МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

____________ Василенко В.Н.

«__25__»__мая__2023 г.

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат: 00A29CA99D98126F4EB57F6F989D713C88
Владелец: Василенко Виталий Николаевич
Действителен: с 07.07.2022 до 30.09.2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Вычислительные методы в химии
(наименование в соответствии с РУП)

Направление подготовки (специальность)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(шифр и наименование направления подготовки/специальности)

Направленность (профиль)

Аналитическая химия
(наименование профиля/специализации)

Квалификация выпускника

Химик. Преподаватель химии
(в соответствии с Приказом Министерства образования и науки РФ от 12 сентября 2013 г. N 1061 "Об утверждении перечней специальностей и направлений подготовки высшего образования" (с изменениями и дополнениями)

Разработчик ____________ ____________ _Шуба А.А.__

(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой __ физической и аналитической химии ______________________
(наименование кафедры, являющейся ответственной за данное направление подготовки, профиль)

________________ ______________ _______ Кучменко Т. А. ____________________
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

1. Цели и задачи дисциплины

1. Целью освоения дисциплины (модуля) является формирование компетенций обучающегося в области профессиональной деятельности и сфере профессиональной деятельности:

26 Химическое, химико-технологическое производство (в сфере методов и методик получения и анализа продукции, в сфере контроля качества сырья, полуфабрикатов и готовой продукции, в сфере паспортизации и сертификации продукции)

40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере научно-технических, опытно-конструкторских разработок и внедрения химической продукции различного назначения, в сфере метрологии, сертификации и технического контроля качества продукции).

Дисциплина направлена на решение задач профессиональной деятельности следующего типа: *научно-исследовательский; технологический*.

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

2. Перечень планируемых результатов обучения, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

№ п/п	Код компетенции	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	*ОПК-4*	*Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач*	*ИД1$_{ОПК-4}$ - Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности*
			ИД2$_{ОПК-4}$ - Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик
2	*ОПК-5*	*Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности*	*ИД1$_{ОПК-5}$ – Понимает современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности*
			ИД2$_{ОПК-5}$ - Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения зада профессиональной деятельности
			ИД3$_{ОПК-5}$ - Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (показатели оценивания)
ИД1$_{ОПК-4}$ - Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знает: фундаментальные основы вычислительной техники; базовые знания в области численных методов необходимые при планировании работ химической направленности
	Умеет: использовать программное обеспечение компьютеров и базовые знания в области численных методов для планирования работ химической направленности
	Владеет: базовыми знаниями численного решения уравнений для планирования работ химической направленности, методикой построения и анализа математических моделей.
ИД2$_{ОПК-4}$ - Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик	Знает: основы стандартных методов аппроксимации численных характеристик
	Умеет: обрабатывать химические экспериментальные данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных

	характеристик
	Владеет: стандартными методами аппроксимации численных характеристик, основа построения многочленов и рядов численными методами
ИД1$_{ОПК-5}$ – Понимает современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности	Знает: основы современных IT-технологий при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности
	Умеет: использовать современные IT-технологии, включая программы обработки данных численными методами и программирования, при представлении информации химического профиля
	Владеет: современными IT-технологиями при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности
ИД2$_{ОПК-5}$ - Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	Знает: основы стандартных программ (Microsoft Excel) и оригинальных программ (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных
	Умеет: использовать стандартные программы (Microsoft Excel) и оригинальные программы (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных для решения задач профессиональной деятельности
	Владеет: стандартными программами (Microsoft Excel) и оригинальными программами (MathCAD) обработки данных с возможностью их адаптации для решения задач профессиональной деятельности
ИД3$_{ОПК-5}$ - Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Знает: основы вычислительных методов для обработки данных химического эксперимента
	Умеет: строить математические модели с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ
	Владеет: навыками построения и анализа математических моделей с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ

3. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП ВО

Дисциплина относится к *обязательной части* Блока 1 ООП. Дисциплина является обязательной к изучению.

Изучение дисциплины основано на знаниях, умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися *математика, информатика, метрология и стандартизация*.

Дисциплина является предшествующей для *изучения Методы обработки химических данных, Современная химия и химическая безопасность, Организация аналитического контроля качества на производстве, Производственная практика, научно-исследовательская работа*.

.

4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет __2__ зачетных_ единиц_.

Виды учебной работы	**Всего ак. ч**	**Распределение трудоемкости по семестрам, ак. ч**
		7 семестр
Общая трудоемкость дисциплины (модуля)	**72**	**72**
Контактная работа в т. ч. аудиторные занятия:	**46,6**	**46,6**
Лекции	30	30
в том числе в форме практической подготовки		
Практические/лабораторные занятия	15	15
в том числе в форме практической подготовки		
Консультации текущие	1,5	1,5
Консультации перед экзаменом		
Вид аттестации (зачет/экзамен)	0,1	0,1
Самостоятельная работа:	**25,4**	**25,4**

Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	14,4	14,4
Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	8	8
Курсовой проект/работа		
Домашнее задание, реферат		
Другие виды самостоятельной работы	3	3

5 Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

5.1 Содержание разделов дисциплины (модуля)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела *(указываются темы и дидактические единицы)*	Трудоемкость раздела, акад. ч
1	Элементы теории погрешностей.	Виды и типы шкал переменных. Типы распределения случайных величин. Элементы машинной арифметики. Понятие погрешности вычислений. Погрешности выполнения арифметических операций. Особенности расчетов с использованием вычислительной техники. Погрешность численного решения задачи. Сходимость численного метода. Понятие обусловленности и корректности вычислительной задачи при планировании работ химической направленности. Современные IT-технологии при представлении информации химического профиля при соблюдении норм и требований информационной безопасности	8,5
2	Численные методы линейной алгебры.	Метод Гаусса для решения систем линейных алгебраических уравнений. Выбор ведущего элемента. Особенности численной реализации метода Гаусса с применением современных технологий. Итерационные методы. Стандартные программы (Microsoft Excel) и оригинальные программы (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных для решения задач профессиональной деятельности.	16,5
3	Решение нелинейных уравнений и систем.	Обусловленность нелинейной задачи. Метод половинного деления и метод Ньютона для решения одного нелинейного уравнения. Итеративные методы решения нелинейных уравнений. Метод итераций. Условия сходимости. Способы оценки точности.	10,8
4	Численные методы теории приближений	Постановка задачи интерполяции. Интерполяция степенными полиномами. Кусочная интерполяция. Линейная интерполяция. Точность интерполяции. Факторы, определяющие точность интерполяции. Приближение функций. Понятия аппроксимации, устойчивости и сходимости. Постановка задачи аппроксимации в заданном классе функций. Основы стандартных методов аппроксимации численных характеристик. Критерии аппроксимации. Построение системы нормальных уравнений при аппроксимации по методу наименьших квадратов для анализа результатов химических экспериментов, измерений.	10,8
5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.	Численное решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Постановка задачи и основные понятия. Общая характеристика одношаговых методов. Типы и классификация ошибок численного решения	13,8

		обыкновенных дифференциальных уравнений. Вычисления локальных ошибок с помощью изменения шага интегрирования с помощью современных технологий при обработке информации химического профиля. Сравнительные достоинства и недостатки методов интегрирования систем дифференциальных уравнений. Проблемы устойчивости численных методов.	
6	Применение метода наименьших квадратов для обработки экспериментальных данных	Постановка задачи. Метод наименьших квадратов для интерполяции данных различными типами функций. Вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента.	10
	Консультации текущие		1,5
	Консультации перед экзаменом		
	Зачет, экзамен		0,1

5.2 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции, ак. ч	Практические/лабораторные занятия, ак. ч	СРО, ак. ч
1	Элементы теории погрешностей.	4	2	2,5
2	Численные методы линейной алгебры.	6	3	7,5
3	Решение нелинейных уравнений и систем.	5	2	3,8
4	Численные методы теории приближений	5	2	3,8
5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.	6	3	4,8
6	Численные методы оптимизации	4	3	3
	Консультации текущие	1,5		
	Консультации перед экзаменом			
	Зачет, экзамен	0,1		

5.2.1 Лекции

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика лекционных занятий	Трудоемкость, ак. ч
1	Элементы теории погрешностей.	Виды и типы шкал переменных. Типы распределения случайных величин. Элементы машинной арифметики. Понятие погрешности вычислений. Абсолютная и относительная погрешность. Погрешности выполнения арифметических операций. Особенности расчетов с использованием вычислительной техники. Типы ошибок. Понятие машинного «эпсилон». Способ его вычисления и возможности использования. Погрешность численного решения задачи. Проблема сходимости Сходимость численного метода. Скорость сходимости. Понятие обусловленности и корректности вычислительной задачи для анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, измерений.	4
2	Численные методы линейной алгебры.	Метод Гаусса для решения систем линейных алгебраических уравнений. Выбор ведущего элемента. Особенности численной реализации метода Гаусса с применением современных технологий. Итерационные	6

3		методы. Метод простой итерации. Метод Зейделя. Условие сходимости. Скорость сходимости. Оценка точности. Плохо обусловленная задача линейной алгебры. Проявления плохой обусловленности. Стандартные программы (Microsoft Excel) и оригинальные программы (MathCAD, Mathematica, MathLab) обработки данных для решения задач профессиональной деятельности.	
3	Решение нелинейных уравнений и систем.	Постановка задачи. Способы отделения корней. Понятия погрешности и невязки и их взаимосвязь. Обусловленность нелинейной задачи. Метод половинного деления для решения одного нелинейного уравнения. Метод Ньютона для решения одного нелинейного уравнения. Метод секущих. Метод хорд. Геометрическая интерпретация. Итеративные методы решения нелинейных уравнений. Решение систем нелинейных уравнений. Способы отделения корней. Способы оценки точности. Метод Ньютона для решения систем нелинейных уравнений. Метод простой итерации для решения систем нелинейных уравнений. Теорема о достаточных условиях сходимости методов для интерпретации результатов расчетно-теоретических работ.	5
4	Численные методы теории приближений	Постановка задачи интерполяции. Интерполяция степенными полиномами. Интерполяционные полиномы Лагранжа и Ньютона. Кусочная интерполяция. Линейная интерполяция. Точность интерполяции. Приближение функций. Понятия аппроксимации, устойчивости и сходимости. Постановка задачи аппроксимации в заданном классе функций. Критерии аппроксимации. Построение системы нормальных уравнений при аппроксимации по методу наименьших квадратов для анализа результатов химических экспериментов, измерений.	5
5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.	Численное решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Постановка задачи и основные понятия. Общая характеристика одношаговых методов. Общая характеристика методов Рунге- Кутта. Типы и классификация ошибок численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Вычисления локальных ошибок с помощью изменения шага интегрирования с помощью современных технологий при обработке информации химического профиля. Методы прогноза-коррекции для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Проблемы устойчивости численных методов.	6
6	Применение метода наименьших квадратов для обработки экспериментальных данных	Постановка задачи. Метод наименьших квадратов для интерполяции данных различными типами функций. Вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента.	4

5.2.2 Практические занятия

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика практических занятий	Трудоемкость, ак. ч
1	Элементы теории погрешностей	Типы распределения случайных величин, определение параметров распределения. Формирование алгоритма вычисления параметров машинной арифметики для анализа результатов химических экспериментов.	2

2	Численные методы линейной алгебры	Метод Гаусса для решения систем линейных алгебраических уравнений. Выбор ведущего элемента. Особенности численной реализации метода Гаусса с использованием современных технологий для анализа и интерпретации результатов химических экспериментов, измерений.	3
3	Решение нелинейных уравнений и систем.	Метод половинного деления. Метод Ньютона. Условия глобальной сходимости метода Ньютона	2
4	Численные методы теории приближений	Интерполяционные полиномы Лагранжа и Ньютона. Кусочная интерполяция. Линейная интерполяция. Точность интерполяции. Факторы, определяющие точность интерполяции.	2
5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений	Метод Рунге-Кутта первого и второго порядка. Выбор шага при интегрировании одношаговыми методами для анализа результатов химических экспериментов.	3
6	Применение метода наименьших квадратов для обработки экспериментальных данных	Метод наименьших квадратов для интерполяции данных линейными и степенными функциями для решения задач в химии	3

5.2.3 Лабораторный практикум

Не предусмотрен

5.2.4 Самостоятельная работа обучающихся

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид СРО	Трудоемкость, ак. ч
1	Элементы теории погрешностей	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	1,5
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (конкретизировать)	
2	Численные методы линейной алгебры	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2,5
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	2
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (расчетно-практическая работа)	3
3	Решение нелинейных уравнений и систем	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2,8
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (конкретизировать)	
4	Численные методы теории приближений	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	2,8
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (конкретизировать)	

5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	3,2
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1,5
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (конкретизировать)	
6	Применение метода наименьших квадратов для обработки экспериментальных данных	Проработка материалов по лекциям, учебникам, учебным пособиям	1,5
		Подготовка к практическим/лабораторным занятиям	1,5
		Подготовка к практическим занятиям	
		Курсовой проект/работа	
		Домашнее задание, реферат	
		Другие виды самостоятельной работы (конкретизировать)	

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Для освоения дисциплины обучающийся может использовать:

6.1 Основная литература

1. **Афанасьева, Н. Ю.** Вычислительные и экспериментальные методы научного эксперимента [Текст] : учебное пособие для студ. вузов, обуч. по направлению подготовки "Информатика и вычислительная техника" / Н. Ю. Афанасьева. - М. : КНОРУС, 2016. - 336 с.

2. **Олегин, И. П.** Введение в численные методы : учебное пособие / И. П. Олегин, Д. А. Красноруцкий. — Новосибирск : НГТУ, 2018. — 115 с. — ISBN 978-5-7782-3632-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/118322 (дата обращения: 07.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. **Гартман, Т. Н.** Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики : учебное пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 404 с. — ISBN 978-5-8114-3900-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/126905 (дата обращения: 07.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. **Кононова, З. А.** Компьютерное моделирование в химии : учебное пособие / З. А. Кононова, С. О. Алтухова. — Липецк : Липецкий ГПУ, 2019. — 145 с. — ISBN 978-5-907168-06-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/122414 (дата обращения: 24.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6.2 Дополнительная литература

1. Мяготин, А. В. Алгоритмы, структуры данных и численные методы : учебное пособие / А. В. Мяготин. — Санкт-Петербург : СПбГУ ГА, 2015. — 116 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/145579 (дата обращения: 07.10.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. **Абрамкин, Г. П.** Численные методы : учебное пособие / Г. П. Абрамкин. — Барнаул : АлтГПУ, 2016. — 260 с. — ISBN 978–5–88210–829–7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/112165 (дата обращения: 24.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6.3 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся

1. **Амосов, А. А.** Вычислительные методы [Текст] : учебное пособие / А. А. Амосов, Ю. А. Дубинский, Н. В. Копченова. - 4-е изд., стер. - СПб. : Лань, 2014. - 672 с.
2. **Нарышкин, Д. Г.** Равновесия в растворах электролитов. Расчеты с Mathcad : учебное пособие / Д. Г. Нарышкин, М. А. Осина, В. Ф. Очков. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 180 с. — ISBN 978-5-8114-2913-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/169042 (дата обращения: 24.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. **Самойлов, Н. А.** Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов" : учебное пособие / Н. А. Самойлов. — 3-е изд., испр. И доп. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 176 с. — ISBN 978-5-8114-1553-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/169384 (дата обращения: 24.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Наименование ресурса сети «Интернет»	Электронный адрес ресурса
«Российское образование» - федеральный портал	*https://www.edu.ru/*
Научная электронная библиотека	*https://elibrary.ru/defaultx.asp*
Национальная исследовательская компьютерная сеть России	*https://niks.su/*
Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»	*http://window.edu.ru/*
Электронная библиотека ВГУИТ	*http://biblos.vsuet.ru/megapro/web*
Сайт Министерства науки и высшего образования РФ	*https://minobrnauki.gov.ru/*
Портал открытого on-line образования	*https://npoed.ru/*
Электронная информационно-образовательная среда ФГБОУ ВО «ВГУИТ»	*https://education.vsuet.ru/*
Обучающие вебинары по MathCAD	*https://www.mathcad.com/en/capabilities*
Руководство по программе Mathematica	*https://library.wolfram.com/infocenter/Books/8511/NotebooksAndDocumentsPart1.pdf*
Обучающие семинары по MATLAB	*https://www.mathworks.com/support/learn-with-matlab-tutorials.html*

6.5 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

При изучении дисциплины используется программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы: ЭИОС университета, в том числе на базе программной платформы «Среда электронного обучения 3KL», автоматизированная информационная база «Интернет-тренажеры», «Интернет-экзамен» и пр.

При освоении дисциплины используется лицензионное и открытое программное обеспечение – *ОС Windows; ОС Linux, Microsoft Excel, MathCAD (trial-version) www.mathcad.com/en/try-and-buy/mathcad-express-free-download*

7 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

При чтении лекций используется мультимедийное оборудование (интерактивная доска, проектор) факультета экологии и химической технологии (а. 37) или аудиовизуальной системой лекционных аудиторий (мультимедийный проектор Epson EB-X18, экран ScreenMedia) (а. 441).

Практические занятия проходят в учебных (а. 442, 431) лабораториях кафедры физической и аналитической химии, оснащенных компьютерами со свободным доступом в сеть Интернет и установленным ПО, а также комплектами мебели для учебного процесса.

8 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Оценочные материалы (ОМ) для дисциплины (модуля) включают:

- перечень компетенций с указанием индикаторов достижения компетенций, этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание шкал оценивания;
- типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.

ОМ представляются отдельным комплектом и **входят в состав рабочей программы дисциплины (модуля)**.

Оценочные материалы формируются в соответствии с П ВГУИТ «Положение об оценочных материалах».

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

по дисциплине

Вычислительные методы в химии

1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования

№ п/п	Код компетенции	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	*ОПК-4*	*Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач*	*ИД1$_{ОПК-4}$ - Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности*
			ИД2$_{ОПК-4}$ - Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик
2	*ОПК-5*	*Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности*	*ИД1$_{ОПК-5}$ – Понимает современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности*
			ИД2$_{ОПК-5}$ - Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения зада профессиональной деятельности
			ИД3$_{ОПК-5}$ - Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (показатели оценивания)
ИД1$_{ОПК-4}$ - Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знает: фундаментальные основы вычислительной техники; базовые знания в области численных методов необходимые при планировании работ химической направленности
	Умеет: использовать программное обеспечение компьютеров и базовые знания в области численных методов для планирования работ химической направленности
	Владеет: базовыми знаниями численного решения уравнений для планирования работ химической направленности, методикой построения и анализа математических моделей.
ИД2$_{ОПК-4}$ - Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик	Знает: основы стандартных методов аппроксимации численных характеристик
	Умеет: обрабатывать химические экспериментальные данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик
	Владеет: стандартными методами аппроксимации численных характеристик, основа построения многочленов и рядов численными методами
ИД1$_{ОПК-5}$ – Понимает современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности	Знает: основы современных IT-технологий при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности
	Умеет: использовать современные IT-технологии, включая программы обработки данных численными методами и программирования, при представлении информации химического профиля
	Владеет: современными IT-технологиями при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности
ИД2$_{ОПК-5}$ - Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	Знает: основы стандартных программ (Microsoft Excel) и оригинальных программ (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных
	Умеет: использовать стандартные программы (Microsoft Excel) и оригинальные программы (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных для решения задач профессиональной деятельности
	Владеет: стандартными программами (Microsoft Excel) и оригинальными программами (MathCAD) обработки данных с возможностью их адаптации для решения задач профессиональной деятельности
ИД3$_{ОПК-5}$ - Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического	Знает: основы вычислительных методов для обработки данных химического эксперимента
	Умеет: строить математические модели с помощью численных методов

эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ
	Владеет: навыками построения и анализа математических моделей с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ

2 Паспорт оценочных материалов по дисциплине/практике

№ п/п	Разделы дисциплины	Индекс контролируемой компетенции (или ее части)	Оценочные материалы		Технология/процедура оценивания (способ контроля)
			наименование	№№ заданий	
1	Элементы теории погрешностей	ОПК-4	*Тест*	1-5	*Бланочное или компьютерное тестирование*
			Собеседование (зачет, коллоквиум)	51-53	*Проверка преподавателем*
2	Численные методы линейной алгебры	ОПК-4	*Тест*	6-12	*Бланочное или компьютерное тестирование*
			Собеседование (зачет, коллоквиум)	72-84	*Проверка преподавателем*
			Расчетно-практическая работа	41-50	*Проверка преподавателем*
3	Решение нелинейных уравнений и систем	ОПК4, ОПК-5	*Тест*	13-25	*Бланочное или компьютерное тестирование*
			Собеседование (зачет)	84-91	*Проверка преподавателем*
4	Численные методы теории приближений	ОПК-5	*Тест*	26-30	*Бланочное или компьютерное тестирование*
			Собеседование (зачет, коллоквиум)	54-71	*Проверка преподавателем*
5	Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений	ОПК-5	*Тест*	31-40	*Бланочное или компьютерное тестирование*
			Собеседование (зачет, коллоквиум)	92-98	*Проверка преподавателем*
6	Применение метода наименьших квадратов для обработки экспериментальных данных	ОПК-5	*Собеседование (зачет, коллоквиум)*	99-108	*Проверка преподавателем*

3 Оценочные материалы для промежуточной аттестации.

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Аттестация обучающегося по дисциплине/практике проводится в форме тестирования (*или письменного ответа или выполнения расчетно-графической (практической) работы или решения контрольных задач и т.п.*) и предусматривает возможность последующего собеседования (зачета, экзамена).

Каждый вариант теста включает 20 контрольных заданий, из них:

- 10 контрольных заданий на проверку знаний;
- 5 контрольных заданий на проверку умений;
- 5 контрольных заданий на проверку навыков;

Или

Каждый билет включает 5 контрольных вопросов (*задач*), из них:
- 3 контрольных вопросов (*задач*) на проверку знаний;
- 1 контрольных вопросов (*задач*) на проверку умений;
- 1 контрольных вопросов (*задач*)на проверку навыков и т.п.

3.1 Тесты (тестовые задания)[1]

3.1.1 ***Шифр и наименование компетенции*** _ОПК-4 - Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

№ задания	Тестовое задание с вариантами ответов и правильными ответами
	Тип тестового задания, например, Выбор одного правильного ответа
1	Какие характерные признаки имеет пассивный эксперимент? -входное воздействие изменяется по заданному закону; -управляющие воздействия неслучайны; +входное воздействие не регулируется в ходе эксперимента; -выходные сигналы распределены по нормальному закону распределения; -выходные сигналы изменяются во времени.
2	Какие характерные признаки имеет активный эксперимент? -входное воздействие изменяется по заданному закону; -управляющие воздействия неслучайны; +входное воздействие регулируется в ходе эксперимента; -выходные сигналы распределены по нормальному закону распределения; -выходные сигналы изменяются во времени. -динамические и стационарные.
3	Что такое функция отклика? -функция, образованная выходными переменными; -функция, образованная входными переменными; -функция изменения параметра процесса, подлежащего оптимизации; +функция изменения параметра процесса, подлежащего оптимизации, в зависимости от входных переменных; -функция преобразования «вход-выход».
4	Какие основные типы измерительных шкал представления выборочных данных Вы знаете? -количественную; -балльную; -порядковую; +количественную, порядковую, балльную; -с использованием нечетких чисел.
5	В чем суть операции ранжирования? -изменением номера следования элементов исходной выборки; -присвоения порядковых номеров элементов выборки; +переупорядочивание элементов полученных выборочных данных относительно исходных; -рандомизация; -обнуление.
6	Как представляется общий вид уравнения регрессии? +y=ax+b; -y=ax; -y=dx/dz; - y = f (x1 , x2);
7	Как оценивается достоверность регрессионной зависимости? -с использованием статистического критерия Пирсона; -на основании данных критерия Фишера; +на основании данных критериев Фишера и Пирсона одновременно; -на основании критерия Манна-Уитни; -с использованием дисперсионного анализа.

8	Чем определяется ширина доверительного интервала? -видом закона распределения; -объемом выборочных данных; +статистикой критерия согласия, среднеквадратическим отклонением, объемом выборочных данных, доверительной вероятностью; -среднеквадратическим отклонением; -с доверительной вероятностью.
9	Дайте определение риска при решении имитационных задач -потеря запланированной затратной части проекта; +опасность потери запланированной доходности проекта как за счет увеличения затрат проекта, так и за счет не реализации на практике прогно- за получения выручки; -оценка убытков проекта; -риск неспособности покрытия текущих финансовых обязательств в связи с замораживанием значительной части активов в неликвидной форме;
10	С какой целью имитационное моделирование используется в стратегиях управления предприятия -для моделирования стратегий развития производства; -для стратегий диверсифицированного роста (поиск дополнительных возможностей); -для стратегий управления жизненным циклом изделий; -для задач реинжиниринга; +для всех перечисленных стратегий.
11	Перечислите основные динамические модели процессов на предприятиях +все модели процессов, реализующих жизненный цикл изделия; -информационные; -денежные потоки; -финансовые потоки; -процессы логистики.
12	Перечислите основные инструментальные средства представления функциональных моделей и их диаграмм -CALS; -GPSS; -Rational Rose; +SADT; -ARIS.
13	Основные модели имитации материальных ресурсов -модели неперемещаемого ресурса; -модели перемещаемого ресурса; -модели бюджетирования; +модели перемещаемых и неперемещаемых ресурсов; -модели страхования.
14	Основные технологии имитационного моделирования жизненного цикла изделий +CALS; -GPSS; -IDENFO; -SADT; -ARIS.
15	В чем заключается сущность моделирования ? +Это замещение одного объекта (оригинала) другим (моделью) и фикса ция или изучение свойств оригинала путем исследования свойств модели Моделирование-это процесс физического познания реальной системы. Моделирование-это процесс описания реальной системы с использованием средств вычислительной техники. Моделирование- это познание физических процессов.

16	В теории моделирования что понимается под объектом-оригиналом ? Компьютерная технология Эта воображаемая система. +Объектом-оригиналом может быть естественная и искусственная, реальная или воображаемая система. Это реальные процессы.
17	Что понимается под математической моделью ? Математическая модель-это описание реального объекта с помощью дифференциальных уравнений. Математическая модель это модель разработанная математиком. +Представление изучаемого явления, процесса или объекта с помощью математических соотношений и формул. Математическая модель-это описание объекта с помощью систем урав- нений.
18	Чем начинается процесс моделирования? Процесс моделирования начинается с разработки программы. +Процесс моделирования начинается с формализации объекта. Моделирование начинается с выбора средств моделирования. Правильных ответов нет.
19	В чем заключается целесообразность моделирования? +Когда у модели отсутствуют те признаки оригинала, которые препятствуют его исследованию. Моделирование целесообразно использовать тогда, когда исследователь имеет достаточного опыта для проведения эксперимента. Для получения большого числа значений искомых параметром. Все ответы правильны.
20	Что собой представляет теория моделирования ? Это теория разработки моделей. + Это взаимосвязанная совокупность положений, определений методов и средств создания и изучения моделей. Совокупность методов создания моделей. Теория замещения одних объектов (оригиналов) другими объектами (моделями) и исследования свойств объектов на их моделях.

3.1.2 ***Шифр и наименование компетенции*** _ОПК-5 - _Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности_

№ задания	Тестовое задание
	Тип тестового задания, например, Выбор одного правильного ответа
21	Что понимается под предметом теории моделирования? Модели реальных объектов или систем. +Совокупность положений определений, методов или средств моделиро- вания и сами модели. Программные средства для разработки моделей Методы теории моделирования.
22	Какие модели в знаете ? Физическая, масштабная, географическая, математическая, химическая +Математическая,имитационная,оптимизационная,масштабная,аналоговая Физическая ,аналоговая, математическая, абстрактная, вычислительная. Физические, математические, социальные.
23	Какие методы используются для исследования математической модели. Аналитические, численные, дифференциальные, графические. Аналитические, имитационные, визуальные, графические.

	+Аналитические, численные, имитационные, качественные Интегральные и асимптотические.
24	Поиск математических зависимостей между входными и выходными пере- менными ,,по собранными опытным данным может выполняется с помо- щью следующих ,,методов: Статический, корреляционный, не линейный анализ. +Регрессионный, корреляционный, дисперсионный анализ. Экспериментальный, математический, алгоритмический анализ. Дисперсионный анализ.
25	Основные цели создания математической модели. Формализация структуры и процесса работы объекта. Представить процесс, допускающий аналитическое исследование объек- та. +Оба ответа правильные Нет правильных ответов
26	Что понимается под аналитическим методом исследования математиче- ской модели ? Исследования объекта с помощью математического анализа +Преобразование математической модели к виду явных аналитических зависимостей между ,, характеристиками и параметрами объекта и внешних воздействий. Формульное описание структуры объекта. Этот- метод статического моделирования.
27	Сущность численных методов исследования математической модели. +Математическая модель, т.е.система уравнений или дифференциальные уравнения -решаются численными (итерационными) методами. -Результатом исследования систем численными методами являются мно- жества значений искомых ,,величин для конечного набора значений парамет- ров системы и входных переменных. -Метод для анализа больших систем -Реальный объект имитируется на машине.
28	Что Вы понимаете под средствами моделирования ? Технические средства алгоритмические языки, языки моделирования ав- томатизированные ,,системы моделирования, эксперимент. Технические средства, компьютерные средства, информационные средст- ва, системы ,,моделирования, языки моделирования. +Технические средства, алгоритмические языки, языки моделирования, автоматизированные,,системы моделирования Технические, гибридные, алгоритмические языки.
29	В чем заключается проверка адекватности модели ? Проверки основных параметров объекта. соответствия модели к объекту +В анализе соразмерности модели с системой, а также равнозначности системе.
30	Какими методами уменьшаются ошибки моделирования ? +Увеличение периода моделирования, сбор статистики по истечении не- которого времени Увеличением числа замером, увеличением числа параметром. Сбор статистики в конце периода моделирования. Корреляционным, регрессионным.
31	В каких целях используются результаты моделирования ? Для проверки результатов работы системы управления. Для уменьшения использования машинных ресурсов. +Для принятия решения о работоспособности системы, для выбора лучшего проектного варианта

	,,или для оптимизации системы. Для математической формализации системы.
32	Что означает априорная информация об объекте? Это информация о количестве входных параметров объекта. Это информация о внешней среде . +Это информация о структуре идентифицируемого объекта. Это информация, которая необходима иметь после эксперимента с моделью
33	Что означает апостериорная информация? Эта информация о состоянии объекта. +Эта информация полученная после наблюдения входа и выхода объекта. Эта информация о взаимодействии элементов системы. Статическая информация.
34	Какой характер имеет априорная информация? Количественный. +Качественный. Динамический. Линейная
35	Как оценивается близость объекта и модели ? Полиномом. Тригонометрической функцией. +Функцией невязки. Функцией потерь
36	Для чего используется уравнение Колмогорова ? Для определения стационарных режимов работы система. Для изучения переходных режимов системе +Для вычисления финальных вероятностей состояний система. Для изучения стационарности системы
37	Для чего используется процессы обработки результатов моделирования? Для получения интегральных характеристик Для сжатия данных Для вычисления коэффицента регрессии + Ответы 1 и 2 верны
38	Что понимается под эмпирической моделью? +Аналитический зависимость между характеристиками и факторами объекта Зависимость между параметрами объекта Модель учитывающий воздействие внешних факторов Модель объекта без учёта помех
39	Что такое регрессионный анализ? Анализ объекта для определения структуры объекта Метод для анализа устойчивости объекта +Метод для определения вида соотношения между зависимыми переменными Все ответы правильны
40	Что понимается под анализом чувствительность и системы? Анализ взаимодействия системы Анализ устойчивости характеристик системы +Проверка устойчивости характеристик системы к возможным отклонение значений параметров

3.4 Расчетно-практическая работа «Решение систем линейных алгебраических уравнений »

3.4.1 Шифр и наименование компетенции _ОПК-4_ Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

Целью расчетно-практической работы является нахождение количества четырех веществ (x1, x2, x3, x4), необходимых для участия в параллельных химических реакциях при условии ограниченных ресурсов с помощью невырожденной системы линейных уравнений.

Решение системы линейных уравнений выполнить тремя методами:
а) по формулам Крамера;
б) методом Гаусса;
в) с помощью обратной матрицы;

Содержание отчета
1. Задание для РПР по вашему варианту.
2. Рабочий документ Mathcad с результатами счета.

Исходные данные системы линейных уравнений для четырех переменных

Номер задания	Вариант	Коэффициенты				Свободные члены
		при x1	при x2	при x3	при x4	
41	1	–3 2 1 5	2 –1 –3 –1	–4 1 –2 3	5 11,5 2,7 7,8	12,3 –12,7 13,1 56,9
42	2	2 3 4 –5	1 4 12 3	1 –1 –4 –6	1 –1 4 –3	1 0 0,8 –3
43	3	1 –3 6 1	–6 7 –5 2	12 2 –4 –1	–5 –1 1 1	7,1 7,9 9,4 11,2
44	4	2 3 1 1	1 2 –3 15	–3 4 –1 5	4 –3 –2 1	1 –1 0 0
45	5	2 3 3 3	–1 3 –1 –1	3 3 –1 3	2 2 2 –1	1 1 –1 –1
46	6	1 –3 –2 4	–3 2 3 –1	4 –1 2 –4	5 3 0 –6	7,9 1,9 –3,9 15,5
47	7	2 3 3 0	1 2 2 2	–1 –4 –2 1	0 9 3 –5	7,4 0,9 4,9 9,5
48	8	5 1 –2 1	0 2 3 1	4 –1 2 -2	1 9 –6 3	–1,4 0,3 –3,98 4,87
49	9	1 –1 3 2	–1 2 –1 –2	3 2 0 1	2 1 1 –12	3,31 0,3 –0,92 0,02
50	10	1 -2 4 3	2 -1 9 –3	0 2 5 7	–1 4 –6 1	2 3 12 8

3.5 Экзамен (зачет, коллоквиум)

3.5.1 Шифр и наименование компетенции ОПК-4_ Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

Вопросы (задачи, задания) для экзамена, зачета

Номер вопроса (задачи, задания)	Текст вопроса (задачи, задания)
51	Понятие численных методов. История развития вычислительных методов.

Современное развитие науки и техники тесно связано с использованием ЭВМ, ставшим рабочим инструментом учёного, инженера, конструктора. ЭВМ позволяет строить математические модели сложных устройств и процессов, при этом резко сократить время и стоимость инженерных разработок.

Широкое использование ЭВМ способствовало развитию вычислительной математики (прикладной математики). Как и любая наука, математика представляет собой сплав "классической" (теоретической) науки и прикладной науки, в роли последней выступает область вычислительных методов.

В основе вычислительной математики лежит решение задач математического моделирования численными методами. Решение задач этими методами даёт приближенное решение, но в ряде случаев это выгодно, так как не всегда представляется возможность разрешить математическую задачу аналитически, а методы решения настолько громоздки и трудоемки, то полученное решение становится приемлемым для проектного применения.

Разработанные на сегодняшний момент численные методы перекрыли практически всю классическую математику моделирования. Применение приближенных численных методов во многих случаях более предпочтительно даже тогда, когда известен точный метод решения, так как достаточная точность и небольшие затраты времени при использовании ЭВМ обеспечивают получение ценных результатов, не прибегая к громоздким выкладкам.

Главная задача вычислительной математики - фактическое нахождение решение с требуемой точностью, тогда как классическая математика решает в основном задачи существования и свойств решения.

Вычислительная математика начала свое развитие достаточно давно и в своем движении прошла три этапа:

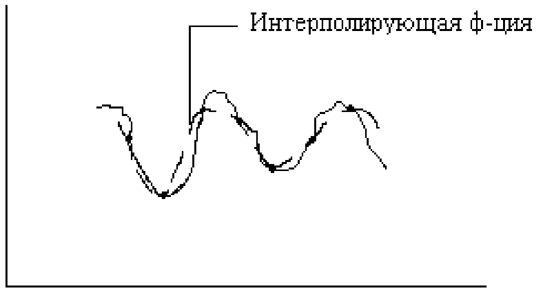
I. Первый этап начался 3-4 тысячи лет назад. Он был связан с несложными задачами арифметики, алгебры и геометрии. Например, ведение конторских книг, вычисление площадей и объемов, расчетами простейших механизмов. Вычислительные средства- палочки, пальцы, камешки и вершина- счеты.
II. Второй период начался с Ньютона. В этот период решались задачи астрономии, геодезии и расчета механических конструкций, сводящиеся либо к обыкновенным дифференциальным уравнениям, либо к алгебраическим системам с большим числом неизвестных. Вычислительные средства- таблицы элементарных функций, арифмометры и логарифмические линейки.
III. Третий период начался примерно с 1940 года. Толчком к развитию прикладной математики послужили военные задачи, требующие высокой скорости и решения задач. Появились электронные вычислительные машины.

В основу изучения и практического использования численных методов положены

следующие основополагающие тезисы:

1. Цель расчетов - это понимание, а не числа;
2. Прежде чем решать задачу, необходимо подумать над практическим применением ее решения;
3. ЭВМ многократно увеличивает некомпетентность вычислителя (инженера). До

	производства вычислений на ЭВМ необходимо представлять физическую сущность процессов, которые инженер моделирует с помощью программы на ЭВМ.
52	Классификация погрешностей.
	Ответ 1) Погрешность модели. Модель — это идеализированное описание явления, в котором выявлены основные и игнорируются второстепенные свойства явления. Хорошая модель — это верный шарж, меткая карикатура на изучаемое явление. Математическая модель создается на языке математики, но оценка погрешности математической модели есть прерогатива не математики, а той науки, в рамках которой изучается явление. 2) Погрешность исходных данных. Как правило, математическая модель содержит некоторые параметры, зависящие от исходных данных. Поскольку последние определяются обычно из экспериментов, неизбежно сопровождаемых ошибками измерений, возникает погрешность исходных данных. Погрешности в решении, обусловленные моделированием и исходными данными, называются неустранимыми. Они не зависят от математики и присутствуют, даже если решение поставленной математической задачи найдено точно. 3) Погрешность метода. После того как математическая модель создана, вычисления в рамках модели обычно можно выполнять по-разному. Сложная математическая задача заменяется более простой. Например, вычисление определенного интеграла заменяется вычислением интегральной суммы. 4) Погрешность округления. Любые расчеты, выполняемые как вручную, так и с помощью вычислительной техники, производятся с конечным числом цифр, поэтому приходится прибегать к округлению промежуточных и окончательного ответа. Так возникает п о г р е шн о с т ь о к р у г л е н и я , которая может накапливаться в ходе вычислений (опасный процесс, способный обесценить результат вычислений!). Полная погрешность является результатом взаимодействия разных видов погрешностей и не может быть меньше, чем н а и б о л ь ш а я из составляющих ее погрешностей.
53	Абсолютная и относительная погрешности
	Ответ Для оценки погрешности вводятся понятия а б с о л ю т н о й и относительной погрешности. Пусть x — точное значение некоторой величины (нам оно неизвестно и никогда не будет известно, поскольку определяется с помощью измерений, страдающих неточностями); a — приближенное значение той же величины (a ≈ x). А б с о л ю т н а я п о г р е ш н о с т ь приближенного числа a определяется как разность между истинным и полученных в ходе эксперимента значением. Но поскольку истинное значение неизвестно, то и абсолютную погрешность мы узнать не можем! Чтобы разрешить парадокс, вводят п р е д е л ь н у ю а б с о л ю т н у ю п о г р е ш н о с т ь - такое значение, которое абсолютная погрешность заведомо не превзойдет при данном способе измерений. Желательно возможно меньшее значение предельной абсолютной погрешности — это уменьшит длину интервала, содержащего искомое значение x и, следовательно, понизит неопределенность в наших знаниях об этой величине. В технике часто записывают с интервалами, которые называется д о п у с к а м и . Никакое изделие не может быть изготовлено с абсолютно точным соблюдением номинальных размеров, допуски показывают возможные (д о п у с т и м ы е) отклонения от номинала. Итак, абсолютная погрешность оценивает точность измерений, но эта оценка н е п о л н а, поскольку не учитывает характерный размер изучаемого явления (объекта). Более информативным показателем качества измерений является относительная погрешность da (соответственно п р е д е л ь ная относительная погрешность da *)

	приближенного числа a как отношение абсолютной погрешности (предельной абсолютной погрешности) к модулю числа a. Относительная погрешность является величиной б е з р а з м е р н о й , т. е. не зависит от выбора системы единиц измерения, что позволяет сравнивать качество измерений разнородных величин (бессмысленным является вопрос о том, что больше: 1 кг или 1 м,— но сравнение к а ч е с т в а измерений массы и длины в терминах относительной погрешности вполне допустимо). Измеряется da в долях единицы или в процентах.
54	Интерполяция функций
	Первый этап работы любого вычисления - числа, приближения, погрешность. Второй этап работы - функция, вычисления функции, её приближения. В краце о интерполяции. Интерполяция в простейшем случае заключается в следующем:  Существует какая-то функция, на ней заданы точки (называемые узлами интерполяции), требуется построить (интерполированную) функцию, которая принимала бы в указанных узлах те же значения.
55	Постановка задачи интерполяции и экстраполяции. Конечные разности различных порядков.
	На отрезке $[a,b]$ заданы *n* значений аргумента *x* и соответствующие им значения функции $f(x_0)=y_0;\ f(x_1)=y_1;\ \ldots;\ f(x_n)=y_n$. Требуется построить функцию $F(x)$, которая бы принимала в точках *x* те же значения, что и $f(x)$: $$F(x_0)=y_0;\ F(x_1)=y_1 \ldots\ F(x_n)=y_n$$ 1. Задача интерполяции. Суметь по полученной функции вычислить значения $F(z)$, где $z \in [a,b]$, $z \neq x_i$ при $i=0,n$ 2. Задача экстраполяции. Суметь по полученной функции вычислить $F(z)$, где $z \notin [a,b]$. Все существующие интерполяционные формулы содержат в себе конечные разности различных порядков. Пусть: $y=f(x)$ - заданная функция $\Delta x = h$ - фиксированная величина приращения аргумента Тогда $\Delta y = \Delta f(x) = f(x+\Delta x) - f(x)$ - называется первой конечной разностью функции *y*, или <u>конечной разностью первого порядка</u>. $\Delta y = y_{i+1} - y_i$ $\Delta^2 y = \Delta[f(x+\Delta x) - f(x)] = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i =$ $= [f(x+2\Delta x) - f(x+\Delta x)] - [f(x+\Delta x) - f(x)] = f(x+2\Delta x) - 2f(x+\Delta x) + f(x$ Вторая конечная разность, или <u>конечная разность второго порядка.</u>

$$\Delta^3 y = \Delta[\Delta[f(x+\Delta x) - f(x)]] = \Delta^2 y_{i+1} - \Delta^2 y_i = \Delta[f(x+2\Delta x) - 2f(x+\Delta x) + f(x)] =$$
$$= [f(x+3\Delta x) - 2f(x+2\Delta x) + f(x+\Delta x)] - [f(x+2\Delta x) - 2f(x+\Delta x) + f(x)] =$$
$$= f(x+3\Delta x) - 3f(x+2\Delta x) + 3f(x+\Delta x) - f(x)$$

Третья конечная разность, или <u>конечная разность третьего порядка.</u>

Т.о., в общем виде:

$$\Delta^n y = \Delta(\Delta^{n+1} y)$$

<u>Конечная разность *n*-го порядка.</u>

<u>Пример:</u> $y = f(x) = x^2$ $\Delta x = 1$

$$\Delta y = f(x+\Delta x) - f(x) = (x+1)^2 - x^2 = 2x + 1$$
$$\Delta^2 y = (x+2)^2 - 2(x+1)^2 + x^2 = x^2 + 4x + 4 - 2x^2 - 4x - 2 + x^2 = 2$$
$$\Delta^3 y = (x+3)^2 - 3(x+2)^2 + 3(x+1)^2 - x^2 =$$
$$= x^2 + 6x + 9 - 3x^2 - 12x - 12 + 3x^2 + 6x + 3 - x^2 = 0$$

Конечные разности различных порядков удобно располагать в форме таблиц двух видов: горизонтальной и диагональной таблиц разностей

56 Первая интерполяционная формула Ньютона.

Пусть для функции *y=f(x)* заданы значения $y_i = f(x_i)$ для равноотстоящих значений независимой переменной $x_i = x_0 + i*h$ $(i=0,n)$, где *h* - шаг интерполяции.

Требуется подобрать полином $P_n(x)$ степени не выше *n*, принимающий в точках x_i значения $P_n(x_i) = y_i$ $(i=0,n)$

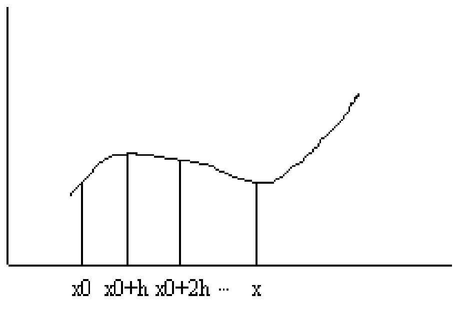
Ньютон решил поставленную задачу:

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)\ldots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0,$$

где $q = \frac{x - x_0}{h}$.

Эта формула называется первой интерполяционной формулой Ньютона.

Каков физический смысл имеет переменная q в первой интерполяционной формулой Ньютона.



$$q = \frac{x - x_0}{h} = \left| x = x_0 + kh \right| = \frac{x_0 + kh - x_0}{h} = k ,$$

где *k* - число шагов, необходимых для достижения точки *x* , исходя из точки x_0.

Рассмотрим частные случаи *n*=1 или *n*=2:

n=1 $P_1(x) = y_0 + q\Delta y_0$ – линейное интерполирование

$n=2$ $P_2(x)=y_0+q\Delta y_0+\dfrac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0$–параболическое (квадратичное) интерполирование

57 Вторая интерполяционная формула Ньютона. Применение этих формул.

Первая интерполяционная формула Ньютона практически неудобна для интерполирования значений вблизи конца таблицы. В этом случае обычно применяется вторая интерполяционная формула Ньютона.

$$P_n(x)=y_n+q\Delta y_{n-1}+\frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_{n-1}+\frac{q(q+1)\ldots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0,$$

$$q=\frac{x-x_n}{h}$$

Как первая, так и вторая формула Ньютона может быть использована для экстраполирования функции, т.е. для нахождения значений функции y для значений аргументов x, лежащих вне пределов таблицы.

Если $x<x_0$, то лучше применять первую интерполяционную функцию Ньютона.

Если $x>x_0,$ то лучше применять вторую интерполяционную функцию Ньютона.

Т.е., 1ИФН используется для интерполирования вперёд и экстраполирования назад.

2 ИФН используется для интерполирования назад и экстраполирования вперёд.

Как видно из формул 1 и 2 , при интерполяции используется разности: в 1ИФН $\Delta^n y_0$, во 2ИФН $\Delta^k y_{k+\_}$.

Необходимо отметить следующее:

при построении интерполяционных формул Ньютона в качестве начального значения x_0 выбирается первый или последний узел интерполирования; для центральных формул начальный узел является средним.

1ИФН и 2ИФН применяют тогда, когда интерполирование производится в начале или в конце таблицы и нужных центральных разностей не хватает.

58 Общая характеристика интерполяционных формул с постоянным шагом.

Существуют формулы, называемые формулы с центральными разностями, к ним относятся:

- ИФ Гаусса
- ИФ Стерлинга
- ИФ Бесселя,

которые используют разности, расположенные в горизонтальной строке диагональной таблицы, соответствует начальным значениям x_k, y_k или в строках близлежащих.

Но все эти формулы работают только для постоянного шага.

Общая характеристика интерполяционных формул с постоянным шагом может быть представлена в виде диагональной таблицы разностей:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	*Примечание*
x_{-2}	y_{-2}		$\Delta^2 y_{-3}$		$\Delta^4 y_{-4}$	*2-я ИФН*
		Δy_{-2}		$\Delta^3 y_{-3}$		
x_{-1}	y_{-1}		$\Delta^2 y_{-2}$		$\Delta^4 y_{-3}$	

		Δy_{-1}		$\Delta^3 y_{-2}$		
x_0	y_0		$\Delta^2 y_{-1}$		$\Delta^4 y_{-2}$	*ф. Стерлинга*
		Δy_0		$\Delta^3 y_{-1}$		*ф. Бесселя*
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$		$\Delta^4 y_{-1}$	
		Δy_1		$\Delta^3 y_0$		
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$		$\Delta^4 y_0$	*1-я ИФН*

59 Интерполяционная формула Лагранжа

Рассмотрим формулы для произвольно заданных узлов интерполирования.

Наиболее часто используется формула Лагранжа.

Пусть на отрезке $[a;b]$ даны $n+1$ различных значений аргумента x: $x_0, x_1, \ldots, x_n$ и известны соответствующие их значению функции $y=f(x)$: $f(x_0)=y_0$, $f(x_1)=y_1$, $f(x_n)=y_n$. Требуется построить полином $Ln(x)$ степени не выше n, имеющий в заданных узлах $x_0 \ldots x_n$ те же значения, что и функция $f(x)$, т.е. $L_n(x_i)=y_i$ при $i=1,n$

$$L_n(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i \times \frac{(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)};$$

$$L_i^{(n)}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)},$$

где $L_i^{(n)}$- коэффициенты Лагранжа.

Следует отметить, если узлы равностоящие, то интерполяционный полином Лагранжа совпадает с интерполяционной формулой Ньютона.

Примечательно то, что формула Лагранжа зависит лишь от y_i, а не от разностей.

60 Частные случаи формулы Лагранжа

$n=1$

$$L_1(x) = y_0 \times \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + y_1 \times \frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

При $n=1$ имеем 2 точки: $(x_0;y_0)$ и $(x_1;y_1)$.

прямая, проходящая через эти точки-

$$L_1(x) = y_0 \times \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + y_1 \times \frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

$n=2$ $(x_0;y_0)$, $(x_1;y_1)$, $(x_2;y_2)$

$$L_2(x) = y(x) = y_0 \times \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1 \times \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} +$$

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

Пример:

i	*x*	*y*
0	0	2
1	1	3
2	2	12
3	5	147

$$L_3(x)=y_0\times\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}+y_1\times\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}+$$
$$+y_2\times\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}+y_3\times\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_3)}$$

$L_3(x)=x^3+x^2-x+2$

Для вычисления лагранжевых подмножеств удобно составлять следующую таблицу разности:

x-x_0	x_0-x_1	x_0-x_2	.....	x_0-x_n
x_1-x_0	x-x_1	x_1-x_2	.....	x_1-x_n
x_2-x_0	x_2-x_1	x-x_2	.....	x_2-x_1
.....	.....	.....	.....	.....
x_n-x_0	x_n-x_1	x_n-x_2	.....	x-x_n

Обозначим произведение элементов i-ой строки через D_i , а произведение главной диагонали $\Pi_{n+1}(x)$. Отсюда следует, что:

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

$$L_i^{\,n}(x)=\frac{\Pi_{n+1}(x)}{D_i}\ \text{при } i=1,n$$

$$L_n(x)=\Pi_{n+1}(x)\times\sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{D_i}$$

Для упрощения вычислений можно использовать инвариантность (при равноотстоящих точках лагранжевых коэффициентов),если

$$x=at+b$$
$$x_j=at_j+b\ \text{при } j=0,n$$
$$\text{то}\quad L_i^{(n)}(x)=L_i^{(n)}(t)$$

61 Нахождение значения функции в точке с помощью интерполяционных формул

Чаще всего требуется найти не общее выражение $L_n(x)$, а значение его при конкретных x , тогда будет удобно пользоваться интерполяционной схемой Эйткена:

Последовательно вычисляются многочлены:

$$L_{i,i+1}(x)=\frac{1}{x_{i+1}-x_i}\times\begin{vmatrix}y_i & x_i-x\\ y_{i+1} & x_{i+1}-x\end{vmatrix}$$

$$L_{i,i+1,i+2}(x)=\frac{1}{x_{i+2}-x_i}\times\begin{vmatrix}L_{i,i+1}(x) & x_i-x\\ L_{i+1,i+2}(x) & x_{i+2}-x\end{vmatrix}$$

$$L_{i,i+1,i+2,i+3}(x)=\frac{1}{x_{i+3}-x_i}\times\begin{vmatrix}L_{i,i+1,i+2}(x) & x_i-x\\ L_{i+1,i+2,i+3}(x) & x_{i+3}-x\end{vmatrix}$$

и т.д.

$$L_{i,i+1\dots n}(x)=\frac{1}{x_n-x_i}\times\begin{vmatrix}L_{i,i+1,\dots,n-1}(x) & x_i-x\\ L_{i+1,\dots,n}(x) & x_n-x\end{vmatrix}$$

	Вычисления по схеме Эйткена удобно расположить в таблице:

X_i	Y_i	X_i-X	$L_{i-1,i}$	$L_{i-2,i-1,i}$	$L_{i-3,i-2,i-1,i}$
X_0	Y_0	X_0-X	L_{01}	L_{012}	L_{0123}
X_1	Y_1	X_1-X	L_{12}	L_{123}	L_{1234}
X_2	Y_2	X_2-X	L_{23}	L_{234}	
X_3	Y_3	X_3-X	L_{34}		
X_4	Y_4	X_4-X			

Вычисления по схеме Эйткена обычно ведутся до тех пор, пока последовательные значения $L_{01\ldots n}(x)$ и $L_{01\ldots n(n+1)}$ не совпадут по заданной точности.

Т.е. процедура является итерационной, легко реализуется и этим обеспечивает возможность автоматического контроля точности вычислений.

62	Понятие разделенных разностей

Если в таблицах встречаются неравноотстоящие значения аргумента, т.е. таблицы с переменным шагом, то вводят понятие разделённых разностей.

Пусть функция $y = f(x)$ задана таблично, где

$x_0, x_1, x_2 \ldots$ - значения аргумента

$y_0, y_1, y_2 \ldots$ - значения функции

$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i \neq const$

отношения $\left[x_i, x_{i+1}\right] = \dfrac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$ - разделённая разность первого порядка

$$\left[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}\right] = \frac{\left[x_{i+1}, x_{i+2}\right] - \left[x_i, x_{i+1}\right]}{x_{i+2} - x_i}$$ - разделённая разность второго порядка

$$\left[x_i, x_{i+1}, \ldots x_{i+n}\right] = \frac{\left[x_{i+1}, \ldots x_{i+n}\right] - \left[x_i, \ldots x_{i+n-1}\right]}{x_{i+n} - x_i}$$ - разделённая разность n-го порядка

Разделённые разности удобнее всего рассматривать в таблице - таблице разностей

x	y	Разделённые разности			
		1-го	2-го	3-го	4-го
x_0	y_0				
		$[x_0, x_1]$			
x_1	y_1		$[x_0, x_1, x_2]$		
		$[x_1, x_2]$		$[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	y_2		$[x_1, x_2, x_3]$		$[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$[x_2, x_3]$		$[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	y_3		$[x_2, x_3, x_4]$		
		$[x_3, x_4]$			
x_4	y_4				

63	Интерполяционная формула Ньютона для неравностоящих значений аргумента и ее погрешность

Дано $x_0, \ldots, x_n$ - значения аргумента

$y_0, \ldots, y_n$ - значения функции

	Апроксимировать таблично заданную функцию полиномом порядка не выше n $$P(x)=y_0+[x_0,x_1](x-x_0)+[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\ldots+[x_0,x_1,\ldots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$$ Погрешность формулы Ньютона для неравностоящих узлов $$R(x)=\frac{\max f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$$ $$R(x)=f(x)-P(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$$ где ξ - промежуточное значение между точками $x_0\ldots x_n$ и x
64	Интерполяция сплайками
	Даны: $[a,b]$, разбитый на разные отрезки с узлами $x_0,x_1\ldots x_n$ $$x_i=x_0+ih$$ и соответствующие им значения функции $y_0,y_1\ldots y_n$ Сплайком называется функция, которая вместе с несколькими производными непрерывна на заданном отрезке $[a,b]$, и на каждом частичном отрезке $[x_i,x_{i+1}]$ в отдельности является некоторым алгебраическим многочленом, причём степени многочлена различны. Степень сплайка - максимальная степень многочлена. Дефект сплайка - разность между степенью сплайка и порядком наивысшей производной на отрезке $[a,b]$. На практике широкое применение получили кубические сплайки. $$S_3(x)=\frac{(x_{i+1}-x)^2(2(x-x_i)+h)}{h^3}y_i+\frac{(x-x_i)^2(2(x_{i+1}-x)+h)}{h^3}y_{i+1}+\frac{(x_{i+1}-x)^2(x-x_i)}{h^2}m_i+\frac{(x-x_i)^2(x-x_{i+1})}{h^2}m_{i+1}$$ $m_i=S_3^{/}(x_i)$ $m_{i+1}=S_3^{/}(x_{i+1})$ Таким образом для интерполяции сплайками, необходимо знать не только значения функции в точках i и $i+1$; а ещё и их производные $m_i=S_3^{/}(x_i)$ - наклон сплайка
65	Задание наклона сплайка
	1. Упрощённый способ $$m_0=\frac{4y_1-y_2-3y_0}{2h}$$ $$m_i=\frac{y_{i+1}-y_i-1}{2h}$$ $$m_n=\frac{3y_n-y_{n-2}-4y_{n-1}}{2h}$$ 2. Если известны значения $y_i^{/}$ => $m_i=y_i^{/}$ 3. Глобальный

	$$m_0 = f_0^{/}$$ $$m_n = f_n^{/}$$ $$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h}$$ Сплайки являются наиболее удобным средством апроксимации функций на небольших промежутках, то есть $n >> 0$. При апрксимации функций интерполяционными многочленами можно потребовать очень высокой степени полиномы, тогда как разбиения на участки, содержащих несколько участков, правда при этом в стыке двух многочленов первая производная терпит разрыв.
66	Многочлены Чебышева
	Особенность интерполяции функции многочленами Чебышева заключается в том, что приведённые многочлены минимизируют максимальную погрешность $[-1;1]$ $$T_0(x) = 1$$ $$T_0(x) = x$$ $$T_0(x) = 2x^2 - 1$$ $$T_0(x) = 4x^3 - 3x$$ $$T_0(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$ $$T_0(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$ $$\dots$$
67	Выбор узлов интерполирования
	На практике ИФН обрывается на членах, содержащих разности в пределах заданной точности. В этом случае остаточный член да 2инф: $R_n(x) \approx \frac{q(q+1)\dots(q+n)}{(n+1)!}\Delta^{n+1}y_n$ - 2ИФН (1) $R_n(x) \approx \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{(n+1)!}\Delta^{n+1}y_0$ - 1ИФН (2) $R_n(x) \approx \frac{\max\limits_{x_0 \le x \le x_n}\lvert f^{n+1}(x)\rvert}{(n+1)!}\lvert \Pi_{n+1}(x)\rvert$ - Лагранж (3) $R_n(x) \approx \frac{\max\limits_{x_0 \le x \le x_n}\lvert f^{n+1}(x)\rvert}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$ $\Pi_{n+1} = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$ Анализируя погрешности интерполяционных формул, можно сделать следующий вывод: 1. Остаточные члены зависят от выбора узлов интерполирования: (1) и (2) = $q = \frac{x-x_0}{h}$ (2) $\Pi_{n+1} = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$ 2. В первых двух формулах видоизменить что-либо сложно, ибо само условие означает равноотстоящие узлы. 3. В формуле Лагранжа можно выбирать узлы. При неудачном выборе узлов интерполирования погрешность R_n может быть очень большой. $[a,b]$ если сконцетрировать около одного из концов, то $\Pi_{n+1} >> 0$

	Рациональный вывод узлов, чтобы полином $\Pi_{n+1}(x)$ имел наименьшее максимальное значение по абсолютной величине на отрезке $[a,b]$ => “наименее отклонился от шрся на $[a,b]$. Эта задача решима русским математиком Чебышевым $$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\varepsilon_i,$$ где $\varepsilon_i = -\cos\frac{2i+1}{2n+2}\pi$, $i=\overline{0,n}$ => это узлы Полином Чебышева $\Pi_{n+1}(x)$ $$\left\|\Pi_{n+1}(x)\right\| \le 2\left(\frac{b-a}{4}\right)^{n+1}$$ Эти узлы неравноотстоящие, а сгущаются около концов отрезка.
68	Обратное интерполирование для равноотстоящих узлов
	Задача обратного интерполирования заключается в том, чтобы по функции y найти значение аргумента x. Предположим, что $f(x)$ монотонна и значение y содержится между $y_0 = f(x_0)$ и $y_1 = f(x_1)$. Заменяя y интерполяционным полиномом Ньютона, имеем: $$y = f(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!}q + \frac{\Delta^2 y_0}{2!}q(q-1)...+\frac{\Delta^n y_0}{n!}q(q-1)...(q-n+1)$$ ⇨ $x = x_0 + qh$, где q число шагов, необходимых для достижения точки x, исходя из точки x_0. $$q = \varphi(q) = \frac{y-y_0}{\Delta y_0} - \frac{\Delta^2 y_0}{2!\Delta y_0}q(q-1)...-\frac{\Delta^n y_0}{n!\Delta y_0}q(q-1)...(q-n+1)$$ За начальное приближение принимаем: $$q_0 = \frac{y-y_0}{\Delta y_0}$$ Применяя метод итерации, получим: $$q_i = \varphi(q_{i-1})$$ Итерационный процесс, останавливается, когда $$\left\|q_{i+1} - q_i\right\| \le \varepsilon \text{ и тогда } q \approx q_{i-1} \Rightarrow x = x_0 + qh$$
69	Обратное интерполирование для неравноотстоящих точек
	Задача обратного интерполирования для случая неравноотстоящих точек непосредственно может быть решена с помощью интерполяционной формулы Лагранжа $$x = \sum_{i=0}^{n}\frac{(y-y_0)...(y-y_{i-1})(y-y_{i+1})...(y-y_n)}{(y_i-y_0)...(y_i-y_{i-1})(y_i-y_{i+1})...(y_i-y_n)}x_i$$ Или с помощью интерполяционной формулы Ньютона для неравноотстоящих точек $$x = x_0 + [y_0,y_1](y-y_0) + [y_0,y_1,y_2](y-y_0)(y-y_1)+...$$ $$...+[y_0,y_1,...,y_n](y-y_0)(y-y_1)...(y-y_{n-1})$$
70	Применение различных способ интерполяции
	1. Для равноотстоящих узлов интерполирования лучше всего выбирать интерполяционные формулы Ньютона, при этом: а) если значение в начале таблицы - 1ИФН б) если значение в конце таблицы - 2ИФН

<table>
<tr><td></td><td>

2. Существуют интерполяционные центральные формулы, позволяющие интерполировать в середине таблицы, используя близлежащие разности (Гаус, Стерлинг, Бессель)
3. Для неравноотстоящих узлов интерполирования существуют формулы Лагранжа, Ньютона.
4. Если количество узлов больше и существует возможность определения хотя бы первых производных в узлах, то лучше всего иcрользовать интерполяцию сплайками.
5. Если существует возможность выбора узлов, то выбирают по условиям Чебышева, которое позволяет уменьшить погрешность аппроксимации.
6. Используя интерполяционные формулы, можно решать задачу обратного интерполирования.
7. Задача обратного интерполирования может быть использована при решении корней уравнения, а именно:

$f(x)=0$, необходимо найти корни. Составляем таблицу $x_i \quad y_i$ по формуле, а затем задаваясь значением $y=0$ => ищат x.

</td></tr>
<tr><td>71</td><td>Оценка погрешности интерполяционной формулы Лагранжа</td></tr>
<tr><td></td><td>

Если для функции $y=f(x)$ интерполяционный полином Лагранжа $L_n(x)$ принимает в точках $x_0, x_1, \dots, x_n$ заданные значения $y_0=f(x_0), y_1=f(x_1), \dots, y_n=f(x_n)$. Возникает вопрос, насколько близко построенный полином приближается к функции $f(x)$ в других точках, то есть как велик остаточный член.

$$|R_n(x)| = |f(x)-L_n(x)|$$

- абсолютная погрешность интерполяционной формулы Лагранжа (остаточный член)

$$|R_n(x)| \le \frac{\max\limits_{x_0 \le x \le x_n} |f^{n+1}(x)|}{(n+1)!} |\Pi_{n+1}(x)|$$

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

<u>Пример</u>: с какой точностью можно вычислить $\sqrt{115}$ с помощью ИФЛ для функции $y=\sqrt{x}$

Выбрав узлы интерполирования $x_0=100, x_1=121, x_2=144$

$$y' = \frac{1}{2}x^{\frac{1}{2}}, \; y'' = -\frac{1}{4}x^{-\frac{3}{2}}, \; y''' = \frac{3}{8}x^{-\frac{5}{2}}$$

$$\Rightarrow \max\limits_{100 \le x \le 144} = \frac{3}{8}\frac{1}{\sqrt{100^5}} = \frac{3}{8}10^{-5}$$

$$|R_2| \le \frac{3}{8}10^{-5}\frac{1}{3!}|(115-100)(115-121)(115-144)| = \frac{1}{16}10^{-5}\cdot 15\cdot 6\cdot 29 \approx 1{,}6\cdot 10^{-3}$$

</td></tr>
<tr><td>72</td><td>

Общая характеристика методов решения систем линейных уравнений

</td></tr>
<tr><td></td><td>

Методы решения систем линейных уравнений в основном делятся на две группы:

1. Точные методы - представляющие собой конечные алгоритмы для вычисления корней системы.
2. Итерационные методы - позволяющие получить корни системы уравнений с заданной точночтью путём бесконечных сходящихся процессов.

</td></tr>
</table>

Введём следующие обозначения:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n} = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n} = b_2$$
$$\ldots$$
$$\ldots$$
$$\ldots$$
$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn} = b_n$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}$$ - матрица коэффициентов

$$b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_n \end{bmatrix}$$ - столбец свободных членов

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{bmatrix}$$ - столбец неизвестных

Решение имеет место, если матрица A - неособенная, то есть

$$\det A = \Delta \neq 0$$
$$AX = B$$

$X = A^{-1}B$ - решение системы с помощью обратной матрицы

Сложность нахождения обратной матрицы для $n > 4$ заключается в большом времени нахождения A^{-1}.

Это обстоятельство обходится с помощью правила Крамера

$$x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta},$$

где Δ - определитель матрицы A

Δ_i - определитель матрицы, полученный из матрицы A путём замещения i-го столбца на столбец свободных членов B.

73 Прямой метод решения систем линейных уравнений

<u>Пример</u>: $$\begin{cases} 3{,}2x_1 - 1{,}5x_2 + 0{,}5x_3 = 0{,}90 \\ 1{,}6x_1 - 2{,}5x_2 - 1{,}0x_3 = 1{,}55 \\ 1{,}0x_1 + 4{,}1x_2 - 1{,}5x_3 = 2{,}08 \end{cases}$$

$$X = A^{-1}B, \quad \Delta = 27{,}55$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{7{,}85}{27{,}55} & \frac{-0{,}2}{27{,}55} & \frac{2{,}75}{27{,}55} \\ \frac{1{,}4}{27{,}55} & \frac{-5{,}3}{27{,}55} & \frac{4}{27{,}55} \\ \frac{9{,}06}{27{,}55} & \frac{-14{,}62}{27{,}55} & \frac{-5{,}6}{27{,}55} \end{bmatrix}$$

	$$X = A^{-1}B = \begin{bmatrix} 0{,}45281 \\ 0{,}04955 \\ -0{,}94936 \end{bmatrix}$$
74	Решение систем линейных уравнений по правилу Крамера
	<u>Пример</u>: $\begin{cases} 3{,}2x_1 - 1{,}5x_2 + 0{,}5x_3 = 0{,}90 \\ 1{,}6x_1 - 2{,}5x_2 - 1{,}0x_3 = 1{,}55 \\ 1{,}0x_1 + 4{,}1x_2 - 1{,}5x_3 = 2{,}08 \end{cases}$ $$\Delta = 27{,}55$$ $$\det_1 = \begin{bmatrix} 0{,}9 & -1{,}5 & 0{,}5 \\ 1{,}55 & -2{,}5 & -1{,}0 \\ 2{,}08 & 4{,}1 & -1{,}5 \end{bmatrix} = 12{,}475$$ $$\det_2 = \begin{bmatrix} 3{,}2 & 0{,}9 & 0{,}5 \\ 1{,}6 & 1{,}55 & -1{,}0 \\ 1{,}0 & 2{,}08 & -1{,}5 \end{bmatrix} = 1{,}365$$ $$\det_3 = \begin{bmatrix} 3{,}2 & -1{,}5 & 0{,}9 \\ 1{,}6 & -2{,}5 & 1{,}55 \\ 1{,}0 & 4{,}1 & 2{,}08 \end{bmatrix} = -26{,}155$$
75	Метод Гаусса. Схема единственного деления
	Наиболее распространённым приёмом решения системы линейных уравнений является метод Гаусса или метод последовательного исключения неизвестных. Рассмотрим для простоты систему линейных алгебраических уравнений 4-го порядка: $$\begin{cases} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 + a_{14}^{(0)}x_4 = a_{15}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)}x_1 + a_{22}^{(0)}x_2 + a_{23}^{(0)}x_3 + a_{24}^{(0)}x_4 = a_{25}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)}x_1 + a_{32}^{(0)}x_2 + a_{33}^{(0)}x_3 + a_{34}^{(0)}x_4 = a_{35}^{(0)} \\ a_{41}^{(0)}x_1 + a_{42}^{(0)}x_2 + a_{43}^{(0)}x_3 + a_{44}^{(0)}x_4 = a_{45}^{(0)} \end{cases}$$ 1. Выбираем <u>ведущий элемент</u> $a_{11}^{(0)} \neq 0$ 2. Поделив первое уравнение на $a_{11}^{(0)}$, получаем $$x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)}, \qquad (2)$$ где $a_{1j}^{(1)} = \dfrac{a_{1j}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$, $j = \overline{2{,}5}$, $a_{11} = 1$ 3. Исключаем переменную x_1 из всех последующих уравнений, начиная со второго, путём вычитания уравнения 2, умноженного на коэффициент, стоящий при x_1 в соответствующем уравнении. Получаем $$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = a_{25}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + a_{34}^{(1)}x_4 = a_{35}^{(1)} \\ a_{42}^{(1)}x_2 + a_{43}^{(1)}x_3 + a_{44}^{(1)}x_4 = a_{45}^{(1)} \end{cases},$$ где $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - a_{1j}^{(0)}a_{i1}^{(0)}$, $i = \overline{2{,}4}$, $j = \overline{2{,}5}$

4. Выбираем ведущий элемент во втором уравнении $a_{22}^{(1)} \neq 0$

и так далее.

Если $\begin{matrix} a_{11}^{(0)} \neq 0 \\ a_{22}^{(1)} \neq 0 \\ a_{33}^{(2)} \neq 0 \\ a_{44}^{(3)} \neq 0 \end{matrix}$, то получим систему

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 = a_{25}^{(2)} \\ x_3 + a_{34}^{(3)}x_4 = a_{35}^{(3)} \\ x_4 = a_{45}^{(4)} \end{cases}, \qquad (3)$$

то есть матрица A имеет диагональный вид:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & a_{14}^{(1)} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & 0 & 1 & a_{34}^{(3)} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Из системы 3 отыскиваем x_1, x_2, x_3, x_4 следующим образом

$$\begin{matrix} x_4 = a_{45}^{(4)} \\ x_3 = a_{35}^{(3)} - a_{34}^{(3)}x_4 \\ x_2 = a_{25}^{(2)} - a_{23}^{(2)}x_3 - a_{24}^{(2)}x_4 \\ x_1 = a_{15}^{(1)} - a_{12}^{(1)}x_2 - a_{13}^{(1)}x_3 - a_{11}^{(1)}x_4 \end{matrix}, \qquad (4)$$

Процесс приведения матрицы к треугольному виду 3 называется прямым ходом, а нахождение корней по 4 обратным ходом.

76

Трудоёмкость метода Гаусса

1. Прямой ход

$Q_1 = \dfrac{2}{3}n^3 + \dfrac{n^2}{2} - \dfrac{n}{6}$

2. Обратный ход

$Q_2 = n^2 - n$

Общее число выполняемых арифметических действий

$$Q = Q_1 + Q_2 = \frac{2}{3}n^3 + \frac{3}{2}n^2 - \frac{7}{6}n \approx \frac{2}{3}n^3$$

то есть для $n = 3$

$$Q = \frac{2}{3} \cdot 27 = 18$$

$n = 4$

$$Q = \frac{2}{3} \cdot 64 \approx 43$$

$n = 5$

$$Q = \frac{2}{3} \cdot 125 \approx 83$$

Предложенный метод Гаусса ориентирован на то, чтобы ведущие элементы не равнялись 0. А если на каком-то шаге возникает ситуация, что ведущий элемент равен 0, то тогда схема “формально” непригодна, хотя заданная система может иметь

	единственное решение.
77	Метод Гаусса. Схема с выбором главного элемента
	Если на каком-то шаге возникает ситуация, что ведущий элемент равен 0, то тогда схема “формально” непригодна, хотя заданная система может иметь единственное решение. Тогда применяют разновидность метод Гаусса -схема с выбором главного элемента: 1. Выбираем элемент a_{pq} - наибольший по модулю и неявляющийся свободным членом. 2. Вычисляем коэффициенты $$m_i = \frac{a_{iq}}{a_{pq}}, \text{ для всех } i \neq p$$ p-тая строка называется главной строкой. 3. Из каждой неглавной строки вычитаем главную строку, умноженную на m_i. В результате получим матрицу, у которой в q-ом столбце все коэффициенты нулевые. 4. Преобразуем матрицу следующим образом: отбрасываем p- (главную) строку и q-й столбец. Получим матрицу m_1. 5. Делаем подобные преобразования над матрицей m_1 до тех пор, пока не получим одну строку из двух столбцов, которая является главной. 6. Для определения x_i. Объединим все главные строки, начиная с последней. После надлежащего изменения неизвестных получается система с треугольной матрицей. При работе на ЭВМ при $n >> 0$ вывод главного элемента может оказаться достаточно трудоёмкой задачей. Поэтому практически в качестве главной строки берут первую строку, а в качестве главного элемента - наибольший по модулю элемент этой строки.
78	Достоинства метода Гаусса
	1. Если матрица вырождения, то перед исключением неизвестной главный элемент считается равным нулю => $\Delta = 0$ 2. С помощью метода Гаусса можно вычислить определитель $\Delta = a_{11} \cdot a_{22} \cdot \ldots a_{nn}$ треугольной матрицы. При большом числе неизвестных схема метода Гаусса, дающая точное решение, становится весьма сложной. В этих случаях для нахождения корней системы лучше пользоваться приближёнными численными методами.
79	Метод итераций
	Дана система уравнений $$AX = B$$ $$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$ Можно привести систему к такому виду, чтобы диагональные элементы были отличные от нуля, то есть $a_{ii} \neq 0$, тогда разрешая i-тое уравнение относительно x_i, получаем

	$$\begin{cases} x_1 = \beta_1 + \alpha_{12}x_2 + \ldots + \alpha_{1n}x_n \\ x_2 = \beta_2 + \alpha_{21}x_1 + \ldots + \alpha_{2n}x_n \\ \ldots \\ x_n = \beta_n + \alpha_{n1}x_1 + \ldots + \alpha_{nn-1}x_{n-1} \end{cases}, \quad (2)$$ где $\beta_i = \dfrac{b_i}{a_{ii}}$, $\alpha_{ij} = -\dfrac{a_{ij}}{a_{ii}}$, $i \neq j$ или $\alpha_{ij} = 0$ при $i = j$ $$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \ldots & \ldots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \ldots & \ldots & \alpha_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \alpha_{n1} & \ldots & \ldots & \alpha_{nn} \end{bmatrix}, \ \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \ldots \\ \beta_n \end{bmatrix}.$$ Тогда систему уравнений 2 можно записать в виде: $X = \beta + \alpha X$ - итерационная формула. Таким образом, выбрав начальные значения $X^{(0)}$ $$X^{(1)} = \beta + \alpha X^{(0)}$$ и так далее. Итерации останавливаются, когда $\lvert x_{i1} - x_i \rvert \leq \varepsilon$, $i = \overline{1,n}$ $$X^{(k+1)} = \beta + \alpha X^{(k)}$$
80	Сходимость метода итераций для решения системы алгебраических уравнений
	<u>Теорема</u>: Система уравнений имеет единственное решение и сходится при любом начальном значении $x(0)$ тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы α по модулю меньше 1. Если для системы уравнений $$X = \beta + \alpha X$$ выполнено хотя бы одно из условий: 1. $\sum_{j=1}^{n} \lvert \alpha_{ij} \rvert < 1$, $j = \overline{1,n}$ 2. $\sum_{i=1}^{n} \lvert \alpha_{ij} \rvert < 1$, $i = \overline{1,n}$ то процесс итерации сходится, независимо от выбора начального условия. Однако этой теоремой в общем случае очень тяжело воспользоваться, поэтому на практике пользуются другим правилом менее жёстким. Если эти условия выполняются, то в принципе логично выбрать для начальных значений. На практике в качестве начального приближения используют вектор свободных членов. Приведение линейной системы к виду, удобному для итерации. Теорема сходимости накладывает жёсткие условия к коэффициентам данной линейной системы. $$AX = B$$ Однако, если $\Delta A \neq 0$, то эту систему всегда можно привести к такому виду: $X = \alpha X + \beta$, чтобы удовлетворить условиям 1
81	<u>Приведение системы уравнений к удобному для итерации виду</u>

Первый способ.

Дано: $AX = B$

Домножим это уравнение на матрицу $D = A^{-1} - \varepsilon$, где $\left\| [\varepsilon_{ij}] \right\| << 0$

$$(A^{-1} - \varepsilon)AX = DB$$

$$X - \varepsilon AX = DB \qquad ,$$

$$X = \varepsilon AX + DB => X = \alpha X + \beta$$

где $\alpha = \varepsilon A, \beta = DB$

Второй способ.

Каждое i-ое уравнение делится на a_{ii}

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - a_{i1}x_1 - \ldots - a_{in}x_n)$$

Тогда $\alpha_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}$, $i \neq j$, $\alpha_{ii} = 0$.

Тогда уравнение сходимости имеет вид

$$\sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq 1, \; i = \overline{1,n}$$

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq 1, \; j = \overline{1,n}$$

Эти неравенствабудут выполняться, если диагональные элементы будут удовлетворять условиям:

$$|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|, \; i = \overline{1,n},$$

то есть если модули диагональных коэффициентов для которого уравнения системы больше суммы модулей всех остальных коэффициентов.

82 Достоинства метода итераций

1. Если итерации сходятся быстро, то есть для сходимости требуется менее n итераций, то выигрыш во времени по сравнению с методом Гаусса:

$$Q_и = l \cdot n^2, \; l \text{ - число итераций}$$

$$Q_Г = \frac{2}{3}n^3$$

2. Погрешности округления в методе итераций сказывается значительно меньше, чем в методе Гаусса. Кроме того, метод итерации является самоисправляющимся, то есть отдельная ошибка запрещается в вычислениях, не отражаясь на конечном результате, то есть ошибочное приближение можно рассматривать как новый начальный вектор.
3. Метод итераций становится особенно выгодным при решении систем, у которых значительное число коэффициентов равно нулю.
4. Метод итераций легко программируется.

83 Метод Зейделя

Является модификацией метода итераций. Основная идея заключается в том, что при вычислении $(k+1)$-го приближения i-го корня используются уже вычисленные $(k+1)$ приближённые корни $1 \ldots i-1$.

Дано: $x_i = \beta_i + \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij} x_j$, $i = \overline{1,n}$

	Выбираем начальное приближение: $$x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$$ На k-том шаге, согласно Зейделю строим приближение по следующим формулам: $$x_1^{(k+1)} = \beta_1 + \sum_{j=1}^{n} \alpha_{1j} x_j^{(k)}$$ $$x_2^{(k+1)} = \beta_2 + \alpha_{21} x_1^{(k+1)} + \sum_{j=2}^{n} \alpha_{2j} x_j^{(k)}$$ … $$x_i^{(k+1)} = \beta_i + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^{n} \alpha_{ij} x_j^{(k)}$$ … $$x_n^{(k+1)} = \beta_n + \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{ij} x_j^{(k+1)} + \alpha_{nn} x_n^{(k)}$$ 1. Метод Зейделя даёт полную сходимость по сравнению с методом итерации, но приводящий к громоздким вычислениям. 2. Теорема: Для существования единственного решения системы сходимости метода Зейделя достаточно выполнение хотя бы одного из двух условий: 1) $\sum_{j \neq i} \lvert a_{ij} \rvert < \lvert a_{ii} \rvert,\ i = \overline{1,n}$ 2) матрица A - симметричная положительно определённая (все её соответственно значения положительны)

3.5.2 Шифр и наименование компетенции ОПК-5 - _Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности_

Номер вопроса (задачи, задания)	Текст вопроса (задачи, задания)
84	Постановка задачи для численного решения систем нелинейных уравнений
	Дана система линейных уравнений $$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \qquad (1)$$ Введём обозначения: вектор X - вектор аргументов: $$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$ Аналогично вектор функций

$$F = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}$$

Тогда систему 1 можно переписать в виде:

$$F(X) = 0$$

Система линейных уравнений в общем виде неразрешима.

85	Метод Ньютона для решения систем нелинейных уравнений

Для уравнения имеет вид:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

По анологии метод Ньютона для системы линейных уравнений

$$X(k+1) = X(k) - W^{-1}(X(k))F(X(k)),$$

где $X(k)$ - вектор аргументов на k-ом шаге итерации

$F(X(k))$ - значения вектора функций (системы уравнений) при $X(k)$

$W^{-1}(X(k))$ - обратная матрица Якоби

W - матрица, Якоби-матрица, состоящая из частных производных

$$W = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

Вполне естественно очевидно, что формулу Ньютона можно применять в том случае, когда Якоби-матрица неособенная, невырождённая, то есть $\Delta W \neq 0$.

Пример:

Дано: $\begin{cases} x_1 + 3\lg x_1 - x_2^2 = 0 \\ 2x_1^2 - x_1 x_2 - 5x_1 + 1 = 0 \end{cases}$

Матрица Якоби

$$W(X) = \begin{bmatrix} \frac{3}{x_1} + 1 & -2x_2 \\ 2x_1 - x_2 - 5 & -x_1 \end{bmatrix}$$

Превоначальная оцнка

$$X(0) = \begin{bmatrix} 3{,}4 \\ 2{,}2 \end{bmatrix}$$

1) $W(X(0)) = \begin{bmatrix} 1{,}882 & -4{,}4 \\ 6{,}4 & -3{,}4 \end{bmatrix}$ $\quad \Delta = 21{,}761$

2) $W^{-1}(X(0)) = \begin{bmatrix} -0{,}156 & 0{,}202 \\ -0{,}294 & 0{,}086 \end{bmatrix}$

3) $F(X(0)) = \begin{bmatrix} 0{,}154 \\ -0{,}36 \end{bmatrix}$

$$X(1)=\begin{bmatrix}3{,}4\\2{,}2\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-0{,}156 & 0{,}202\\-0{,}294 & 0{,}086\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0{,}154\\-0{,}36\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3{,}4\\2{,}2\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-0{,}097\\-0{,}076\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3{,}497\\2{,}276\end{bmatrix}$$

и так далее

Результаты итераций лучше всего сводить в таблицу

i	x_1	Δx_1	x_2	Δx_2
0	3,4	0,097	2,2	0,076
1	3,497		2,276	
2				

Прекращаем вычисления, когда $\max(|\Delta x_1|,|\Delta x_2|)\le \varepsilon$ - заданная точность.

Как и в любых численных методах встают следующие задачи: о сходимости метода и о выборе начального значения.

86 Сходимость метода Ньютона

Вопросами сходимости метода Ньютона занимались такие учёные, как Виллус, Стёпин, Островский, Канторович и другие. Мы же будем рассматривать сходимость, единственность корня и выбор начального условия по Канторовичу. При рассмотрении этих характеристик метода ипользуются понятия нормы. Поэтому прежде дадим определения :

M-нормой - называется максимальная сумма модулей элементов по строкам.

L-нормой - называется максимальная сумма модулей элементов по столбцам.

K-нормой - нызывается квадратный корень из суммы квадратов модулей элементов матрицы

$$\|A\|_m=\max_i\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\|A\|_l=\max_j\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\|A\|_k=\sqrt{\sum_{i,j}|a_{ij}|^2}$$

<u>Пример</u>:

$$\begin{vmatrix}1 & 4 & 5\\2 & 1 & 0\\3 & 5 & 1\end{vmatrix}$$

$$\|A\|_m=\max(10{,}3{,}9)=10$$

$$\|A\|_l=\max(6{,}10{,}6)=10$$

$$\|A\|_k=\sqrt{82}\approx 9{,}06$$

Для оценки матриц, используемых в методе Ньютона для нелинейных систем, будем использовать m-нормы, а именно

$$\|F(x)\|=\max_i|f_i(x)|$$

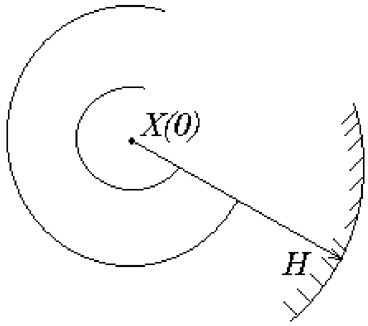
$$\|F'(x)\|=\max_i\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right|$$

87 Теорема о существовании корней и сходимости процесса Ньютона

Пусть дана нелинейная система уравнений

$$F(X)=0,$$

	где $F(X)=\begin{bmatrix} f_1(x_1,x_2,\dots,x_n) \\ f_2(x_1,x_2,\dots,x_n) \\ \dots \\ f_n(x_1,x_2,\dots,x_n) \end{bmatrix}$ - вектор-функция определена и непрерывна вместе со своими частными производными первого и второго порядков в некоторой области ω. Положим, что $X(0)$ - есть точка, лежащая в ω вместе со своей замкнутой H-окрестностью. При этом выполняются следующие условия: 1) матрица Якоби при $X = X(0)$ имеет обратную функцию $\Gamma_0 = W^{-1}(X(0)) \quad \lVert \Gamma_0 \rVert \le A_0$ 2) $\lVert \Gamma_0 F(X(0)) \rVert \le B_0$ 3) $\sum_{k=1}^{n} \left\lvert \frac{\partial^2 f_i(X)}{\partial x_j \partial x_k} \right\rvert \le C$ 4) постоянные A_0, B_0, C удовлетворяют неравенству $\mu_0 = 2nA_0B_0C \le 1$ Тогда процесс Ньютона при начальном приблежении $X(0)$ сходится к решению X^* - есть решение такое, что $\lVert X^* - X(0) \rVert \le 2B_0 \le H$ Для проверки условия $\lVert \Gamma_0 F(X(0)) \rVert = \lVert X^{(1)} - X(0) \rVert \le B_0$ даёт оценку расходимости начального и первого приближения.
88	Быстрота сходимости, единственность решения, выбор начального условия процесса Ньютона
	Если выполнимы все четыре условия теоремы 1, то для последовательных приближений $X(k)$, $k = 0,1,2,3,\dots$ справедливо неравенство: $\lVert X^k - X(k) \rVert \le \left(\frac{1}{2}\right)^{k-1} \mu_0^{2^k-1} B_0,$ где X^k - искомое решение, а $\mu_0 = 2nA_0B_0C \le 1$ При $\mu_0 < 1$ сходимость метода - сверхбыстрая. Если выполнимы все четыре условия, в области $\lVert X - X(0) \rVert \le 2B_0$ то содержится единственное решение системы Если выполнимы все четыре условия и $\frac{2}{\mu_0} B_0 \le H$, то процесс сходится к единственному решению X^k в основной области $\lVert X - X(0) \rVert \le 2B_0$ при любом выборе начального условия из области $\lVert X'(0) - X(0) \rVert \le \frac{1-\mu}{2\mu_0} B_0$

	
89	Модифицированный метод Ньютона. Метод итераций
	При использовании метода Ньютона наиболее трудоёмким является процесс вычисления обратной матрицы Якоби. Если матрица $W(X(0))$ невырождённая для некоторого приближения $X(0)$, и $X(0)$ достаточно близко к X^* (искомому решению), то можно использовать модифицированный метод Ньютона. $$X(k+1) = X(k+1) - W'(X(0))F(X(k))$$ Метод итераций Дана система нелинейных уравнений: $$F(X) = 0$$ или $$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \qquad (1)$$ Допустим, что систему 1 можно привести к виду: $$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases} \qquad (2)$$ Введём обозначения: $$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \varphi = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \dots \\ \varphi_n \end{bmatrix},$$ Можно систему уравнений 2 переписать в виде: $$X = \varphi(X)$$ Приведённое матричное уравнение и есть формула метода итераций
90	Необходимое и достаточное условие сходимости процесса итерации и его следствие
	Пусть функции $\varphi(x)$ и $\varphi'(x)$ непрерывны в области G, причём в области G выполнимо неравенство: $$\Vert \varphi'(X) \Vert_m \le q < 1,$$

где q - некоторая константа.

Если последовательные приближения

$$X(k+1) = \varphi(X(k)), \qquad k = 0,1,2,\ldots$$

не выходят из области G, то этот процесс сходится к единственному решению системы.

Следствие:

$$\sum_{j=1}^{n} \left| \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} \right| \le q_i < 1$$

оценка пиближённо

$$\left\| X^* - X(k) \right\|_m \le \frac{q}{1-q} \left\| X(1) - X(0) \right\|_m$$

На практике лучше всего рассматривать матрицу с элементами

$$M_{ki} = \max \left| \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} \right|$$

Для сходимости должно выполнятся условие

1) $\sum_{i=1}^{n} M_{ki} < 1$

2) $\sum_{k=1}^{n} M_{ki} < 1$

3) $\sum_{k,i}^{n} M_{ki}^2 < 1$

91 Метод скорейшего спуска (градиентный метод)

Дана система линейных уравнений:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ \ldots \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \end{cases} \qquad (1)$$

В матричном виде

$$F(X) = 0$$

Считаем, что $f_i(x)$ действительны и непрерывно дифференцируемы в их общей области определения.

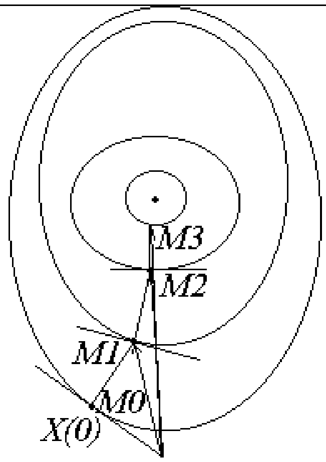
Рассмотрим функцию

$$U(X) = \sum_{i=1}^{n} \left[f_i(X) \right]^2 = F^T(X) F^{\bar{T}}(X) = \left(F(x), F(X) \right) \qquad (2)$$

Очевидно, что если мы найдём решение системы уравнений 1 X^*, то это решение является и решением системы уравнений 2 и наоборот.

Предполагаем, что система 1 имеет лишь одно изолированное решение, представляющего собой точку строго минимум функции $U(X)$. Таким образом задача сводится к нахождению минимум функции $U(X)$ в n-мерном пространстве.

$$E_n = \left\{ x_1, x_2, \ldots, x_n \right\}$$



Берём точку $X(0)$ - нулевое приближение. Через точку $X(0)$ проходит поверхность уровня и x. Если $X(0)$ близка X^*, то поверхность $x = U(X) = U(X(0))$ будет похожа на элипсоид.

Из точки $X(0)$ движемся по нормали к поверхности $U(X(0))$ до тех пор, пока эта нормаль не коснётся $X(1)$ другой поверхности:

$$U(X) = U(X(1))$$

И так далее.

Так как $U(X(0)) > U(X(1)) > U(X(2)) > \ldots$, то двигаясь таким образом, мы быстро приближаемся к точке с минимальным значением U, которая соответствует некоему корню X^*.

92 Обыкновенные дифференциальные уравнения

Обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) встречаются при описании движения системы взаимодействующих материальных носителей (механике, химической кинетике, электрических цепях, сопротивлении материалов и многих других явлениях жизни).Ряд важнейших задач сводится к задачам с обыкновенными дифференциальными уравнениями, а именно теория автоматического управления базируется на ОДУ, а также и другие курсы специальности АЭП

Простейшим ОДУ является уравнение 1-го порядка:

$$\frac{dy}{dx} = y' = f(x, y)$$

ОДУ n-го порядка имеет вид:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = y^n = f(x, y, y', y'', ..., y^{(n-1)}$$

Однако любое уравнение n-го порядка можно свести к системе из n уравнений 1-го порядка:

$$\begin{cases} y_k'(x) = y_{k+1}(x) \\ \ldots \\ y_{n-1}' = f(x, y_0, y_1, ..., y_{n-1}) \end{cases} \qquad k = \overline{0, n-2}$$

или

$$\begin{cases} y_0'(x) = y_1(x) \\ y'(x) = y_2(x) \\ \ldots \\ y_{n-1}'(x) = f(x, y_0, y_1, ..., y_{n-1}) \end{cases}$$

Таким образом, решение дифференциального уравнения n-го порядка сводится к решению системы дифференциальных уравнений 1-го порядка (количество дифференциальных уравнений в системе = n).

Если ввести следующие обозначения:

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} \qquad F = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix},$$

то систему дифференциальных уравнений можно переписать в векторно-матричном виде:

$$Y'(x) = F(x, Y(x)) \qquad (1)$$

Известно, что система n-го порядка имеет множество решений,, которые в общем случае зависят от постоянных C, общее количество которых -n. Общее решение системы ОДУ может быть записано в виде:

$$Y = Y(x, C) \qquad \text{,где} \qquad C = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix}$$

Для определения значения этих параметров, т.е. выделения единственного решения необходимо учитывать дополнительные условия. В зависимости от выбора дополнительных условий определены следующие типы задач для обыкновенных дифференциальных уравнений:

- задача Коши;
- краевая задача;
- задача на собственные значения.

93 Задача Коши. Краевая задача. Задача на собственные значения.

Задача Коши, или задача с начальными условиями, имеет следующие дополнительные условия:

$$Y(x_0) = Y_0$$
$$x \in [x_0, x_n]$$

Краевая задача.

Когда дополнительные условия заданы как в точке x_0, так и в точке x_n.

Задача на собственные значения.

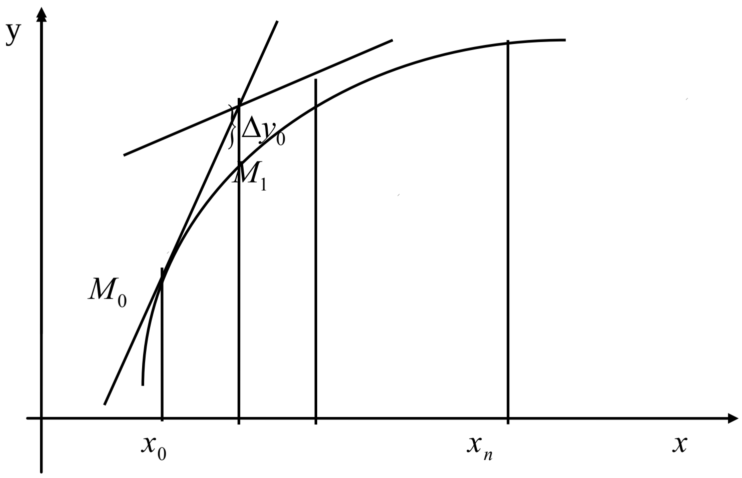
Если функция $Y(x)$ зависит от параметров $\lambda_k \quad k = \overline{1,l}$:

$$Y(x) = F(x, Y, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_l),$$

$$\text{где} \qquad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} \qquad F = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

Число дополнительных условий должно быть соответственно $n + l$. Функции $Y_k(x), \lambda_r$, где $k = \overline{1,n}$; $r = \overline{1,l}$ удовлетворяющее всем уравнениям, называются *собственными дифференциальными* или *собственными значениями задачи.*

94	Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений
	Обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) могут быть решены следующими методами: 1. аналитическими; 2. численными; 3. графическими; 4. приближенными. Аналитические методы дают решение в виде аналитического выражения. Графические методы дают приближенное решение в виде графика. Численные методы дают частное решение для определенных $x \in [x_0, x_n]$ в виде таблицы, Численные методы применяются только к корректно поставленным задачам, т.е. к таким, у которых малое изменение начальных значений, приводит к малому изменению интегральных кривых. Пусть дано следующее ОДУ: $y'(x) = y - x$. Необходимо решить задачу Коши для $0 \le x \le 100$. Начальные условия имеют вид: $y(0) = 1$ Общее решение имеет вид: $$y(x, c) = 1 + x + ce^x$$ при $y(0) = 1$ $c = 0$ решение $y(100) = 101$. Однако при малом изменении начальных условий: $y(0) = 1{,}000001 \Rightarrow c = 10^{-6}$ решение в точке $x = 100$: $y(100) \approx 2.7*10^{37}$. То есть имеет место плохо обусловленная задача
95	Метод Эйлера
	В основе метода Эйлера (метод ломаных) лежит идея графического построения решения дифференциальных уравнений, однако этот метод дает одновременно и способ нахождения искомой функции в численной (табличной) форме. Пусть дано дифференциальное уравнение: $$y' = f(x, y)$$ с начальными условиями: $$y(x_0) = y_0 .$$ Выбрав достаточно малый шаг h, строится система равноотстоящих точек $x_i = x_0 + ih \quad (i = \overline{1, n})$. В методе Эйлера приближенные значения $y(x_i) \approx y_i$ вычисляются последовательно по формулам: $$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y\ ) \quad i = \overline{1, n} .$$ При этом искомая интегральная кривая $y = y(x)$, проходящая через точку $M_0(x_9, y_0)$, заменяется ломанной $M_0M_1...M_n$ с вершинами $M_ш(x_i, y_i) \quad (i = \overline{1, n})$; каждое звено M_iM_{i+1} этой ломаной, называемой *ломаной Эйлера,* имеет направление, совпадающее с направлением той интегральной кривой уравнения $y' = f(x, y)$, которая проходит через точку M_i



Метод очень прост в реализации, но обладает малой точностью, поскольку погрешность каждого нового шага систематически возрастает. Существует модификации метода, повышающие его точность, - методы *Эйлера-Коши – первая и вторая улучшенные формулы.*

96 Первая улучшенная формула Эйлера

Пусть дано дифференциальное уравнение:

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

с начальными условиями:

$$y(x_0) = y_0 .$$

Решение в каждой точке x_i определяется по формуле:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{1+1/2}, y_{i=1/2}) ,$$

где

$$x_{i+1/2} = x_i + h/2$$

$$y_{i+1/2} = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i) .$$

Геометрически это означает, что отрезок ломанная между точками M_i, M_{i+1} заменяется на два отрезка $[M_i, M_{i+1/2}]$, $[M_{i+1/2}, M_{i+1}]$. Направление первого отрезка совпадает с направлением интегральной кривой в точке
(x_i, y_i), а направление второго отрезка определяется направлением, интегральной кривой в вспомогательной точке $(x_{i+1/2}, y_{i+1/2})$.

Пример.

Пусть дано дифференциальное уравнение:

$$y' = 0{,}9x + y$$

$$x \in [0;0.2] \quad h = 0.1$$

с начальными условиями:

$$y(0) = 1 .$$

$i = 1$

$x_{0+1/2} = x_0 + h/2 = 0 + 0.05 = 0.05$

$y_{0+1/2} = y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0, y_0) = 1 + 0.05 \cdot (0.9 \cdot 0 + 1) = 1.05$

$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_{0+1/2}, y_{0+1/2}) = 1 + 0.1 \cdot (0.9 \cdot 0.05 + 1.05) = 1.109$

$i = 2$

$x_{1+1/2} = x_1 + h/2 = 0.1 + 0.05 = 0.15$

$y_{1+1/2} = y_1 + \frac{h}{2} \cdot f(x_1, y_1) = 1.109 + 0.05 \cdot (0.9 \cdot 0.1 + 1.109) = 1.169$

$y_2 = y_1 + h \cdot f(x_{1+1/2}, y_{1+1/2}) = 1.109 + 0.1 \cdot (0.9 \cdot 0.15 + 1.169) = 1.239$

Решение ОДУ имеет вид:

x	y
0.0	1.000
0.1	1.109
0.2	1.239

97 Вторая улучшенная формула Эйлера

Пусть дано дифференциальное уравнение:

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

с начальными условиями:

$$y(x_0) = y_0 .$$

Решение в каждой точке x_i определяется по формуле:

$$y_{i+1} = y_i + h\frac{f(x_i, y_i) + f(x^*_{i+1}, y^*_{i+1})}{2},$$

где

$$x^*_{i+1} = x_i + h$$

$$y^*_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

Геометрически это означает, что определяется направление интегральной кривой в исходной точке (x_i, y_i) и во вспомогательной точке (x_{i+1}, y_{i+1}), а в качестве окончательного направления ломаной берется среднее этих направлений.

Пример.

Пусть дано дифференциальное уравнение:

$$y' = 0{,}9x + y$$

$$x \in [0;0.2] \quad h = 0.1$$

с начальными условиями:

$$y(0) = 1.$$

$i = 1$

$x^*_1 = x_0 + h = 0 + 0.1 = 0.1$

$y^*_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 1 + 0.1 \cdot (0.9 \cdot 0 + 1) = 1.1$

$y_1 = y_0 + \frac{h}{2} \cdot (f(x_0, y_0) + f(x^*_1, y^*_1)) = 1 + 0.05 \cdot ((0.9 \cdot 0 + 1) + (0.9 \cdot 0.1 + 1.1)) \approx 1.110$

$i = 2$

$x^*_2 = x_1 + h = 0.1 + 0.1 = 0.2$

$y^*_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1) = 1{,}110 + 0.1 \cdot (0.9 \cdot 0.1 + 1.110) = 1.239$

$y_2 = y_1 + \frac{h}{2} \cdot (f(x_1, y_1) + f(x^*_2, y^*_2)) = 1.110 + 0.05 \cdot ((0.9 \cdot 0.1 + 1.110) + (0.9 * 0.2 + 1.239)) = 1.24$

Решение ОДУ имеет вид:

x	y
0.0	1.000
0.1	1.110
0.2	1.241

98 Метод Рунге-Кутта

Метод Рунге-Кутта q-го порядка имеет вид:

$$y(x+h) = y(x) + \sum_{i=1}^{q} p_i k_i(h),$$

где при фиксированных значениях некоторых параметров:

$$\alpha_2, \alpha_3, ..., \alpha_q; p_1, p_2, p_3, ..., p_q; \beta_{ij} \quad 0 < j \le i \le q$$

последовательно вычисляются:

$$k_1(h) = hf(x, y)$$
$$k_2(h) = hf(x + \alpha_2 h, y + \beta_{21} k_1(h))$$
$$...$$
$$k_q(h) = hf(x + \alpha_q h, y + \beta_{q1} k_1(h) + \beta_{q2} k_2(h) + ... + \beta_{qq} k_q(h))$$

Наибольшее применение на практике получил метод Руте-Кутта 4-го порядка:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i,$$

где

$$k_1 = hf(x, y)$$
$$k_2 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_1}{2})$$
$$k_3 = hf(x + \frac{h}{2}, y + \frac{k_2}{2})$$
$$k_4 = hf(x + h, y + k_3)$$
$$\Delta y = \frac{1}{6}(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4)$$

Метод Рунге-Кутта имеет ряд важнейших достоинств:

1) высокая точность
2) явная схема вычислений y_{n+1} за определенное количество шагов и по определенным формулам.
3) возможен переменный шаг, т.е. можно сменить шаг, где функция быстро меняется.
4) легко оформляется.

99 Постановка задачи обработки экспериментальных данных

Пусть в результате измерений в процессе опыта получена таблица некоторой зависимости:

x	x_1	x_2	…	x_n
F(x)	y_1	y_2	…	y_n

Необходимо найти формулу, выражающую эту зависимость аналитически.

Необходимо отметить, что такая постановка задачи соответствует постановке задачи интерполяции. Однако в теории обработки экспериментальных данных методы отличаются от методов интерполяции, ранее рассмотренных.

Интерполяционные формулы позволяют построить полиномы, значения которых в узловых точках x_1 совпадают со значениями y_1. Однако такое совпадение в общем случае не означает совпадение характеров поведения исходной и интерполирующей функции. Требования неукоснительного совпадения значений исходной и интерполирующей функции может оказаться тем более неоправданным, если значения y_1 получены в результате измерений и являются сомнительными. Это во-первых.

Во-вторых, задача интерполяции известными методами, как правило, решается для небольшого отрезка, и найденная, интерполяционная функция может оказаться непригодной для другого отрезка или даже для большего отрезка.

Исходя из вышесказанного, следует уточнить задачу методов обработки экспериментальных данных. По заданным табличным данным необходимо найти функцию заданного вида: $y = F(x)$, которая в точках x_i принимает значения как можно *более близкие* к табличным значениям y_i.

Практически вид приближающей функции F можно определить следующим образом. Строится точечный график функции, заданной таблично, а затем проводиться плавная кривая, по возможности *наилучшим образом* отражающая характер расположения точек. По полученной таким образом кривой устанавливается вид приближающей функции (обычно из числа простых по виду аналитических функций).

Как правило, перед тем, как решить такую задачу необходимо ответить на четыре вопроса:

1) Какие узлы будут использоваться?

2) Какую аналитическая функция будет использоваться?

3) Какой критерий согласия будет использоваться?

4) Какую точность необходимо достичь?

100 Узловые точки и классы функций

УЗЛОВЫЕ ТОЧКИ

В принципе это вопрос статистики, а именно той области, которая называется "планированием эксперимента".

На практике узловые точки заданы внешними обстоятельствами или используются равноотстоящие точки.

Если же существует возможность выбора точек, то выбор осуществляется по формуле Чебышева, как и в методах интерполяции.

	КЛАСС ФУНКЦИЙ Выбор вида функции осуществляется исходя из общей задачи, в рамках которой решается задача обработки экспериментальных данных. В качестве функции приближения могут быть использованы следующие элементарные функции: - степенная $F(x) = ax^m;$ - показательная $F(x) = ae^{mx};$ - дробно-линейная $F(x) = \frac{1}{ax+b};$ - логарифмическая $F(x) = a\ln x + b;$ - гиперболическая $F(x) = \frac{a}{x} + b;$ - дробно-рациональная $F(x) = \frac{x}{ax+b};$ - линейная $F(x) = ax + b;$ - квадратный трехчлен $F(x) = ax^2 + bx + c;$
101	Критерии согласия
	Что означает математически наилучшее приближение? Это означает выбрать критерий согласия, который является функцией невязки узловых точек и значениями аппроксимирующей функции: $J = J(F(x_i) - y_i).$ Выбор наилучшей функции осуществляется по минимуму этого критерия. Существуют три наиболее широко распространенных критерия согласия: - среднеквадратичный; - минимаксный или Чебышева; - вероятностно-зональный. СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫЙ КРИТЕРИЙ Предполагает минимизацию суммы квадратов ошибки в узловых точках: $J = \sum_{i=1}^{n} (F(x_i) - y_i)^2,$ где y_i -значение исходной функции в точке x_i (табличное);

$F(x_i)$ -значение аппроксимирующей функции.

Среднеквадратичный критерий позволяет получить сглаживание кривой, то есть позволяет отфильтровать зашумленные данные, не требуя никакой дополнительной информации о шумовых характеристиках помех.

МИНИМАКСНЫЙ КРИТЕРИЙ ИЛИ КРИТЕРИЙ ЧЕБЫШЕВА

Минимаксный критерий Чебышева определяется как:

$$J = \max\left|F(x_i) - y_i\right|$$

Если применение среднеквадратичного критерия уменьшает среднеквадратичную ошибку, при этом допуская отдельные большие ошибки, то чебышевское приближение - минимаксное - уменьшает экстремальную наибольшую ошибку. По этому этот критерий используется, когда необходимо при аппроксимации избежать больших ошибок.

Минимаксный критерий также не использует дополнительную информацию о шумовых характеристиках помех.

ВЕРОЯТНОСТНО-ЗОНАЛЬНЫЙ КРИТЕРИЙ

К данным критериям относится целая группа критериев. Данные критерии используют (требуют) дополнительную информацию о шумовых характеристиках объекта:

- обобщенный метод наименьших квадратов - ковариационные матрицы шума;

- максимальное правдоподобие - распределение вероятностей и т.д.

102 Метод наименьших квадратов

Пусть задана таблица измерений:

x_i	x_1	x_2	…	x_n
F(x)	y_1	y_2	…	y_n

Тогда задача формулируется следующим образом: для функции $F(x_i)$, заданной таблицей, найти функции F определенного вида так, чтобы сумма квадратов:

$$J = \sum (F(x_i) - y_i)^2 \to \min .$$

В качестве приближающих функций в зависимости от характера точечного графика функции f могут быть выбраны функции различных классов. Когда осуществлен выбор приближающей функции, то задача приближения сводится к определению значения этих параметров.

	Рассмотрим задачу в общем виде. Приближающая функция имеет общий вид: $$F(x,a,b,c)$$ Сумма квадратов: $$\sum_{i=1}^{n}(y_i - F(x_i,a,b,c))^2 = \Phi(a,b,c)$$ Чтобы найти минимум функции $\Phi(a,b,c)$, используем необходимое условие экстремума: $$\frac{d\Phi}{da}=0$$ $$\frac{d\Phi}{db}=0$$ $$\frac{d\Phi}{dc}=0$$ т. е. $$\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}(y_i - F(x_i,a,b,c)\cdot F_a^{'}(x_i,a,b,c)=0\\ \sum_{i=1}^{n}(y_i - F(x_i,a,b,c)\cdot F_b^{'}(x_i,a,b,c)=0\\ \sum_{i=1}^{n}(y_i - F(x_i,a,b,c)\cdot F_c^{'}(x_i,a,b,c)=0\end{cases}$$ Решив эту систему трех уравнений с тремя неизвестными а, в, с мы и получили конкретный вид функции F(x, a, b, c). Естественно, что $F(x_i)$ отличается от y_i , но отношения $$y_i - F(x_i,a,b,c) = \varepsilon_i, где \quad i=\overline{1,n}$$ будут минимальны в среднеквадратичном случае.
103	Метод наименьших квадратов для линейной функции
	$$F(x,a,b)=ax+b$$ $$\frac{dF}{da}=x$$ $$\frac{dF}{db}=1$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)\cdot x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_i x_i \cdot y_i - a\sum_i x_i^2 - b\sum_i x_i = 0 \\ \sum_i y_i - a\sum_i x_i - nb = 0 \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n, получается:

$$\begin{cases} a\cdot\frac{1}{n}\sum_i x_i^2 + b\cdot\frac{1}{n}\sum_i x_i = \frac{1}{n}\sum_i x_i\cdot y_i \\ a\cdot\frac{1}{n}\sum_i x_i + b = \frac{1}{n}\sum_i y_i \end{cases}$$

Введем обозначения:

$$\frac{1}{n}\sum_i x_i = M_x$$

$$\frac{1}{n}\sum_i y_i = M_y$$

$$\frac{1}{n}\sum_i y_i x_i = M_{xy}$$

$$\frac{1}{n}\sum_i x_i^2 = M_{x^2}$$

Таким образом, получается система линейных уравнений с неизвестными: a и b:

$$\begin{cases} a\cdot M_{x^2} + b\cdot M_x = M_{xy} \\ a\cdot M_x + b = M_y. \end{cases}$$

Разрешив данную систему уравнений относительно неизвестных параметров a и b, определим искомую функцию $F(x,a,b) = ax + b$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	xy	x^2	$F(x)$	$e = y - F(x)$	e^2
x_1	y_1	x_1y_1	x_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	x_2y_2	x_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2

x_n	y_n	$x_n y_n$	x_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
M_x	M_y	M_{xy}	M_x			E

Значение *E* определяет близость аппроксимирующей функции к исходной. *E* определяется по следующей формуле:

$$E = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} e_i^2}}{n}$$

Естественно, чем меньше *E*, тем аппроксимирующая функция ближе к исходной функции.

104 Метод наименьших квадратов для квадратного трехчлена

$$F(x,a,b,c) = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$$

$$\frac{dF}{da} = x^2$$

$$\frac{dF}{db} = x$$

$$\frac{dF}{dc} = 1$$

$$\begin{cases} \sum (y_i - a \cdot x_i^2 - b \cdot x_i - c) \cdot x_i^2 = 0; \\ \sum (y_i - a \cdot x_i^2 - b \cdot x_i - c) \cdot x_i = 0; \\ \sum (y_i - a \cdot x_i^2 - b \cdot x_i - c) = 0. \end{cases}$$

После преобразования получается система линейных уравнений с неизвестными: a, b, c.

$$\begin{cases} M_{x^4} \cdot a + M_{x^3} \cdot b + M_{x^2} \cdot c = M_{x^2 \cdot y}; \\ M_{x^3} \cdot a + M_{x^2} \cdot b + M_x \cdot c = M_{x \cdot y}; \\ M_{x^2} \cdot a + M_x \cdot b + c = M_y. \end{cases}$$

Разрешив данную систему уравнений относительно неизвестных параметров a, b и c, определим искомую функцию $F(x,a,b,c) = ax^2 + bx + c$.

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x		xy	x^2	x^3	x	x^2	$F(x$	$e = y - F($	e
x		$x_1 y$	x_1^2	x_1^3	x	x_1^2	$F(x$	e_1	e
x		x_2	x_2^2	x_2^3	x	x_2^2	$F(x$	e_2	e
x		x_n	x_n^2	x_n^3	x	x_n^2	$F(x$	e_n	e
M		M	M	M	M	M			E

105 Метод наименьших квадратов для степенной функции

Степенная функция имеет вид:

$$F(x,a,m) = ax^m$$

Если прологарифмировать данное уравнение, то можно получить следующее:

$$ln(F(x)) = ln(a) + m \cdot ln(x)$$

Введя новые переменные:

$$A = m$$
$$B = ln(a)$$
$$u = ln(x) \quad ,$$
$$\phi(x) = ln(F(x))$$

получим следующее линейное уравнение:

$$\phi(u) = Au + B\,.$$

Определив параметры *A* и *B* (см. линейную функцию), можно определить параметры степенной функции:

$$m = A$$
$$a = e^B$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$u = ln($	$\phi = ln($	$u\phi$	u^2	$F(x)$	$e = y - F($	e^2
x_1	y_1	u_1	ϕ_1	$u_1\phi_1$	u_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	u_2	ϕ_2	$u_2\phi$	u_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2

x_n	y_n	u_n	ϕ_n	$u_n\phi_n$	u_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
		M_u	M_ϕ	$M_{u\phi}$	M_{u^2}			E

Следует заметить, что данный алгоритм справедлив только для положительных значений *x* и *y*.

106 Метод наименьших квадратов для показательной функции

Показательная функция имеет вид:

$$F(x,a,m) = a \cdot e^{m \cdot x}$$

Если прологарифмировать данное уравнение, то можно получить следующее:

$$ln(F(x)) = ln(a) + m \cdot x$$

Введя новые переменные:

$$A = m$$
$$B = ln(a) \quad ,$$
$$\phi(x) = ln(F(x))$$

получаем следующее линейное уравнение:

$$\phi(x) = Ax + B$$

Определив параметры *A* и *B* (см. линейную функцию), можно определить параметры степенной функции:

$$m = A$$
$$a = e^B$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$\phi = ln(y)$	$x\phi$	x^2	$F(x)$	$e = y - F(x)$	e^2
x_1	y_1	ϕ_1	$x_1\phi_1$	x_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	ϕ_2	$x_2\phi_2$	x_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2
x_n	y_n	ϕ_n	$x_n\phi_n$	x_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
M		M_ϕ	$M_{x\phi}$	M_{x^2}			E

Следует заметить, что данный алгоритм справедлив только для положительных значений *y*.

107 Метод наименьших квадратов для логарифмической функции

$$F(x,a,b) = a \cdot ln(x) + b$$

Введя новую переменную:

$$u = ln(x),$$

получаем следующее линейное уравнение:

$$F(u) = au + b$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$u = ln(x)$	uy	u^2	$F(x)$	$e = y - F(x)$	e^2
x_1	y_1	u_1	u_1y_1	u_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	u_2	u_2y_2	u_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2
x_n	y_n	u_n	u_ny_n	u_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
	M_y	M_u	M_{uy}	M_{u^2}			E

Следует заметить, что данный алгоритм справедлив только для положительных значений *u*.

108 Метод наименьших квадратов для дробно-линейной функции

$$F(x,a,b) = \frac{1}{ax+b}$$

Преобразуем следующим образом:

$$\frac{1}{F(x,a,b)} = ax + b$$

Введя новую переменную:

$$\phi(x) = \frac{1}{F(x)},$$

получаем следующее линейное уравнение:

$$\phi(x) = ax + b$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$\phi=\frac{1}{y}$	$x\phi$	x^2	$F(x)$	$e=y-F(x$	e^2
x_1	y_1	ϕ_1	$x_1\phi_1$	x_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	ϕ_2	$x_2\phi_2$	x_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2
x_n	y_n	ϕ_n	$x_n\phi_n$	x_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
M		M_ϕ	$M_{x\phi}$	M_{x^2}			E

Следует заметить, что данный алгоритм справедлив только для y, отличных от нуля.

109 Метод наименьших квадратов для гиперболических функций

$$F(x,a,b)=\frac{a}{x}+b$$

Введя новую переменную:

$$u=\frac{1}{x},$$

получаем следующее линейное уравнение:

$$F(u)=au+b$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$u=\frac{1}{x}$	uy	u^2	$F(x)$	$e=y-F(x$	e^2
x_1	y_1	u_1	u_1y_1	u_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	u_2	u_2y_2	u_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2
x_n	y_n	u_n	u_ny_n	u_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2

	$M_{}$	M_u	M_{uy}	M_{u^2}			E

110	Метод наименьших квадратов для дробно-рациональной функции

$$F(x,a,b) = \frac{x}{ax+b}$$

Преобразуем следующим образом:

$$\frac{1}{F(x,a,b)} = a + \frac{b}{x}$$

Введя новые переменные:

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

$$\phi(x) = \frac{1}{F(x)},$$

получаем следующее линейное уравнение:

$$F(u) = bu + a$$

Результаты вычислений лучше всего оформить в виде таблицы

x	y	$u = \frac{1}{x}$	$\phi =$	$u\phi$	u^2	$F(x)$	$e = y - F($	e^2
x_1	y_1	u_1	ϕ_1	$u_1\phi_1$	u_1^2	$F(x_1)$	e_1	e_1^2
x_2	y_2	u_2	ϕ_2	$u_2\phi_2$	u_2^2	$F(x_2)$	e_2	e_2^2
x_n	y_n	u_n	ϕ_n	$u_n\phi_n$	u_n^2	$F(x_n)$	e_n	e_n^2
		M_u	M_ϕ	$M_{u\phi}$	M_{u^2}			E

Следует заметить, что данный алгоритм справедлив только для *x* и *y*, отличных от нуля.

4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Процедуры оценивания в ходе изучения дисциплины знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций, регламентируются положениями:

- П ВГУИТ 2.4.03 Положение о курсовых экзаменах и зачетах;
- П ВГУИТ 4.1.02 Положение о рейтинговой оценке текущей успеваемости.

Для оценки знаний, умений, навыков студентов по дисциплине «Коллоидная химия» применяется средневзвешенная оценка балльно-рейтинговой системы.

Рейтинговая система оценки осуществляется в течение всего семестра при проведении аудиторных занятий. Показателем оценки знаний является текущий опрос в виде собеседования, сдачи тестов, сдачи расчетно-практической работы. За каждый правильный ответ обучающийся получает 5 баллов (зачтено - 5, незачтено - 0). Максимальное число баллов по результатам текущей работы в семестре 50.

Бальная система служит для получения экзамена и зачета по дисциплине. Максимальное число баллов за семестр – 100.

Максимальное число баллов по результатам текущей работы в семестре – 50. Максимальное число баллов на экзамене и/или зачете – 50.

Минимальное число баллов за текущую работу в семестре – 30.

Обучающийся, набравший в семестре менее 30 баллов, может заработать дополнительные баллы, отработав соответствующие разделы дисциплины или выполнив обязательные задания, для того, чтобы быть допущенным до экзамена и зачета.

Обучающийся, набравший за текущую работу менее 30 баллов, т.к. не выполнил всю работу в семестре по объективным причинам (болезнь, официальное освобождение и т.п.) допускается до экзамена и/или зачета, однако ему дополнительно задаются вопросы на собеседовании по разделам, выносимым на экзамен и/или зачет.

В случае неудовлетворительной сдачи экзамена и зачета обучающемуся предоставляется право повторной сдачи в срок, установленный для ликвидации академической задолженности по итогам соответствующей сессии. При повторной сдаче экзамена и/или зачета количество набранных студентом баллов на предыдущем экзамене и/или зачете не учитывается.

Зачет может проводиться в виде тестового задания или собеседования.

Для получения оценки «зачтено» суммарная бально-рейтинговая оценка обучающегося по результатам работы в семестре и на зачете должна быть не менее 60 баллов.

5. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания для каждого результата обучения по дисциплине/практике

Результаты обучения по этапам формирования компетенций	Предмет оценки (продукт или процесс)	Показатель оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	Шкала оценивания	
				Академическая оценка или баллы	Уровень освоения компетенции
ОПК 4 - Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач					
Знать фундаментальные основы вычислительной техники; базовые знания в области численных методов необходимые при планировании работ химической направленности, основы стандартных методов аппроксимации численных характеристик	Тест	Результат тестирования	60% и более правильных ответов	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			менее 60% правильных ответов	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)
Уметь использовать программное обеспечение компьютеров и базовые знания в области численных методов для планирования работ химической направленности, обрабатывать химические экспериментальные данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик	Собеседование (зачет)	Знание программного обеспечения компьютеров и базовые знания в области численных методов для планирования работ химической направленности, принципов обработки химических экспериментальных данных с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик	Обучающийся не ответил на 3 вопроса или в ответе допустил более пяти ошибок	Не зачтено /балл	Не освоена (недостаточный)
			обучающийся ответил не менее, чем на три вопроса без ошибок, или в ответе допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (базовый)
	Тест	Результат тестирования	60% и более правильных ответов	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)

			менее 60% правильных ответов	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)
Владеть базовыми знаниями численного решения уравнений для планирования работ химической направленности, методикой построения и анализа математических моделей.	Собеседование (зачет)	Знание численного решения уравнений для планирования работ химической направленности, методикой построения и анализа математических моделей, стандартными методами аппроксимации численных характеристик, основа построения многочленов и рядов численными методами	Обучающийся не ответил на 3 вопроса или в ответе допустил более пяти ошибок	Не зачтено /балл	Не освоена (недостаточный)
			обучающийся ответил не менее, чем на три вопроса без ошибок, или в ответе допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (базовый, повышенный)
	Расчетно-практическая работа	Результат выполнения задания	Обучающийся предложил вариант решения задачи, написал алгоритм и осуществил в программном обеспечении решение, и в решении допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			Обучающийся не предложил варианта решения задачи, или в алгоритме допущено три и более ошибки	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)
ОПК-5 Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности					
Знать основы современных IT-технологий при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности, основы стандартных программ (Microsoft Excel) и оригинальных программ (MathCAD, Mathematica,	Тест	Результат тестирования	60% и более правильных ответов	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			менее 60% правильных ответов	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)

MATLAB) обработки данных, основы вычислительных методов для обработки данных химического эксперимента					
Уметь использовать современные IT-технологии, включая программы обработки данных численными методами и программирования, при представлении информации химического профиля, использовать стандартные программы (Microsoft Excel) и оригинальные программы (MathCAD, Mathematica, MATLAB) обработки данных для решения задач профессиональной деятельности, строить математические модели с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ	Тест	Результат тестирования	60% и более правильных ответов	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			менее 60% правильных ответов	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)
	Расчетно-практическая работа	Результат выполнения задания	Обучающийся предложил вариант решения задачи, написал алгоритм и осуществил в программном обеспечении решение, и в решении допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			Обучающийся не предложил варианта решения задачи, или в алгоритме допущено три и более ошибки	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)
Владеть современными IT-технологиями при представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности, стандартными программами (Microsoft Excel) и оригинальными программами (MathCAD) обработки данных с	Собеседование (зачет)	Владение стандартными программами (Microsoft Excel) и оригинальными программами (MathCAD) обработки данных с возможностью их адаптации для решения задач	Обучающийся не ответил на 3 вопроса или в ответе допустил более пяти ошибок	Не зачтено /балл	Не освоена (недостаточный)
			обучающийся ответил не менее, чем на три вопроса без ошибок, или в ответе допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (базовый, повышенный)

возможностью их адаптации для решения задач профессиональной деятельности, навыками построения и анализа математических моделей с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ		профессиональной деятельности, навыками построения и анализа математических моделей с помощью численных методов при обработке данных химического эксперимента, моделировании свойств веществ			
	Расчетно-практическая работа	Результат выполнения задания	Обучающийся предложил вариант решения задачи, написал алгоритм и осуществил в программном обеспечении решение, и в решении допустил не более двух ошибок	Зачтено/балл	Освоена (повышенный)
			Обучающийся не предложил варианта решения задачи, или в алгоритме допущено три и более ошибки	Не зачтено/балл	Не освоена (недостаточный)