Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

___________________ А.Л.Толстик
(подпись) (И.О.Фамилия)
15.01.2015

Регистрационный № УД-1722 /баз.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине для специальностей:
1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий

2014

СОСТАВИТЕЛЬ:
И.В. Шапочкина — доцент кафедры компьютерного моделирования Белорусского государственного университета, кандидат физико–математических наук.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Г.А. Пицевич — доцент кафедры физической оптики, кандидат физико-математических наук, доцент;
А.В. Никитин — заведующий кафедрой теоретической физики Гродненского государственного университета, кандидат технических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:
Кафедрой компьютерного моделирования физического факультета Белорусского государственного университета
(протокол № 17 от 16 июня 2014 г.)

Научно-методическим Советом Белорусского государственного университета
(протокол № 6 от 20 июня 2014 г.)

Ответственный за редакцию: И.В.Шапочкина
Ответственный за выпуск: И.В.Шапочкина

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа спецкурса "Численные методы" разработана для специальности 1-31 04 01 Физика по направлению 1-31 04 01-01 научно-исследовательская деятельность.

Целью спецкурса является углубленное изучение и усвоение студентами методов численного решения физических задач, их качественного анализа, а также приобретение навыков самостоятельной реализации численных методов на персональных компьютерах.

Университетская подготовка современного физика включает не только экспериментальный и теоретико-аналитический подходы к постановке и решению физических проблем, но и теоретико-компьютерный, а термин «компьютерный эксперимент» отражает реальную многомерность исследовательских возможностей в физике и является очевидным следствием разнообразия ее проблем. В свою очередь, это выдвигает новые требования к подготовке физика-исследователя, отражается в программах дисциплин, обеспечивающих профессиональную подготовку.

Внедрение вычислительной математики в научные исследования предъявляет высокие требования к математический подготовке физиков. Современный уровень развития вычислительной техники допускает более точную постановку многих сложных физических задач. Поэтому, образование физика-исследователя должно включать как знание многих разделов современной математики, в том числе более глубоких (нелинейные дифференциальные уравнения, функциональный анализ, интегральные уравнения и др.), но и методов и приемов вычислительной математики, поскольку умение применять методы численного анализа становится обязательной составляющей использования современной вычислительной техники специалистами естественнонаучного профиля.

Современный курс численных методов должен сочетать изучение теории численных методов и получение умений и навыков их практической реализации на персональном компьютере. Такой подход позволяет сформировать, с одной стороны, понимание математического содержания конкретного метода (границ применимости, сильных и слабых сторон, устойчивости. сходимости и т.д.) и умение осознанно и критически использовать современные программные средства (в том числе, пакеты прикладных программ), с другой.

Особенностями данного специального курса являются:

- его обобщающий характер (изучение общей теории численных методов, основанной на теории интерполирования функций);
- направленность курса на применение численных методов в решении физических задач, что выражается в использовании в качестве иллюстраций применения различных численных методов конкретных физических задач;
- ориентация курса на студентов, обучающихся по специальности «Физик-исследователь», поэтому в изложении материала широко используется сравнительный анализ изучаемых численных методов и рассмотрение исключительных случаев их применения. Примеры, которыми иллюстрируется излагаемый материал, требуют не простого применения изученных алгоритмов, а качественной оценки задачи, условий существования решения, анализа возможностей использования тех или иных приближений, нахождения асимптотических решений для проверки правильности полученных результатов и т.п.

Основные задачи курса:

- изучение и усвоение численных методов решения алгебраических проблем собственных значений, систем нелинейных уравнений, построения наилучших приближений функции и интерполирования, начальных и краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений математической физики, интегральных уравнений;

- формирование целостного представления о совокупности методов численного анализа, общих подходов к построению различных методов;
- усвоение методов качественного анализа, предшествующего использованию численных методов;
- изучение методов анализа погрешностей численных методов, устойчивости и сходимости численных алгоритмов;
- приобретение и совершенствование навыков программной реализации численных методов.

Формами организации учебного процесса являются лекции, лабораторные занятия на персональных компьютерах, контролируемая самостоятельная работа студентов, консультации, экзамен.

Для осознанного усвоения материала данного спецкурса студенты должны владеть соответствующим математическим аппаратом, основное содержание которого излагается в общих курсах высшей математики (математического анализа, аналитической геометрии и высшей алгебры, дифференциальных уравнений, уравнений математической физики). Потребуются знания математического и функционального анализа (понятия метрики, норм матриц и векторов), математической физики (формулировки основных краевых задач), линейной алгебры (решение систем линейных алгебраических уравнений). Студенты также должны владеть простейшими численными методами (решения нелинейных алгебраических уравнений и систем линейных алгебраических уравнений, численного интегрирования и дифференцирования, интерполирования, решения обыкновенных дифференциальных уравнений), а также уметь программировать на одном из алгоритмических языков. Таким образом, материал спецкурса опирается на знания, представления и навыки, заложенные в общем курсе «Программирование и математическое моделирования», естественным продолжением которого он и является. Материал спецкурса является базовым для последующих спецкурсов «Компьютерное моделирование физических процессов» и «Интегрированный курс моделирования».

Программа курса составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта. Общее количество часов – 112; аудиторное количество часов — 32, из них: лекции — 26, контролируемая самостоятельная работа студентов — 6. Форма отчётности — экзамен.

ПРИМЕРНЫЙ ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№ п/п	Название темы	Лекции	Практические занятия	Семинары	Лабораторные занятия	Контролируемая самостоятельная работа	Всего
1.	Методы решения задач линейной алгебры.	8			4	1	13
2.	Методы решения нелинейных уравнений.	4			4	1	9
3.	Теория интерполирования и некоторые ее приложения.	6				1	7
4.	Наилучшие приближения функций	4			4	1	9
5.	Методы решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.	4			4	1	9
6.	Методы решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.	4			6	1	11
7.	Методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений с частными производными.	6			6	1	13
8.	Методы численного решения интегральных уравнений.	4			4	1	9
	Итого	40			32	8	80

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. Методы решения задач линейной алгебры.

Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

Примеры и канонический вид итерационных методов решения СЛАУ. Условия и скорость сходимости итерационных методов решения СЛАУ. Особенности программной реализации метода простой итерации. Итерационные методы вариационного типа (метод минимальных невязок, метод минимальных поправок, сопряженных градиентов). Погрешность приближенного решения СЛАУ. Обусловленность матриц. Методы резуляризации.

Методы решения алгебраических проблем собственных значений.

Собственные пары матриц и их свойства. Методы решения алгебраических проблем собственных значений, основанные на развертывании характеристического определителя: метод А.Н.Крылова, метод Леверрье, метод неопределенных коэффициентов. Методы решения частичных проблем собственных значений: степенной метод вычисления наибольшего или наименьшего по модулю собственного числа и соответствующего ему собственного вектора и его модификации; метод обратных итераций. Методы решения полной проблемы собственных значений: метод вращений Якоби, LU-алгоритм. Приемы улучшения сходимости процесса итерации для решения систем линейных уравнений.

2. Методы решения нелинейных уравнений.

Качественный анализ уравнения – наличие корней, процедура отделения корней уравнения. Метод простой итерации. Метод Ньютона. Сходимость методов простой итерации и Ньютона. Векторная запись систем нелинейных уравнений. Метод простых итераций решения систем нелинейных уравнений. Сходимость метода простых итерации. Метод Ньютона решения систем нелинейных уравнений и его модификации. Сходимость метода Ньютона и его модификаций. Гибридные методы. Метод скорейшего спуска (градиента). Примеры реализаций методов решения систем нелинейных уравнений.

3. Теория интерполирования и некоторые ее приложения.

Полиномиальная интерполяция.

Постановка задачи и способы аппроксимации функций. Полиномиальная интерполяция многочленами Лагранжа и Ньютона. Оценки остаточного члена полиномиальной интерполяции. Оптимальный выбор узлов. Интерполирование функций многих переменных: трудности интерполирования; обобщенная интерполяционная формула Ньютона. Общая задача интерполирования алгебраическими многочленами: интерполяционный многочлен Эрмита, остаточный член интерполяционной формулы Эрмита.

Сплайн-интерполяция.

Определение сплайна. Интерполяционный кубический сплайн дефекта 1. Сходимость процесса интерполяции кубическими сплайнами. Базисные сплайны. Эрмитовы (локальные) сплайны. Понятие о двумерной сплайн-интерполяции.

Отдельные практически важные задачи интерполирования.

Интерполирование периодических функций. Интерполирование функций комплексного переменного. Нелинейная интерполяция.

Численное дифференцирование.

Вывод формул численного дифференцирования. Остаточные члены формул численного дифференцирования. Оптимизация шага численного дифференцирования. Приближенное вычисление частных производных.

4. Наилучшие приближения функций.

Наилучшие равномерные приближения.

Постановка задачи равномерных приближений. Многочлены Чебышева и наилучшие равномерные приближения. Теоремы Чебышева и Вейерштрасса. Порядок наилучшего равномерного приближения. Способы построения многочленов наилучших приближений. Экономизация степенных рядов.

Наилучшие среднеквадратичные приближения.

Постановка задачи среднеквадратичных приближений. Метод наименьших квадратов простейшей обработки данных. Обобщенные многочлены наилучших среднеквадратических приближений. Системы ортогональных многочленов, свойства корней ортогональных многочленов. Способы построения системы ортогональных многочленов. Аппроксимация функций многочленами Фурье.

5. Методы решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Введение. Одношаговые разностные методы.

Постановка задачи. Классификация и сравнительный анализ методов численного решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Одношаговые методы Рунге-Кутта.

Многошаговые разностные методы.

Многошаговые методы Адамса. Предиктор-корректорные методы Адамса. Условия согласованности. Методы Адамса-Штёрмера численного решения дифференциальных уравнений высших порядков. Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Условно устойчивые и абсолютно устойчивые разностные схемы. Исследование устойчивости многошаговых методов. Жесткие уравнения и системы. Чисто неявные методы Гира.

6. Методы решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Постановка задачи. Классификация и сравнительный анализ методов численного решения краевых задач для ОДУ. Методы сведения краевых задач к начальным. Метод конечных разностей. Метод коллокации. Метод Галёркина. Метод конечных элементов.

7. Методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений с частными производными.

Введение.

Классификация дифференциальных уравнений с частными производными. Типы задач для уравнений в частных производных. Понятие о методе прямых. Постановка разностной задачи для ДУ в частных производных. Основные понятия теории метода сеток: сетки и сеточные функции, шаблоны разностных схем, разностные аппроксимации производных, порядок аппроксимации.

Сеточные методы для дифференциальных уравнений с частными производными.

Сеточные методы для дифференциальных уравнений эллиптического типа. Способы аппроксимации граничных условий. Специфика СЛАУ, аппроксимирующих уравнения эллиптического типа, и методы их решения. Сеточные методы для дифференциальных уравнений параболического типа. Аппроксимация, устойчивость, сходимость разностных схем для уравнения теплопроводности. Разностные схемы для уравнений параболического типа с двумя пространственными переменными. Метод сеток для уравнений гиперболического типа.

8. Методы численного решения интегральных уравнений.

Общие сведения об интегральных уравнениях. Квадратурный метод решения интегральных уравнений Фредгольма. Квадратурный метод решения интегральных уравнений Вольтерра. Квадратурно-итерационный метод построения резольвент.

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Примерный перечень лабораторных работ

1. Численное решение систем нелинейных алгебраических уравнений.
2. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений.
3. Методы решения алгебраических проблем собственных значений.
4. Сплайн-интерполяция.
5. Обработка данных методом наименьших квадратов.
6. Решение начальных задач для ОДУ.
7. Решение граничных задач для ОДУ.
8. Решение дифференциальных уравнений эллиптического типа сеточными методами.
9. Решение дифференциальных уравнений параболического типа сеточными методами.
10. Решение дифференциальных уравнений гиперболического типа сеточными методами.
11. Численное решение интегральных уравнений.

Рекомендуемые формы контроля знаний

1. Экзамен.
2. Тестовые задания.
3. Обсуждение результатов выполнения индивидуальных заданий контролируемой самостоятельной работы студентов.

Рекомендуемые формы тестовых заданий

1. Прямые и итерационные методы решения СЛАУ.
2. Аппроксимация и интерполяция функций.
3. Многошаговые и одношаговые методы решения задачи Коши для ОДУ.
4. Численные методы решения задач математической физики.

Рекомендуемые формы контролируемой самостоятельной работы студентов.

1. Выбор примеров физических задач курса общей физики, решение которых предполагает использование численных методов.
2. Решение выбранной задачи с использованием нескольких различных методов с сопоставительным анализом полученных результатов и выбором оптимального алгоритма.
3. Совместное обсуждение решений физических задач курса общей физики с использованием численных методов.

Рекомендуемая литература

Основная

1. Самарский, А.А. Численные методы: Учебное пособие / А.А. Самарский, А.В. Гулин – М.: Наука, 1989. – 432с.

2. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов: Учебник для ВУЗов. / В.М. Вержбицкий – М.: Высш.шк., 2002. – 840с.
3. Демидович, Б.П. Основы вычислительной математики / Б.П. Демидович, И.А. Марон. – М.: Наука, 1970. – 664 с.
4. Демидович, Б.П. Численные методы анализа / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова – М.: Наука, 1967. – 368 с.
5. Березин, И.С. Методы вычислений. Т1 / И.С.Березин, Н.П.Жидков. – М.: Физматлит, 1957. – 464 с.
6. Березин, И.С. Методы вычислений. Т2 / И.С.Березин, Н.П.Жидков. – М.: Физматлит, 1957. – 420 с.
7. Крылов, В. И. Вычислительные методы высшей математики. Том 1-2 / В.И. Крылов, В.В. Бобков, П.И. Монастырный. – Минск: Высшая школа, 1972, 1975.

Дополнительная

1. Корнейчук, Н.П. Сплайны в теории приближения / Н.П. Корнейчук. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1984. – 352 с.
2. Ортега, Дж. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. Пер. с англ., под ред. А.А.Абрамова / Дж. Ортега, У. Пул. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. – 288 с.
3. Тихонов, А. Н. Методы решения некорректных задач: Учебное пособие / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1986.