

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе

А.А. Воронов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Вычислительная математика
по направлению:	Биотехнология
профиль подготовки:	Управление инновациями в бизнесе Физтех-школа бизнеса высоких технологий кафедра вычислительной физики
курс:	2
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 4 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 30 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Количество контрольных работ, заданий: 2

Программу составил: С.С. Симаков, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры вычислительной физики 27.04.2023

Аннотация

Программа данного курса включает в себя основные разделы вычислительной математики такие, как, теория погрешностей, основы вычислительной линейной алгебры, методы аппроксимации функций, численное дифференцирование и интегрирование, методы решения нелинейных уравнений, методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Сформировать у студентов систематическое представление о:

- 1) методах приближенного решения наиболее распространенных базовых типов математических задач;
- 2) источниках погрешностей и методах их оценки;
- 3) методах решения актуальных прикладных задач.

Задачи дисциплины

- 1) Освоение материала, охватывающего основные задачи и методы вычислительной математики.
- 2) формирование целостного представления о численных методах решения современных научных прикладных задач.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-3 Способен составлять и оформлять научные и (или) технические (технологические, инновационные) отчеты (публикации, проекты)	ОПК-3.1 Знает основные правила оформления научных публикаций и научно-технической документации, в том числе с использованием прикладного программного обеспечения
	ОПК-3.2 Владеет на практике методологией составления научно-технических отчетов (проектов)
	ОПК-3.3 Владеет методами визуального и графического представления результатов научной (научно-технической, инновационной технологической) деятельности в виде отчетов, научных публикаций

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

Область применения, теоретические основы, основные принципы, особенности и современные тенденции развития методов вычислительной математики.

уметь:

Применять методы численного анализа для приближенного решения задач в области своей научно-исследовательской работы.

владеть:

Программными средствами разработки вычислительных алгоритмов и программ, способами их отладки, тестирования и практической проверки соответствия реализованного алгоритма теоретическим оценкам.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.
--	---

№	Тема (раздел) дисциплины	Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Погрешности вычислений. Численное дифференцирование.	4		4	5
2	Задача интерполяции. Остаточный член интерполяции. Полиномиальная интерполяция.	4		4	10
3	Интерполяция по Чебышевским узлам. Сплайн-интерполяция.	4		4	10
4	Численное интегрирование.	2		2	10
5	Нормы. Обусловленность СЛАУ. Прямые, итерационные и вариационные методы решения СЛАУ.	6		6	10
6	Приближение функций.	2		2	10
7	Нелинейные алгебраические уравнения и системы.	2		2	10
8	Численное решение ОДУ. Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Задача Коши. Краевые задачи.	6		6	10
Итого часов		30		30	75
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 4 (Весенний)

1. Погрешности вычислений. Численное дифференцирование.

Основные классы задач. Классификация погрешностей. Машинная арифметика. Примеры прикладных задач, решаемых численными методами.

2. Задача интерполяции. Остаточный член интерполяции. Полиномиальная интерполяция.

Существование и единственность алгебраического интерполяционного полинома. Интерполяционный полином в форме Лагранжа. Разделенные разности. Интерполяционный полином в форме Ньютона.

3. Интерполяция по Чебышевским узлам. Сплайн-интерполяция.

Остаточный член интерполяции. Выбор узлов интерполяции. Много-члены Чебышева. Сходимость интерполяционного процесса. Обусловленность задачи интерполяции, константа Лебега. Кусочно-полиномиальная интерполяция на примере кубического сплайна. Применения интерполяции с регуляризацией для регрессии зашумленных данных.

4. Численное интегрирование.

Квадратурные формулы Ньютона–Котеса и оценка их погрешностей. Квадратурные формулы Гаусса. Методы вычисления несобственных интегралов. Методы вычисления многомерных интегралов, методы Монте-Карло.

5. Нормы. Обусловленность СЛАУ. Прямые, итерационные и вариационные методы решения СЛАУ.

p-нормы векторов, нормы матриц, операторные нормы матриц. Изо-метричные матрицы. Разложение Шура. Нормальные матрицы, знакоопределенные матрицы, сингулярное разложение (SVD).

Примеры применения SVD: латентный семантический анализ данных; сжатие двумерных массивов.

Понятия обусловленности матрицы и линейной системы. Ряды Неймана, сходящиеся матрицы. Диагональное преобладание, круги Гершгорина. LU-разложение, метод Гаусса, выбор ведущего элемента. Метод Холецкого. QR-разложение, метод наименьших квадратов.

Пример применения QR разложения для решения задачи регрессии. Метод Рундсона, чебышёвский набор параметров релаксации. Методы Якоби, Зейделя. Методы, основанные на минимизации квадратичного функционала.

6. Приближение функций.

Приближение функций в L2 норме, ортогональные многочлены. Приближение функций в C-норме, условие альтернанса, алгоритм Ремеза. Многомерная интерполяция, радиальные базисные функции. Примеры нелинейных аппроксимаций, искусственные нейронные сети.

7. Нелинейные алгебраические уравнения и системы.

Локализация корней. Принцип сжимающих отображений. Метод простых итераций. Достаточное условие сходимости метода простых итераций. Метод Ньютона. Теорема о квадратичной сходимости метода Ньютона. Метод секущих. Пример прикладной задачи: вычисление равновесного состава смеси химических компонентов.

8. Численное решение ОДУ. Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Задача Коши. Краевые задачи.

Понятия аппроксимации, сходимости, устойчивости на примере задачи для линейного ОДУ. Основная теорема теории разностных схем. Схема 2-го порядка для краевой задачи для уравнения 2-го порядка. Примеры методов решения задачи Коши: методы Рунге-Кутты, многошаговые методы, условия порядка.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная персональными компьютерами, мультимедиапроектором и экраном.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Введение в вычислительную математику [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. С. Рябенкий .— 3-е изд., испр. и доп. — М. : Физматлит, 2008 .— 288 с.
2. 12 лекций по вычислительной математике : вводный курс [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. И. Косарев .— 3-е изд., испр. и доп. — М. : Физматкнига, 2013 .— 240 с.

Дополнительная литература

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1989. — 608 с.
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. — М.: Наука, 1989.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Компиляторы и среды разработки C++, JAVA, PYTHON

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий курс должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса отведено минимально необходимое время для работы студента над темой. Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы,
- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- решение задач, предлагаемых студентам на практических занятиях и в качестве курсового задания,
- подготовку к практическим занятиям и зачетам.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций.

Показателем владения материалом служит умение решать задачи.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания.

При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к лектору или преподавателю, ведущему практические занятия.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению: Биотехнология
профиль подготовки: Управление инновациями в бизнесе
Физтех-школа бизнеса высоких технологий
кафедра вычислительной физики
курс: 2
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 4 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчик: С.С. Симаков, канд. физ.-мат. наук, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-3 Способен составлять и оформлять научные и (или) технические (технологические, инновационные) отчеты (публикации, проекты)	ОПК-3.1 Знает основные правила оформления научных публикаций и научно-технической документации, в том числе с использованием прикладного программного обеспечения
	ОПК-3.2 Владеет на практике методологией составления научно-технических отчетов (проектов)
	ОПК-3.3 Владеет методами визуального и графического представления результатов научной (научно-технической, инновационной технологической) деятельности в виде отчетов, научных публикаций

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Вычислительная математика» обучающийся должен:

знать:

Область применения, теоретические основы, основные принципы, особенности и современные тенденции развития методов вычислительной математики.

уметь:

Применять методы численного анализа для приближенного решения задач в области своей научно-исследовательской работы.

владеть:

Программными средствами разработки вычислительных алгоритмов и программ, способами их отладки, тестирования и практической проверки соответствия реализованного алгоритма теоретическим оценкам.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлого занятия.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Промежуточная аттестация по дисциплине «Вычислительная математика» осуществляется в форме дифференцированного зачета. Дифференцированный зачет проводится в письменной и устной форме.

Перечень контрольных вопросов:

1. Численное дифференцирование. Простейшие формулы численного дифференцирования. Метод неопределенных коэффициентов для вывода формул численного дифференцирования. Порядок аппроксимации формул численного дифференцирования. Оптимальный шаг сетки численного дифференцирования.
2. Постановка задачи интерполяции. Полиномиальная интерполяция, ее существование и единственность. Интерполяционный полином в форме Лагранжа.
3. Постановка задачи интерполяции. Разделенные разности. Интерполяционный полином в форме Ньютона.
4. Сходимость интерполяционного процесса. Примеры Бернштейна и Рунге.
5. Обусловленность задачи интерполяции и константа Лебега.
6. Теорема об остаточном члене интерполяционного полинома (с доказательством). Оценка остаточного члена на равномерной сетке.
7. Полиномы Чебышева, их свойства. Применение полиномов Чебышева при построении узлов интерполяции.
8. Понятие сплайн-интерполяции. Процедура построения кубического сплайна показателя гладкости два.
9. Численное интегрирование. Квадратурные формулы прямоугольников, трапеций и Симпсона. Оценки погрешности квадратных формул.
10. Норма матрицы. Число обусловленности матрицы. Теорема об относительной погрешности решения системы линейных алгебраических уравнений (с доказательством).
11. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений: достоинства и недостатки. Метод Гаусса решения систем линейных алгебраических уравнений и его связь с LU-разложением матрицы. Выбор ведущего элемента.
12. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений: достоинства и недостатки. Достаточное условие (с доказательством) и критерий (без доказательства) сходимости метода простых итераций.
13. Метод Якоби решения систем линейных алгебраических уравнений: матричная и покомпонентная формулировка, достаточное условие и критерий сходимости (оба с доказательством), геометрическая интерпретация метода для системы 2 на 2.
14. Метод Зейделя решения систем линейных алгебраических уравнений: матричная и покомпонентная формулировка, достаточное условие и критерий сходимости (оба с доказательством), геометрическая интерпретация метода для системы 2 на 2.
15. Теорема об эквивалентности задачи минимизации квадратичной функции и решения системы линейных алгебраических уравнений (с доказательством). Методы решения систем линейных алгебраических уравнений, основанные на минимизации функции – метод наискорейшего спуска и метод минимальных невязок.
16. Переопределенные системы линейных алгебраических уравнений. Задачи, приводящие к переопределенным системам. Метод наименьших квадратов решения переопределенных систем линейных алгебраических уравнений.
17. Решение нелинейных алгебраических уравнений методами простых итераций и релаксации. Критерий сходимости простых итераций (с доказательством). Графическая интерпретация метода простых итераций.
18. Метод Ньютона решения нелинейных алгебраических уравнений и систем. Графическая интерпретация.

19. Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Понятие сходимости разностной схемы на примере простейшего линейного уравнения и явной схемы Эйлера.
20. Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Анализ сходимости по определению для схемы с центральной разностью.
21. Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Пример аппроксимирующей, но неустойчивой схемы.
22. Понятие сходимости, аппроксимации и устойчивости разностных схем. Основная теорема вычислительной математики (с доказательством).

Примеры контрольных заданий:

1. Для аппроксимации первой производной в узле x функции f , заданной в узлах x , $x+h$, $x+2h$, используется тангенс угла наклона прямой, проведенной методом наименьших квадратов через узлы (x, f_0) , $(x+h, f_1)$ и $(x+2h, f_2)$ (см. Рис. 1).

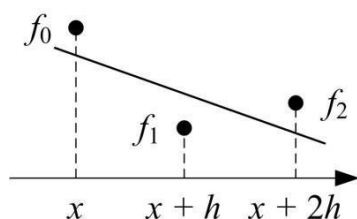


Рис. 1

Выписать получившуюся формулу численного дифференцирования и определить ее порядок аппроксимации. Выписать формулу численного дифференцирования для нахождения первой производной в узле x максимально возможного порядка аппроксимации на рассматриваемом наборе узлов.

2. Табличная функция задана в узлах с абсолютной погрешностью, не превосходящей 10^{-2} :

x	0	$\pi/6$	$\pi/3$
$\cos(x)$	1	$\sqrt{3}/2$	1/2

Оценить, с какой точностью можно восстановить значение в точке $x = 7\pi/24$, используя квадратичную интерполяцию?

3. Показать справедливость неравенства матричных норм $\|A\|_3^2 \leq \|A\|_1 \cdot \|A\|_2$.

Указание: сначала доказать, что модуль любого собственного значения матрицы не больше любой ее нормы.

4. Дана таблица значений неизвестной функции:

x	1	2	3
y	1	6	4

Составить линейную систему для нахождения коэффициентов аппроксимации функции прямой $y = c_2x + c_1$ методом наименьших квадратов. Сделать одну итерацию метода наискорейшего спуска для ее решения, взяв за начальное приближение вектор $\mathbf{x}^0 = [1 \ 1]^T$. Вычисления проводить до 2-го знака после запятой включительно.

5. Пусть матрица B имеет вид:

$$B = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 \\ \beta & \alpha & \beta \\ 0 & \beta & \alpha \end{bmatrix}.$$

Найти все α и β , при которых метод простой итерации $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^k + \mathbf{c}$ для решения системы линейных алгебраических уравнений сходится с произвольного начального приближения.

6. Доказать, что метод простой итерации $x^{k+1} = \varphi(x^k)$ для решения уравнения $x = \varphi(x)$ сходится при любом начальном приближении:

$$- \varphi(x) = \alpha \sin^2 x + \beta \cos^2 x + \gamma, \text{ где } |\alpha - \beta| < 1;$$

$$- \varphi(x) = ae^{-bx^2} + c, \text{ где } b \geq 0, 2a^2b < e.$$

7. Для численного решения задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{du}{dx} = au, a = \text{const}, \\ u(0) = u_0, x \in [0;1], \end{cases}$$

используется следующая разностная схема:

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{h} = \frac{3}{2} au_n - \frac{1}{2} au_{n-1}.$$

Определить порядок аппроксимации данной схемы. Считать, что u_1 известно точно, и на порядок аппроксимации не влияет

4. Критерии оценивания

Оценка «отлично (10)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на два вопроса (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 7 заданий;

Оценка «отлично (9)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на один из двух вопросов (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 7 заданий;

Оценка «отлично (8)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на один из двух вопросов (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 6 заданий;

Оценка «хорошо (7)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на два вопроса (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 5 заданий (или в случае решения 6 заданий ответил на один вопрос);

Оценка «хорошо (6)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на два вопроса (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 4 задания (или в случае решения 5 заданий ответил на один вопрос);

Оценка «хорошо (5)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на один из двух вопросов (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 4 задания;

Оценка «удовлетворительно (4)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на два вопроса (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 3 задания;

Оценка «удовлетворительно (3)» выставляется обучающемуся, если он правильно ответил на два вопроса (один вытягивается в качестве билета, второй задается по усмотрению преподавателя) и решил 2 задания (или в случае решения 3 заданий ответил на один вопрос);

Оценка «неудовлетворительно (2)» выставляется обучающемуся, если он решил 1 задание;

Оценка «неудовлетворительно (1)» выставляется обучающемуся, если он не решил ни одного задания.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 45 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать двух астрономических часов. Во время подготовки к ответу на вопрос обучающиеся могут пользоваться справочной литературой.

Время проведения письменной контрольной составляет 2 академических часа. Во время проведения письменной контрольной обучающиеся могут пользоваться вычислительной техникой.