МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра нанотехнологий и инженерной физики

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
__________ О.Г. Локтионова
«15» ________ 2017г.

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Методические указания
к выполнению практических заданий магистрами
по дисциплине «Методы математического моделирования»

для направления подготовки 28.04.01

Курск 2017

УДК 51-72: 519.8: 530.1

Составитель: А.М.Стороженко, Н.А.Хохлов

Рецензент
Доктор физико-математических наук, профессор А.П.Кузьменко

Методы математического моделирования: методические указания к выполнению практических заданий магистрами по дисциплине «Методы математического моделирования» / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.М.Стороженко, Н.А.Хохлов. – Курск, 2017. – 6 с.

Излагаются методические рекомендации по выполнению практических заданий, в которых рассматриваются математические методы, используемые при моделировании различных физических процессов. Содержатся краткие описания применяемых при математическом моделировании численных методов, задания и вопросы для контроля знаний.

Методические указания соответствуют требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и учебного плана направления подготовки 28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника. Материал предназначен для магистров направления подготовки 28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника», а также будет полезен студентам, магистрам и аспирантам всех других направлений подготовки, изучающих дисциплины нанотехнологического цикла.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 15.12.17 . Формат 60 x 84 1/16.
Усл. печ. л. 0,58. Уч.-изд. л. 0,53. Тираж 30 экз. Заказ 3033. Бесплатно.
Юго-Западный государственный университет.
305040 Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Цель работ: освоить методики численного моделирования физических процессов.

Программное обеспечение: среда SciLab, Maple, Delphi–7, C++ Builder или другой язык программирования высокого уровня.

Задания по работам

1. Разработать программу обработки данных эксперимента, расчет погрешности косвенных измерений.
2. Реализовать в программной среде алгоритм решения уравнения f(x)=0 (системы таких уравнений).
3. Разработать программу численного дифференцирования по функции заданной поточечно.
4. Разработать программу численного интегрирования функции.
5. Разработать алгоритм и программу компьютерного моделирования решения уравнения в частных производных второго порядка разностным методом.

Составить отчет по работе, содержащий
- задание и цель работы,
- описание входных и выходных данных,
- принтскрин разработанной формы,
- перечисление используемых промежуточных переменных и компонентов формы,
- описание разработанных классов и/или процедур (функций),
- блок-схемы подпрограмм,
- результаты тестирования программы,
- листинг рабочего проекта.

Теория

1. Экспериментальные данные, получаемые в эксперименте (в том числе численном), всегда имеют некоторую неточность. Погрешность измерений возникает из-за ограниченной точности приборов, допущений при моделировании, округлений при вычислениях. Результат косвенных измерений $\langle z \rangle$ и погрешность

косвенных измерений Δz (доверительный интервал), если зависимость имеет вид $z = f(x,y,\ldots)$, определяются выражениями

$$<z> = f\left(<x>, <y>, \ldots\right),$$

$$\Delta z = \sqrt{\left(\frac{df}{dx}\right)^2 \cdot (\Delta x)^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 \cdot (\Delta y)^2 + \ldots},$$

где $<x>$, $<y>$, … – результат прямых измерений; Δx, Δy, … – доверительные интервалы величин x, y, …, полученных в прямых измерениях. Результаты косвенных измерений записываются окончательно в виде $z = <z> \pm \Delta z$, $E = \frac{\Delta z}{<z>}100\%$.

2. Метод Ньютона (метод касательных) решения уравнения f(x)=0 состоит в следующем алгоритме, применяемом для поиска корня на интервале [a,b], на котором функция меняет знак (имеет различные знаки на концах интервала). Предполагается непрерывность функции на этом интервале. Корень ищется методом сужения интервала на котором функция меняет знак. При этом граница интервала ищется методом итераций по формуле

$$b_i = b_{i-1} - \frac{f\left(b_{i-1}\right)}{f'\left(b_{i-1}\right)}.$$

Если знаки $f(b_i)$ и $f(b_{i-1})$ совпадают, то расчет продолжается, если нет, то вводится переобозначение: $a_i = b_i$, $b_i = b_{i-1}$ расчет продолжается итерациями со стороны a_i.

3. Формулы численного дифференцирования получают из аппроксимаций функции, от которой берется производная, интерполяционным многочленом. Большинство используемых на практике формул численного дифференцирования также могут быть получены из рядов Тейлора функции в точках, в которых она известна. Общая формула аппроксимации производной n-го порядка для функции заданной с шагом h имеет вид:

$$f_i^{(n)} = \frac{1}{h^n}\sum_j b_j f_{i+j} + \Delta,$$

в этой формуле: b_j - некоторые постоянные коэффициенты, Δ - погрешность аппроксимации.

4. Большинство методов численного интегрирования заключается в замене подынтегральной функции на более простую, интеграл от которой можно легко вычислить аналитически. Приближенное выражение интеграла имеет вид:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f\left(x_i\right) + \Delta,$$

где n – число точек, в которых вычисляется значение подынтегральной функции, w_i - некоторые постоянные коэффициенты, Δ - погрешность аппроксимации.

5. Аналитическое решение даже простого дифференциального уравнения в сложной области зачастую не возможно, поэтому разработано большое количество методов решения таких уравнений математической физики. Некоторые из этих методов основаны на аппроксимации дифференциального оператора конечными разностями, другие сводят задачу к проекционной или вариационной. Наиболее часто используются методы конечных разностей, конечных элементов и конечных объемов. В частности приближенное решение уравнения колебаний струны:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

может быть получено итерационным применением следующей разностной схемы:

$$u_i^{j+1} = 2u_i^j - u_i^{j-1} + \left(\frac{\tau a}{h}\right)^2 \left(u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j\right),$$

где τ – шаг по времени, h – шаг по пространственной координате.

Контрольные вопросы

1. Дайте алгоритм расчета погрешности косвенного измерения.
2. Приведите алгоритм решения уравнения функции одной переменной методом Ньютона.
3. Получите одну из формул для приближенного расчета производной второго порядка из ряда Тейлора.
4. Запишите и поясните геометрически одну из формул численного интегрирования.
5. Поясните проблемы устойчивости и сходимости для различных методов численного решения уравнений в частных производных.

Основные источники

1. Ибрагимов И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. Учебное пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - М. : Лань, 2010. - 384 с.
2. Архангельский А.Я. Программирование в Delphi 7. М.: ООО «Бином-Пресс», 2003 г. — 1152 с.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. - М.: Физматлит, 2007. – 400 с. ISBN 5-9221-0310-5

Дополнительная литература

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. – В 2 т.– 1992 (http://www.twirpx.com)