оси OY}
  function Ky(y:real):integer;
  begin
  Ky := round(Ny2-(Ny2-Ny1)*(Y-Ymin)/(Ymax-Ymin))
  end;
BEGIN
  { Построение рамки, осей и сетки графика. }
  dr := detect;
  InitGraph(dr,dm,'c:\bp\bgi');
  Nx1 := dNx1; Nx2 := GetMaxX-dNx2;
  Ny1 := dNy1; Ny2 := GetMaxY-dNy2;

  SetColor(LightGray);
  SetLineStyle(DottedLn,0,NormWidth);

  {Вычерчивание вертикальных линий сетки.}
  x := x1;
  repeat
  line(kx(x),Ny1,kx(x),Ny2);
  x := x+dX
  until x>Xmax;

  {Вычерчивание горизонтальных линий сетки.}
  y := y1;
  repeat
  line(Nx1,ky(y),Nx2,ky(y));
  y := y+dY
  until y>Ymax;

```

```

{Вывод заголовка графика}
SetTextJustify(CenterText, BottomText);
xcr: = (Nx1+Nx2) div 2;
SetColor(LightBlue);
OutTextXY(xcr, Ny1-2, 'Метод Эйлера');

{Зарисовка рамки}
SetColor(White);
SetLineStyle(SolidLn, 0, NormWidth);
rectangle(Nx1, Ny1, Nx2, Ny2);

{Простановка нумерации по оси OX}
SetTextJustify(CenterText, TopText);
x: = x1;
repeat
str(x:3:1, S);
OutTextXY(kx(x), Ny2+5, S);
x: = x+dX
until x>Xmax;

{Простановка нумерации по оси OY}
SetTextJustify(RightText, CenterText);
y: = y1;
repeat
str(y:3:1, S);
OutTextXY(Nx1-3, ky(y), S);
y: = y+dY
until y>Ymax;

{Решение дифференциального уравнения с одновременным построением графика}
SetColor(LightRed);
SetFillStyle(SolidFill, LightRed);
x: = x0; y: = y0;
PieSlice(kx(x), ky(y), 0, 360, 2);
repeat
xs: = x; ys: = y;
y: = y+F(x, y)*H;
x: = x+H;
line(kx(xs), ky(ys), kx(x), ky(y));
PieSlice(kx(x), ky(y), 0, 360, 2);
until x>= xk;

readln;
CloseGraph;
END.

```

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ПРИБЛИЖЕННЫЕ ЧИСЛА	4
1.1. Абсолютная и относительная погрешности	4
1.2. Основные источники погрешностей	6
1.3. Погрешность суммы и разности	7
1.4. Погрешность произведения и частного	8
1.5. Общая формула для погрешности	9
Вопросы и задания для самоконтроля	10
2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	11
2.1. Отделение корней	12
2.2. Уточнение корней	15
2.2.1. Метод деления отрезка пополам (метод бисекций)	15
2.2.2. Метод Ньютона (метод касательных)	17
2.2.3. Метод простых итераций	21
Вопросы для самоконтроля	25
3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	26
3.1. Постановка задачи	26
3.2. Метод Гаусса (метод исключений)	28
3.3. Интерполяционный метод Гаусса–Зейделя	31
Вопросы для самоконтроля	33
4. СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	38
4.1. Метод простой итерации	38
4.2. Метод Ньютона	42
Вопросы для самоконтроля	46
5. МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ	47
5.1. Понятие о приближении функции	47
5.2. Интерполирование	48
5.2.1. Линейная интерполяция	49
5.2.2. Интерполяционный многочлен Лагранжа	50
5.2.3. Интерполяционные многочлены Ньютона	53

5.3. Аппроксимация функций	60
5.3.1. Метод наименьших квадратов	63
5.3.2. Линейная аппроксимация	65
5.3.3. Параболическая аппроксимация	69
Вопросы для самоконтроля	74
5.3.4. Аппроксимация в виде показательной и степенной функции	74
6. ПРИБЛИЖЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ	78
6.1. Постановка задачи	78
6.2. Формулы, основанные на первой интерполяционной формуле Ньютона	79
7. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ	81
7.1. Метод прямоугольников	82
7.2. Метод трапеций	84
7.3. Метод парабол (формула Симпсона)	86
Вопросы для самоконтроля	91
8. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	92
8.1. Постановка задачи	92
8.2. Методы Рунге–Кутты	94
8.2.1. Метод Эйлера (метод Рунге–Кутты первого порядка)	95
8.2.2. Методы Рунге–Кутты второго порядка	101
8.2.3. Метод Рунге–Кутты четвертого порядка	105
8.3. Системы дифференциальных уравнений	108
Вопросы для самоконтроля	109
9. ЭЛЕКТРОННЫЕ ТАБЛИЦЫ EXCEL	110
9.1. Основные понятия электронных таблиц	110
9.2. Ввод, редактирование и форматирование данных	112
9.3. Вычисления в электронных таблицах	114
9.4. Печать документов <i>Excel</i>	121
9.5. Построение диаграмм и графиков	123
9.6. Примеры использования возможностей приложения <i>Excel</i>	126
Вопросы для самоконтроля	140
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	141
ЛИТЕРАТУРА	142

ПРИЛОЖЕНИЕ	143
1. Программа решения системы линейных уравнений методом Гаусса	143
2. Программа решения системы линейных уравнений методом Зейделя	144
3. Программа расчета коэффициентов параболической аппроксимации по методу наименьших квадратов с применением метода Гаусса для решения системы линейных уравнений	145
4. Демонстрационная программа по теме «Интерполяция»	146
5. Демонстрационная программа по теме «Численное интегрирование»	150
6. Демонстрационная программа по теме «Дифференциальные уравнения»	152

Учебное издание

МОЙЗЕС Ольга Ефимовна
КУЗЬМЕНКО Елена Анатольевна

УГЛУБЛЕННЫЙ КУРС ИНФОРМАТИКИ

Учебное пособие

Корректурa *Е.Л. Тен*
Компьютерная верстка *К.С. Чечельницкая*
Дизайн обложки *Т.А. Фатеева*

Подписано к печати 28.05.2014. Формат 60×84/16. Бумага «Снегурочка».
Печать XEROX. Усл. печ. л. 9,19. Уч.-изд. л. 8,31.
Заказ 000-14. Тираж 100 экз.



Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Издательства Томского политехнического университета
сертифицирована в соответствии с требованиями ISO 9001:2008



. 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
Тел./факс: 8(3822)56-35-35, www.tpu.ru