Міністерство освіти і науки України

ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до курсової роботи по курсу
«МЕТОДИ ОБРОБКИ ІНФОРМАЦІЇ В ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ»
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

Затверджено на засіданні кафедри ТНРЕ
Протокол № 11, від 24.05.2021 р.

Одеса: ОП, 2021

Методичні вказівки до курсової роботи по курсу «Методи обробки інформації в хімічних технологіях» для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / уклад. В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 43 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Єпутатов Ю.М., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. **Методичні вказівки до курсової роботи по курсу «Методи обробки інформації в хімічних технологіях».** В методичних вказівках надані рекомендації стосовно структури роботи, методів обробки інформації, отриманої в результаті експерименту, а також загальні пояснення до роботи та інтерфейсу оригінальних прикладних програм, які використовуються для розрахунків за індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

ВСТУП

Математичне опрацювання і аналіз результатів експерименту необхідні як студентам технічних вузів, так і інженерам-дослідникам і інженерам-технологам. Недостатнє знання ними сучасних методів математичного опрацювання та аналізу результатів експерименту викликає звичайно серйозні утруднення і призводить до застосування спрощених і недостатньо обґрунтованих прийомів. Це відноситься до питань добору емпіричних формул і оцінки їхніх параметрів, оцінки істинних значень величин, що вимірюються, і точності вимірів, дослідження кореляційних залежностей.

Виконуючи дану курсову роботу, студенти закріплюють навички практичного застосування основних методів обробки та аналізу результатів експерименту, що мають відношення до різноманітних питань хімії і хімічної технології.

Кожний студент одержує індивідуальне завдання на курсове проектування.

При виконанні курсової роботи студенти можуть використовувати як прикладні програми, які є в наявності в бібліотеці програм ХТФ, так і самостійно розроблені програмні продукти.

Захист курсової роботи, попередньо підписаної керівником, проводиться у встановлений термін перед комісією. При оцінці курсової роботи враховується обґрунтованість прийнятих рішень, оригінальність розроблених програмних продуктів, повнота і правильність розрахунків, якість оформлення пояснювальної записки, систематичність роботи і підготовленість студента до захисту.

1 СТРУКТУРА КУРСОВОЇ РОБОТИ

Курсова робота умовно складається з двох частин. При виконанні першої частини курсової роботи (розділи 2, 3, 4) по заданим експериментальним даним необхідно:

1) провести кореляційний аналіз і встановити наявність лінійного зв'язку між експериментальними даними (вихідні дані таблиці 1);
2) дослідити наявність лінійного зв'язку між двома фізичними властивостями (вихідні дані таблиці 2);
3) використовуючи методи апроксимації, підібрати емпіричні формули, які щонайкраще підходять для опису експериментальних даних та обчислити коефіцієнти формул, оцінити похибку по величині суми квадратів відхилень (вихідні дані таблиці 1);
4) виконати лінійний регресійний аналіз і визначити коефіцієнти регресії з оцінкою значущості коефіцієнтів і довірчих інтервалів, а також визначити адекватність отриманої моделі (вихідні дані таблиці 1);

При виконанні другої частини курсової роботи (розділ 5) по табличним експериментальним даним (вихідні дані таблиці 2) необхідно:

1) використовуючи метод параболічної інтерполяції, визначити необхідну ступінь поліному, його коефіцієнти і значення параметрів у зазначених невузлових точках;
2) аналогічні розрахунки виконати з використанням формули Лагранжу;
3) проаналізувати результати, отримані різноманітними методами;
4) використовуючи метод зворотної інтерполяції, по заданому значенню функції визначити відповідне значення аргументу.

Курсова робота оформляється у виді пояснювальної записки, що повинна включати наступне: титульний лист, завдання на курсове проектування, реферат, зміст, введення, основну частину, висновки, перелік літератури, додатки (при необхідності), графічну частину.

У тексті основної частини, що розбивається на розділи і підрозділи, приводяться: стисла характеристика методів обробки інформації, алгоритми розрахунків, блок-схеми, тексти розроблених або опис використовуваних прикладних програм, результати розрахунків і аналіз отриманих даних.

Введення повинно містити обґрунтування проблеми, якій присвячено курсову роботу. У висновку необхідно підкреслити все, що було зроблено при виконанні курсової роботи, і оцінити ступінь виконання завдання.

2 КОРЕЛЯЦІЙНИЙ АНАЛІЗ

2.1 Основні поняття

Під кореляцією розуміють всякий зв'язок між двома або декількома досліджуваними явищами. Кореляція може бути детерміністичною або випадковою (ймовірнісною). Перший тип зв'язку визначається строгими закономірностями, які описуються фізико-хімічними формулами. Так закон Ома в його тривіальній формі визначає строгий зв'язок між різницею потенціалів, силою току та електричним опором. Другий тип зв'язку тільки передбачається, тому що відсутні теоретичні передумови, які свідчать про наявність такого зв'язку.

При кореляційному аналізі перевіряється лише самий факт зв'язку, тобто статистична гіпотеза про відсутність або наявність зв'язку. Сама природа величин, між якими такий випадковий зв'язок передбачається, дозволяє судити про нього як про імовірнісний. Результат кореляційного аналізу також носить статистичний характер, тому що висновок про наявність або відсутність зв'язку приймається за деякою наперед заданою довірчою імовірністю.

Прикладом задачі кореляційного аналізу може служити дослідження впливу температурного режиму на вихід якого-небудь хімічного продукту в складному технологічному процесі. При цьому зі збільшенням температури можливо не тільки підвищення швидкості досліджуваної реакції, але і протікання побічних реакцій, а також і зворотна реакція розкладання продукту.

Тому зв'язок між температурою і виходом продукту можна охарактеризувати як випадкову.

2.2 Елементи теорії кореляції

Як правило при кореляційному аналізі досліджуються тільки лінійні зв'язки між величинами, а статистичні критерії свідчать про наявність або відсутність передбачуваного лінійного зв'язку. Тому негативна відповідь при перевірці гіпотези про кореляцію може означати не тільки відсутність зв'язку, але і можливу наявність нелінійної залежності між досліджуваними величинами.

Для кількісної оцінки лінійної кореляції користуються вибірковим коефіцієнтом парної кореляції r_{xy} – безрозмірною величиною до значень середніх квадратичних відхилень досліджуваних величин:

$$r_{xy} = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{\sqrt{\left(n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left[\sum_{i=1}^{n} x_i\right]^2\right)\left(n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left[\sum_{i=1}^{n} y_i\right]^2\right)}}. \quad (2.1)$$

Коефіцієнт кореляції за абсолютною величиною не перевершує одиниці ($|r_{xy}| \le 1$) і може приймати такі значення:

1) $r_{xy} = 0$ — цей випадок відповідає відсутності зв'язку між x і y (рис. 2.1, а);
2) $r_{xy} = +1$ — між x і y існує строгий позитивний лінійний зв'язок (рис. 2.1, б);
3) $r_{xy} = -1$ — між x і y існує строгий негативний зв'язок (рис. 2.1, в);
4) $-1<r_{xy}<+1$ — це випадок, що найбільше часто зустрічається, і тут про кореляцію судять уже лише з точки зору більшої або меншої імовірності.

Розмір коефіцієнта кореляції $|r_{xy}|$ служить тільки для оцінки тісноти лінійного зв'язку між величинами x і y: чим ближче абсолютна величина коефіцієнта до 1, тим зв'язок сильніше; чим ближче $|r_{xy}|$ до нуля, тим зв'язок менше. Якщо випадкові величини x і y пов'язані точною лінійною функціональною залежністю

$$y = a \cdot x + b, \quad (2.2)$$

то $r_{xy} = \pm 1$. Знак «+» або «–» потрібно використовувати в залежності від знака коефіцієнту a ($a>0$ або $a<0$).

Залежність коефіцієнта кореляції перевіряється шляхом порівняння абсолютної величини емпіричного коефіцієнта кореляції, помноженої на $\sqrt{n-1}$, із його критичними значеннями при заданому ступені надійності (рівня довірчості) P. Критичні значення

$$H = |r_{xy}|\sqrt{n-1}$$

при числі вимірів n до 10 для різноманітних значень надійності складають:

Таблиця 2.1 – Ступінь надійності Р і критичні значення Н

Р	Н
0,9	1,65
0,95	1,90
0,99	2,29

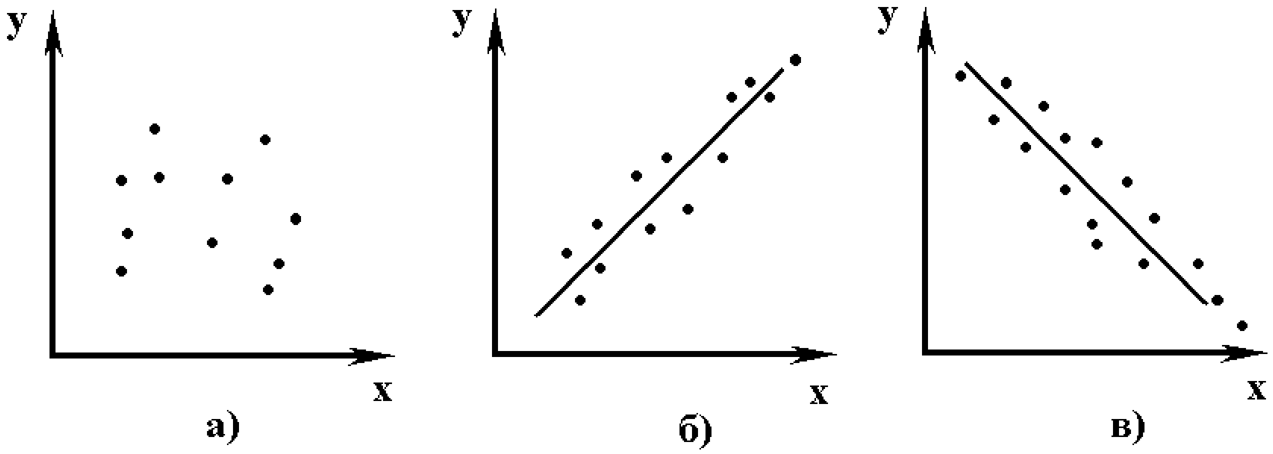

Рис.2.1 Кореляційна залежність між випадковими величинами х і у

Якщо для емпіричного коефіцієнта кореляції r_{xy} *Н* виявиться більше критичного значення, то з надійністю *Р* слід прийняти гіпотезу про кореляцію аналізованих величин.

При інженерних розрахунках рівень довірчості *Р = 0,95* достатній.

Приклад 2.1 Провести кореляційний аналіз і встановити наявність лінійного зв'язку між експериментальними даними (вихідні дані таблиці 1)

Нехай в результаті експерименту отримана наступна таблиця дослідних даних.

Таблиця 2.2 – Вихідні дані 1

№ *досліду*	1	2	3	4	5	6	7	8
x, г/л	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y, %	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0

Рішення. Для визначення коефіцієнта парної кореляції (2.1) проводяться попередні розрахунки (табл. 2.3).

Таблиця 2.3 – Дані для розрахунку коефіцієнта кореляції

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8	$\sum_{i=1}^{8}$
x, г/л	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0	*21,5*
y, %	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0	*114,4*
$x{\cdot}y$	85,2	18	2,75	28	42	6	60,9	150	*392,85*
x^2	16	4	0,25	6,25	9	1	12,25	25	*73,75*
y^2	453,69	81	30,25	125,44	196	36	302,76	900	*2125,14*

Коефіцієнт кореляції розраховується за формулою (2.1):

$$r_{xy} = \frac{8 \cdot 392{,}85 - 21{,}5 \cdot 114{,}4}{\sqrt{[8 \cdot 73{,}75 - (21{,}5)^2\,] \cdot [8 \cdot 2125{,}14 - (114{,}4)^2\,]}} = 0{,}966$$

Значення коефіцієнта кореляції достатньо велике, щоб зробити висновок про наявність тісного лінійного зв'язку. Значимість коефіцієнта кореляції перевіряємо по значенню Н:

$$H = 0{,}966 \cdot \sqrt{8-1} = 2{,}556$$

Для рівня довірчості *0,99* табличне значення $H_{табл}=2{,}29$, отже коефіцієнт кореляції є значущим і гіпотеза про лінійний зв'язок x і y може бути прийнята з рівнем довірчості *0,99*.

2.3 Лінійна кореляція

Припустимо відомо, що випадкові величини x и y пов'язані лінійною кореляційною залежністю (обидві лінії регресії прямі). Потрібно по дослідним даним знайти рівняння прямих ліній регресії x на y і y на x и оцінити силу лінійного кореляційного зв'язку.

Розглянемо спочатку найпростіший випадок, коли в результаті незалежних дослідів була отримана сукупність n пар чисел

$$(x_1,y_1),\ (x_2,y_2),\ \ldots\ ,\ (x_n,y_n)$$

(кожна пара чисел спостерігалася тільки по одному разу). Тоді рівняння прямої лінії регресії y на x буде мати вид:

$$y = \rho_{yx} + b, \tag{2.3}$$

де ρ_{yx} – вибірковий коефіцієнт регресії y на x.

Рівняння (2.3) називають вибірковим рівнянням прямої лінії регресії y на x. Будемо знаходити параметри ρ_{yx} і b рівняння (2.3), базуючись на методі найменших квадратів, тобто такими, щоб сума квадратів відхилень дослідних значень y_i від значень $\tilde{y}_i$ (i = 1, 2, … , n), обчислених по рівнянню (2.3), була мінімальною:

$$\sum_{i=1}^{n}=(\tilde{y}_i - y_i)^2 = min.$$

Метод найменших квадратів описано у розділі 4.1.

Система нормальних рівнянь для визначення ρ_{yx} і b має вид :

$$\begin{cases}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)\rho_{yx} + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)b = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)\rho_{xy} + nb = \sum_{i=1}^{n} y_i\end{cases} \qquad (2.4)$$

Розв'язавши цю систему, знайдемо потрібні параметри:

$$\rho_{yx} = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}; \qquad (2.5)$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}. \qquad (2.6)$$

Аналогічно можна знайти вибіркове рівняння прямої лінії регресії *x* на *y*:

$$x = \rho_{xy}\, y + c, \qquad (2.7)$$

де ρ_{xy} – вибірковий коефіцієнт регресії x на y.

Для характеристики сили лінійного кореляційного зв'язку між величинами x і y по дослідним даним знаходимо вибірковий коефіцієнт кореляції:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \bar{x}\right)\left(y_i - \bar{y}\right)}{nS_x S_y}. \qquad (2.8)$$

де $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$; $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$; S_x, S_y – вибіркові середні квадратичні відхилення:

$$S_x = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \bar{x}\right)^2}{n-1}}; \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \bar{y}\right)^2}{n-1}}. \qquad (2.9)$$

Для практичного використання більш зручним є формули:

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \bar{x}\right)\left(y_i - \bar{y}\right) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i; \qquad (2.10)$$

$$S_x = \sqrt{\frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right]}; \qquad (2.11)$$

$$S_y = \sqrt{\frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2\right]}. \qquad (2.12)$$

Перевірка значущості коефіцієнта кореляції викладена вище.

Приклад 2.2. Термодинамічні характеристики води на лінії насичення представлені в таблиці 2.4.

Таблиця 2.4 – Вихідні дані 2

T, °C	110	120	130	140	150	160	170	180
$\mu\cdot10^6$, Па·с	256	231	212	196	185	174	163	153
$\beta\cdot10^4$, 1/К	8,0	8,6	9,2	9,7	10,3	10,8	11,5	12,2
i, кДж/кг	461	503	545	587	629	671	713	755

Дослідити наявність лінійного зв'язку між коефіцієнтами об'ємного розширення (β) і в'язкості (μ).

Рішення. Представимо в табл. 2.5 додаткові обчислення потрібні для розрахунку вибіркового коефіцієнт кореляції за виразом (2.8). Вибірковий коефіцієнт кореляції визначимо по формулі (2.8), попередньо зробивши розрахунки по формулам (2.10 – 2.12).

T, °C	110	120	130	140	150	160	170	180	$\sum_{i=1}^{8}$
$x=\beta\cdot10^4$, 1/К	8,0	8,6	9,2	9,7	10,3	10,8	11,5	12,2	80,3
$y=\mu\cdot10^6$, Па·с	256	231	212	196	185	174	163	153	1570
$x\cdot y$	2048	1986,6	1950,4	1901,2	1905,5	1879,2	1874,5	1866,6	15412
x^2	64	73,96	84,64	94,09	106,09	116,64	132,25	148,84	820,51
y^2	65536	53361	44944	38416	34225	30276	26569	23409	316736

$$\sum_{i=1}^{8}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})=\sum_{i=1}^{8}x_iy_i-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{8}x_i\sum_{i=1}^{8}y_i=15412-\frac{1}{8}\cdot 80{,}3\cdot 1570=\text{-}346{,}875;$$

$$S_x=\sqrt{\frac{1}{8}\left[\sum_{i=1}^{8}x_i^2-\frac{1}{8}\left(\sum_{i=1}^{8}x_i\right)^2\right]}=1{,}346;$$

$$S_y=\sqrt{\frac{1}{8}\left[\sum_{i=1}^{8}y_i^2-\frac{1}{8}\left(\sum_{i=1}^{8}y_i\right)^2\right]}=32{,}832$$

$$r=\frac{\text{-}\,346{,}875}{8\cdot 1{,}346\cdot 32{,}832}\approx 0{,}981$$

Коефіцієнт кореляції значущий, тому що

$$H = |r|\sqrt{n-1} = 0{,}981 \cdot \sqrt{8-1} = 2{,}595$$

більше табличного для рівня значущості *0,99* ($H_{табл}=2{,}29$).

Таким чином, можна вважати достатньо тісною лінійну залежність коефіцієнту об'ємного розширення (β) і в'язкості (μ), тому що це підтвердилося для восьми різноманітних значень.

По аналогії з прикладом 2.2 у курсовій роботі необхідно дослідити наявність лінійного зв'язку між двома фізичними властивостями з приведених у вхідних даних таблиці 2 індивідуального завдання до курсової роботи.

3 ЕМПІРИЧНІ ФОРМУЛИ

Для розрахунків і оптимізації, як правило, замість табличних даних і графіків використовуються формули, що відображують закономірності табличного або графічного матеріалу. Коли теорія процесу відсутня, дослідник змушений сам створювати математичну модель, тобто визначити її вид і обчислити коефіцієнти до неї. Найбільш коректно цю процедуру можна виконати з використанням МНК (*методу найменших квадратів*). Проте існують і інші достатньо прості способи підбору емпіричних рівнянь, основні з яких розглянуті нижче.

3.1 Вибір вигляду емпіричної формули. Метод вирівнювання

У деяких випадках вибір типу емпіричної формули робиться на основі теоретичних уявлень про характер залежності, що досліджується . У інших випадках доводиться підбирати формулу, порівнюючи криву, побудовану за даними спостережень, із типовими графіками формул. Такі графіки наведені в довідниках. Іноді виявляється, що емпірична крива схожа на декілька кривих, рівняння яких різні. Зміна чисельних коефіцієнтів, що входять у формулу, часто різко змінює вид її графіка. Вибір масштабу координатних осей відбивається на формі побудованої кривої, що також може призвести до відмінності експериментальної кривої від графіка цілком відповідної їй формули.

Тому, перед тим, як визначати чисельні значення коефіцієнтів в обраній емпіричній формулі, необхідно перевірити можливість її використання. Лише після цього можна перейти до відшукування тих значень постійних коефіцієнтів, що дадуть найкраще наближення дослідних і обчислених величин.

Метод вирівнювання полягає в зміні функції $y = F(x)$ (аналітичної залежності) таким чином, щоб перетворити її в лінійну. Досягається це шляхом заміни змінних x і y новими змінними $X=q(x,y)$ і $Y=g(x,y)$, що вибираються так, щоб утворилося рівняння прямої лінії:

$$Y = a + bX \tag{3.1}$$

Обчисливши значення X_i і Y_i по заданим x_i і y_i, наносять їх на графік (діаграму) із прямокутними координатами (X, Y). Якщо побудовані таким способом точки розташовуються поблизу прямої лінії, то обрана емпірична формула *y=F(x)* підходить для характеристики залежності *y=f (x)* (табличної функції).

Приклад 3.1. Задана деяка функція y=f(x), яка представлена у вигляді таблиці (вихідні дані таблиці 1)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x, г/л	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y, %	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0

Можна припустити, що для опису табличної функції можна використовувати наступні 4 аналітичні залежності (формули), отримані по довідниках.

$$y = a + b{\cdot}x; \tag{3.2}$$

$$y = a + b{\cdot}\sqrt{x}\,; \tag{3.3}$$

$$y = a + b{\cdot}x^2; \tag{3.4}$$

$$y = a + \frac{b}{x}. \tag{3.5}$$

Необхідно визначити вид емпіричної формули, яка найбільш точно відповідає дослідним даним.

Рішення. По експериментальним даним будуємо графік залежності (рис. 3.1).

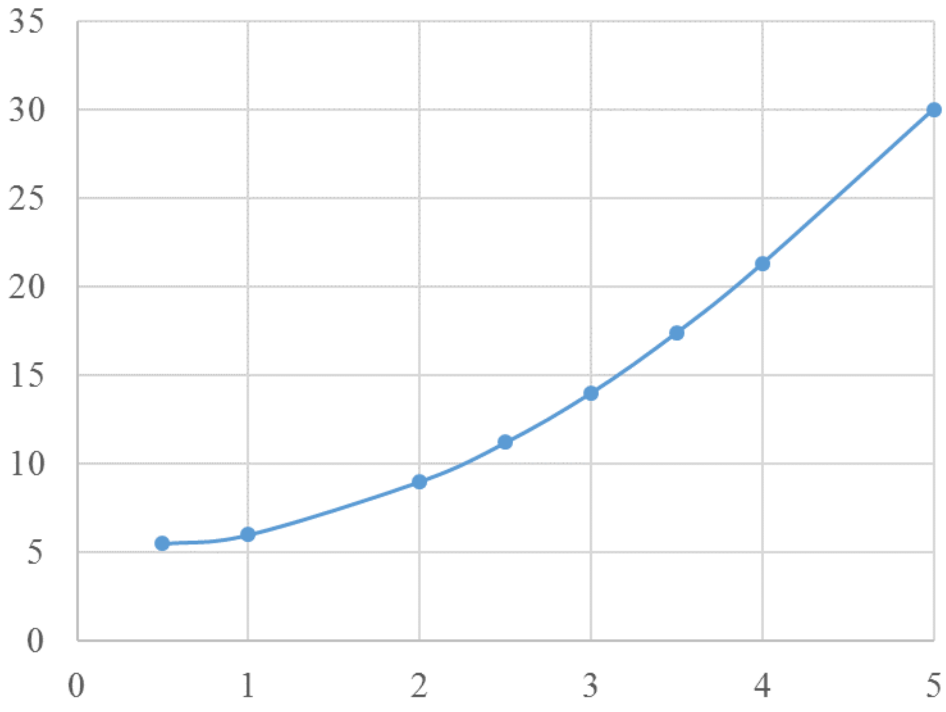

Рис. 3.1 – Графік табличної функції y=f(x)

Очевидно, що отримані точки графіку не укладаються на пряму, отже, лінійною залежністю (3.2) не можливо описати експериментальні дані, представлені у вигляді таблиці.

Перевіримо можливість використання емпіричних формул (3.3)–(3.5). Для цього введемо нові значення змінних так, щоб представлені формули перетворити на лінійні.

Для формули (3.3): $Y = y; X = \sqrt{x}$.

Для формули (3.4): $Y = y; X = x^2$.

Для формули (3.5): $Y = y; X = \frac{1}{x}$.

Розрахуємо нові значення змінних X і Y для кожного випадку (табл. 3.1–3.3) і побудуємо графіки у координатах (X, Y) (рис. 3.2 – 3.4).

Таблиця 3.1

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = \sqrt{x}$	0,707	1	1,414	1,581	1,732	1,871	2	2,236
$Y = y$	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30

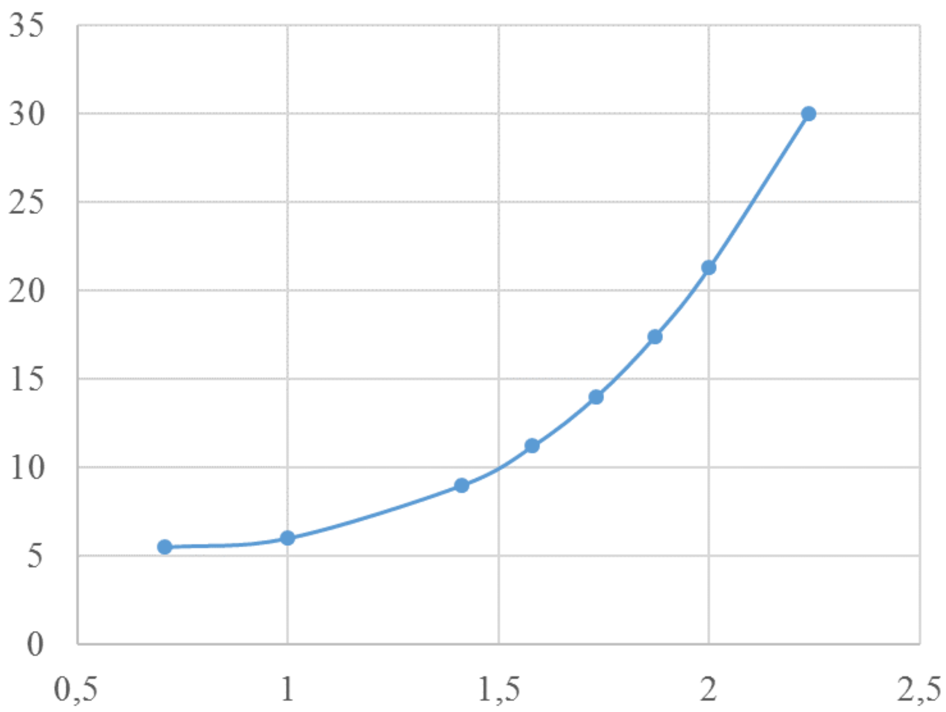

Рис. 3.2 – Графік функції по даним таблиці 3.1

Таблиця 3.2

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x^2$	0,25	1	4	6,25	9	12,25	16	25
$Y = y$	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30

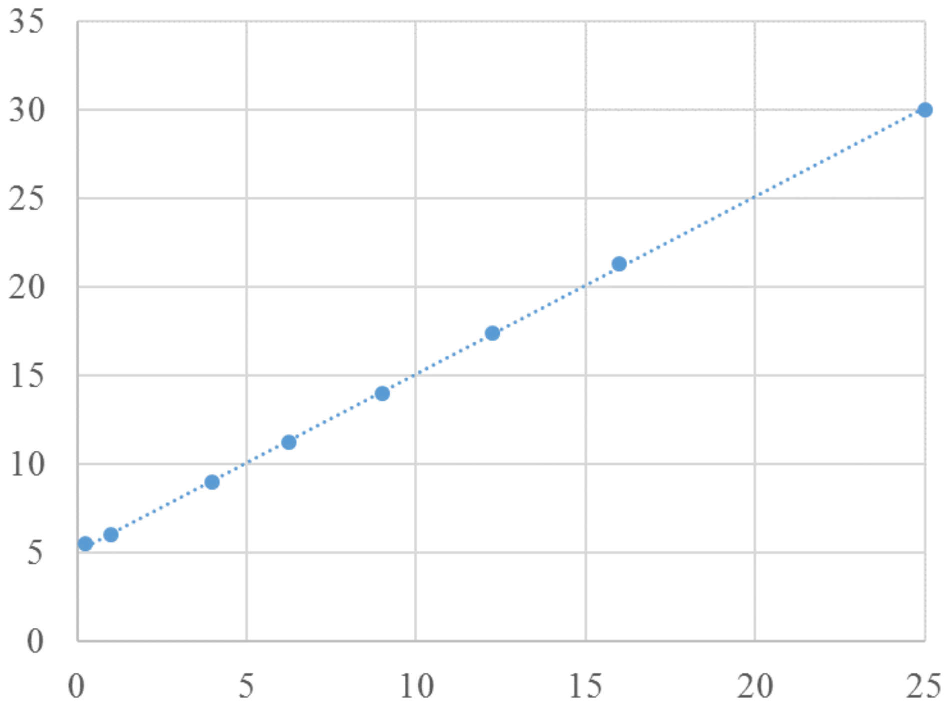

Рис. 3.3 – Графік функції по даним таблиці 3.2

Таблиця 3.3

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = \frac{1}{x}$	2	1	0,5	0,4	0,333	0,286	0,25	0,2
$Y = y$	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30

Точки графіку рис. 3.3 добре укладаються на пряму лінію. Це доказує можливість застосування формули (3.4) ($y = a + b \cdot x^2$) для опису експериментальних даних. Тобто, даною аналітичною залежністю можливо замінити табличну функцію $y=f(x)$ (вихідні дані таблиці 1).

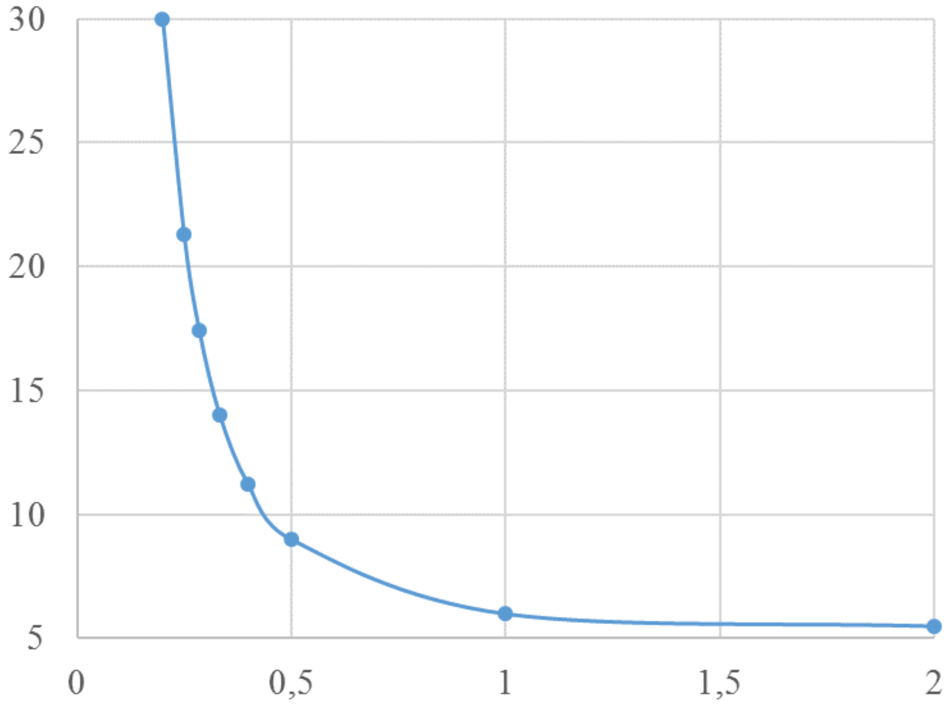

Рис. 3.4 – Графік функції по даним таблиці 3.3

3.2 Визначення параметрів емпіричної формули. Метод обраних точок

Після того як вид емпіричної залежності обрано, вирішується задача визначення найкращих коефіцієнтів (параметрів), що входять у цю формулу. *Як правило, пошук параметрів здійснюється для емпіричної формули, приведеної до лінійного виду*. В основному, застосовуються три методи: метод обраних точок, метод середніх і метод найменших квадратів.

Нехай емпірична формула має вид (3.1) Потрібно знайти значення коефіцієнтів a і b.

Нанесемо на координатну площину дослідні точки (X_i,Y_i). Як найближче до цих точок проводимо пряму (наближуюча пряма, рис. 3.3). На цій прямій вибираємо дві (по числу параметрів) довільні точки N_1 (X_1,Y_1) і N_2 (X_2,Y_2), не обов'язково збіжними з точками (X_i,Y_i) і якнайдалі віддаленими друг від друга. Координати цих точок підставляємо в рівняння (3.1), одержуємо систему:

$$\begin{aligned} Y_1 &= a + b \cdot X_1 \\ Y_2 &= a + b \cdot X_2 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Вирішуючи її, знаходимо a і b.

Приклад 3.2. По дослідним даним (табл. 3.2) визначити методом обраних точок коефіцієнти емпіричної залежності (3.4) прикладу 3.1

Рішення. Для визначення коефіцієнтів формули (3.4) ($y = a + b \cdot x^2$) прикладу 3.1 використовуємо її лінійний вид (3.1). Значення змінних $X = x^2$ і Y

$= y$ з табл. 3.2. Графік залежності $Y=f(X)$ приведено на рис. 3.5.

Проведемо близько до точок графіку наближуючу пряму (рис. 3.5) і виберемо на ній *довільні* точки $N_1(X_1,Y_1)$ і $N_2(X_2,Y_2)$.

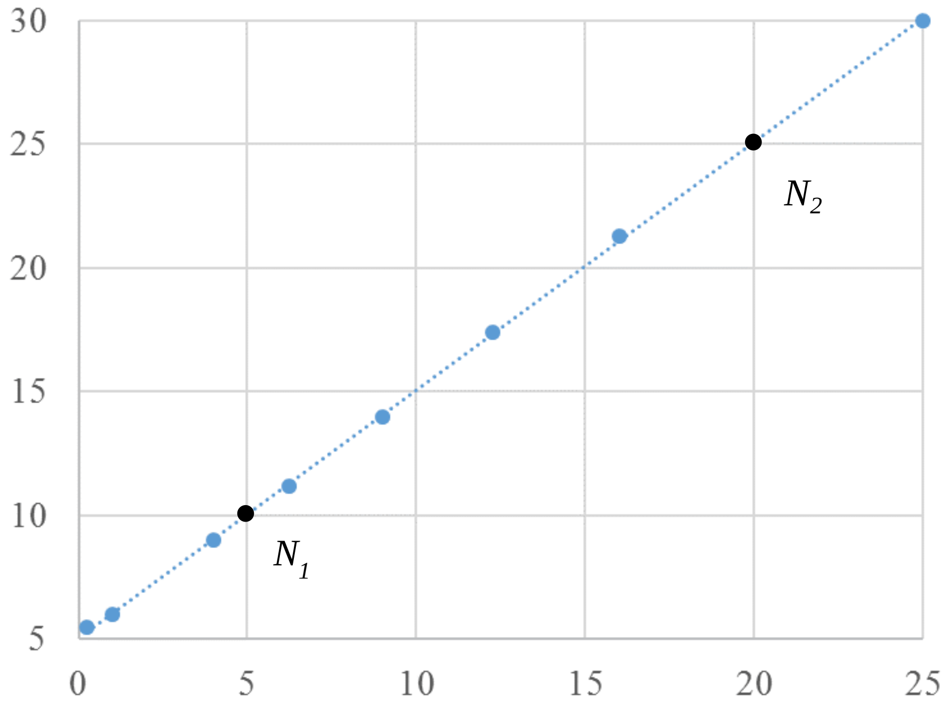

Рис. 3.5 – Наближуюча пряма до точок графіку залежності, який отримано за даними таблиці 3.2.

Координати цих точок N_1 *(5; 10)*, N_2 *(20; 25)* підставимо в рівняння (3.1) і одержимо таку систему:

$$10 = a + b \cdot 5$$
$$25 = a + b \cdot 20 \tag{3.7}$$

Розв'язавши систему рівнянь (3.7), знайдемо значення коефіцієнтів формули (3.1), а також в нашому випадку і емпіричної формули (3.4) ($y = a + b \cdot x^2$):

$$a = 5$$
$$b = 1 \tag{3.8}$$

Переходячи до початкового виду формули (3.4) одержимо остаточно її вид:

$$\tilde{y} = 5 + x^2 \tag{3.9}$$

Оцінимо точність отриманої формули по величині суми квадратів відхилень розрахункових даних від табличних (таблиця 3.4)

Таблиця 3.4 – Оцінка точності формули (3.9)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,5	1	2	2,5	3	3,5	4	5

Продовження таблиці 3.4

y	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30
$\tilde{y}_i$	5,25	6	9	11,25	14	17,25	21	30
$\Delta y_i = \tilde{y}_i - y_i$	–0,25	0	0	0,05	0	–0,15	–0,3	0
$(\Delta y_i)^2$	0,0625	0	0	0,0025	0	0,0225	0,09	0

$$\sum_{i=1}^{8}(\Delta y_i)^2 = 0,178.$$

3.3 Метод середніх

Нехай емпірична формула має вид (3.1). Підставимо у неї замість X і Y дослідні значення X_i і Y_i. Оскільки ліва частина формули звичайно не дорівнює правої, одержимо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} &a + b \cdot X_1 - Y_1 = E_1; \\ &a + b \cdot X_2 - Y_2 = E_2; \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ &a + b \cdot X_n - Y_n = E_n; \end{aligned} \qquad (3.10)$$

де $E_1, E_2, \ldots, E_n$ – відхилення, що можуть бути як позитивними, так і негативними.

Відповідно до методу середніх, за найкращу емпіричну залежність приймається та, що забезпечує *нульове значення суми відхилень* по всім експериментальним точкам, тобто алгебраїчна сума відхилень дорівнює нулю.

Для визначення параметрів a і b формули (3.1) поступають таким чином:

1) Складають умовні рівняння $Y_i = a + b \cdot X_i$, число котрих m дорівнює числу значень X_i і Y_i.
2) Умовні рівняння розбивають на приблизно рівні групи, число котрих n дорівнює числу коефіцієнтів, що потрібно визначити (у нашому випадку – 2).
3) Рівняння, що входять у кожну з цих груп, складають. Для даного випадку одержуємо два рівняння:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{k} Y_i = k \cdot a + b \cdot \sum_{i=1}^{k} X_i; \\ &\sum_{i=k+1}^{m} Y_i = (m-k) \cdot a + b \cdot \sum_{i=k+1}^{m} X_i. \end{aligned} \qquad (3.11)$$

4) З системи цих рівнянь знаходять невідомі коефіцієнти a і b.

Угруповання умовних рівнянь перед їхнім підсумовуванням можливо провести різноманітними способами, причому кожний із них дає декілька значень коефіцієнтів, що відрізняються. *Рекомендується групувати рівняння в порядку монотонної зміни однієї зі змінних.*

Приклад 3.3. По дослідним даним (табл. 3.2) визначити методом середніх коефіцієнти емпіричної залежності (3.4).

Рішення. Для визначення коефіцієнтів формули (3.4) ($y = a + b{\cdot}x^2$) прикладу 3.1 використовуємо її лінійний вид (3.1). Значення змінних $X = x^2$ і $Y = y$ беруться з табл. 3.2. 8 пар значень розбиваємо на 2 групи і складаємо для кожної групи по 4 умовних рівняння $Y_i = a + b \cdot X_i$:

$5{,}5 = a + b \cdot 0{,}25$	$14 = a + b \cdot 9$
$6 = a + b \cdot 1$	$17{,}4 = a + b \cdot 12{,}25$
$9 = a + b \cdot 4$	$21{,}3 = a + b \cdot 16$
$11{,}2 = a + b \cdot 6{,}25$	$30 = a + b \cdot 25$

Підсумовуючи почленно кожну групу, одержимо систему нормальних рівнянь:

$$31{,}7 = 4 \cdot a + b \cdot 11{,}5$$
$$82{,}7 = 4 \cdot a + b \cdot 62{,}25$$

Розв'язавши систему, знаходимо значення коефіцієнтів формули (3.4), приведеної до лінійного виду, а також в нашому випадку і вихідної залежності ($y = a + b{\cdot}x^2$):

$$a = 5{,}036$$
$$b = 1{,}005 \qquad (3.12)$$

Переходячи до початкового виду формули (3.4) одержимо остаточно її вид:

$$\tilde{y} = 5{,}036 + 1{,}005\, x^2 \qquad (3.13)$$

Оцінимо точність отриманої формули по величині суми квадратів відхилень розрахункових даних від табличних (таблиця 3.5)

Таблиця 3.5 – Оцінка точності формули (3.13)

№ *досліду*	1	2	3	4	5	6	7	8
x	0,5	1	2	2,5	3	3,5	4	5
y	5,5	6	9	11,2	14	17,4	21,3	30
$\tilde{y}_i$	5,287	6,041	9,056	11,317	14,081	17,347	21,116	30,161
$\Delta y_i = \tilde{y}_i - y_i$	–0,213	0,041	0,056	0,117	0,081	–0,053	–0,184	0,161
$(\Delta y_i)^2$	0,0453	0,0017	0,003	0,014	0,007	0,003	0,034	0,026

$$\sum_{i=1}^{8} (\Delta y_i)^2 = 0{,}133.$$

Як видно з зіставлення суми квадратів відхилень (табл. 3.4 і 3.5), менша похибка забезпечується при використанні методу середніх у порівнянні з методом обраних точок.

У курсовій роботі необхідно порівняти результати, отримані при застосуванні трьох методів: обраних точок, середніх і найменших квадратів.

4 ЛІНІЙНИЙ РЕГРЕСІЙНИЙ АНАЛІЗ

Дослідження й оптимізація складних неорганізованих систем можлива лише за допомогою статистичних, імовірнісних методів. Вихідною точкою для таких досліджень є аналог фізичної формули – *математична модель* системи, що носить назву *моделі експерименту* або *рівняння регресії*. Проте не завжди експериментальний матеріал дає можливість знайти зручний і точний вид моделі. У більш загальному випадку математична модель створюється на підставі статистичного методу – регресійного аналізу.

Рівняння регресії представляє математичну форму залежності фізичної величини, що досліджується, від факторів, що впливають на неї. Вибір того або іншого виду рівняння (що залежить від самого дослідника, який пропонує модель) визначає точність (*адекватність*), з якою модель описує в необхідних межах реальну дійсність. Такий вибір виду рівняння визначається дослідником на підставі апріорних даних про процес, вивчення факторів, що впливають на процес, від яких залежить величина, що вимірюється, а також зручності використання математичної моделі даного конкретного виду. Методи регресійного аналізу дозволяють із декількох різноманітних по виду моделей вибрати найбільш адекватну. Регресійний аналіз зводиться до визначення на підставі експериментальних даних коефіцієнтів моделі (коефіцієнтів регресії), оцінки значущості величин цих коефіцієнтів і ступеня адекватності моделі.

При статистичній оцінці ступеня адекватності моделі експериментальним результатам найбільше часто використовують критерій величини квадрата відхилення цих результатів від розрахункових значень, отриманих на підставі даної моделі. Процедура оцінки значень коефіцієнтів регресії і адекватності, при якій квадрат відхилення є мінімальним, зветься *методом найменших квадратів (МНК).*

4.1 Метод найменших квадратів

Емпірична формула в загальному виді може бути записана так:

$$\tilde{y}_i = F(x_i, a_j), \tag{4.1}$$

де x_i – незалежні змінні, a_j – коефіцієнти емпіричної залежності.

Відповідно до методу найменших квадратів найкращими будуть коефіцієнти, знайдені за умови:

$$min\,\{R(a_j)\} = \sum_{i=1}^{n}[\,f(x_i) - F(x_i, a_j)]^2 \;\; (i = 1, 2, \ldots ,n; \;\; j = 0, 1, \ldots , m) \tag{4.2}$$

тобто мінімуму суми квадратів відхилень між експериментальними ($y_i=f(x_i)$) і розрахунковими ($\tilde{y}_i$) значеннями.

При фіксованих значеннях x_i функція $R(a_j)$ є позитивно визначеною функцією (заданою і неперервною на інтервалі [x_1, x_n]) і, отже має екстремум. Необхідною умовою існування екстремуму функції декількох змінних є рівність нулю часткових похідних.

Нехай емпірична формула має вид

$$F(x_i, a_j) = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + ... + a_m x_i^m \quad (4.3)$$

Тоді вираз (4.2) можна записати в такому виді:

$$R(a_j) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + ... + a_m x_i^m)^2 \quad (4.4)$$

Знайдемо часткові похідні функції $R(a_0, a_1, ... , a_m)$ по $a_0, a_1, ... , a_m$ і дорівняємо їх до нуля. Одержимо так називану нормальну систему $m+1$ рівнянь із $m+1$ невідомими $a_0, a_1,... , a_m$:

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

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

. . . .

$$\frac{\partial R}{\partial a_m} = 2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + ... + a_m x_i^m) \cdot x_i^m = 0 \quad (4.5)$$

Розв'язавши систему (4.5) відомими методами (формули Крамера, метод Гауса та ін.), знайдемо коефіцієнти $a_0, a_1,... , a_m$ емпіричної формули (4.3).

На практиці, як правило, при визначенні коефіцієнтів по методу найменших квадратів будь-яку емпіричну залежність *доцільно призвести до лінійного виду*. Розглянемо одержання системи нормальних рівнянь для цього випадку.

Потрібно визначити коефіцієнт емпіричної формули

$$\tilde{y}_i = F(x_i,a_j) = a + b \cdot x_i. \quad (4.6)$$

Тоді вираз (4.4) прийме вид:

$$R\,(a_j, x_i) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a + b \cdot x_i)^2 \quad (4.7)$$

Нормальна система для визначення a і b буде мати такий вид:

$$\frac{\partial R}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^{n} (\, y_i - a + b \cdot x_i) \cdot 1 = 0$$

$$\frac{\partial R}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - a + b \cdot x_i) \cdot x_i = 0 \quad (4.8)$$

Зробивши найпростіші перетворення, одержимо:

$$a \cdot n + b \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$a \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i + b \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i \quad (4.9)$$

Розв'язавши систему (4.9), одержуємо значення a і b. Підставивши їх у вираз (4.6), отримаємо вид емпіричної формули.

Коефіцієнти регресії b і a можна обчислити по формулам:

$$b = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}; \tag{4.10}$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - b\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}. \tag{4.11}$$

В цих виразах коефіцієнти регресії визначаються на підставі вимірів, проведених у n експериментальних точках ($n > 2$).

Для знаходження коефіцієнтів рівняння $y = a + b\,x$ по методу найменших квадратів (МНК) можна користуватися прикладною програмою *mnk.exe*.

4.2 Аналіз рівняння регресії

Дисперсія адекватності моделі $S_{ад}^2$ характеризує міру відхилення даних $\tilde{y}_i$, отриманих розрахунком по рівнянню регресії (4.6) від реальних експериментальних результатів y_i для і-ої точки, у якій проведено вимір. Значення $S_{ад}^2$ знаходять за формулою:

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \tilde{y}_i)^2}{n-2}, \tag{4.12}$$

при числі ступенів свободи $f = n - 2$.

Після обчислення коефіцієнтів моделі a і b обчислюють дисперсії S_a^2 і S_b^2, пов'язані з визначенням коефіцієнтів:

$$S_b^2 = \frac{n \cdot S_{ад}^2}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2};$$

$$S_a^2 = \frac{S_b^2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n}, \tag{4.13}$$

при числі ступенів свободи $f = n - 2$.

Після обчислення дисперсій варто перевірити *статистичну значущість* коефіцієнтів a і b. Ця перевірка дає відповідь на питання про те, чи проходить пряма (4.5) через початок координат або ні, і чи відрізняється кут її нахилу від 45º. Найбільше простим критерієм значущості для такої перевірки є *критерій Стьюдента* (t–критерій). Величина критерію Стьюдента залежить від рівня довірчості P і числа ступенів свободи f, тобто $t = t\ (P, f)$. Часто замість рівня довірчості користуються поняттям рівень значущості $\alpha = 1 - P$.

Значення критерію Стьюдента для P = 0,95 приведені в табл. 2.4.

Таблиця 4.1 – Значення критерію Стьюдента для рівня довірчості P = 0,95

$n–k$	1	2	4	6	8	10	15	20	30
t	12,7	4,30	2,80	2,45	2,30	2,23	2,03	2,09	2,04

де n – число дослідів, k – число констант, що визначаються із них.

Довірчі границі Δa і Δb для цих коефіцієнтів обчислюються за формулами:

$$\Delta a = \pm\ t\ \cdot S_a;$$
$$\Delta b = \pm\ t\ \cdot S_b. \qquad (4.14)$$

Коефіцієнти рівняння значущі, якщо виконуються умови $|a|>|\Delta a|$ і $|b|>|\Delta b|$.

Після визначення коефіцієнтів регресії та оцінки їхньої значущості (по абсолютній величині) перевіряють адекватність самого рівняння регресії. Відхилення розрахункового значення $\tilde{y}_i$ від експериментального y_i може мати місце або тому, що обрана модель недосконала, або внаслідок випадкових похибок. Тому статистична оцінка адекватності проводиться по F-критерію:

$$F_{експ} = \frac{S^2_{ад}}{S^2_y}, \qquad (4.15)$$

при числі ступенів свободи чисельника $n–2$, а знаменника $n\ (m–1)$. Тут S^2_y – дисперсія відтворюваності при вимірі величини y або вибіркова дисперсія, m – число паралельних вимірів (мінімальне значення – 2)

Значення критерію Фішера для рівня довірчості P = 0,95 приведені в табл. 2.5.

Таблиця 4.2 – Значення критерію Фішера для рівня довірчості P = 0,95

m–1	*F–критерій при різних n–k*							
	1	*2*	*4*	*6*	*8*	*10*	*16*	*40*
1	161	200	225	234	239	242	246	251
2	18,50	19,00	19,25	19,33	19,37	19,39	19,43	19,47
3	10,13	9,55	9,12	8,94	8,84	8,78	8,69	8,60
4	7,71	6,94	6,39	6,16	6,04	5,96	5,84	5,71

Вибіркова дисперсія S^2_y визначається при опрацюванні результатів паралельних вимірів y_i у кожній точці по формулі:

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij} - \tilde{y}_i)^2}{n(m-1)} \,. \tag{4.16}$$

Вибіркову дисперсію можна розрахувати, знаючи усереднену похибку вимірів (див. приклад 4.1) .

Якщо значення $F_{експ}$, отримане по формулі (4.15), менше табличного при обраному рівні значущості, то рівняння (4.1) *адекватно* (точно) описує експериментальні результати. Якщо $F_{експ} > F_{табл}$, варто запропонувати інший вид рівняння і досліджувати нове рівняння регресії.

Приклад 4.1. Задана деяка функція y=f(x), яка представлена у вигляді таблиці (вихідні дані таблиці 1)

Таблиця 4.3

№ *досліду*	1	2	3	4	5	6	7	8
x, г/л	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y, %	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0

Для цієї залежності визначити коефіцієнти рівнянь лінійної регресії

$$y = a + b \cdot x; \tag{4.17}$$

і нелінійних регресій виду

$$y = a + b \cdot x^2; \tag{4.18}$$

$$y = a\, e^{bx}\,. \tag{4.19}$$

Зробити аналіз адекватності всіх моделей.

Рішення. Для лінійної регресії ($y = a + b\ x$) визначаємо коефіцієнти нормальних рівнянь по методу найменших квадратів (4.9).

Для цього проводимо попередні обчислення (див. табл. 4.4).

Таблиця 4.4 – Дані для розрахунку коефіцієнтів нормальних рівнянь лінійної регресії (y = a + b x)

№ *досліду*	1	2	3	4	5	6	7	8	$\sum_{i=1}^{8}$
x	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0	*21,5*
y	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0	*114,4*
$x \cdot y$	85,2	18	2,75	28	42	6	60,9	150	*392,85*
x^2	16	4	0,25	6,25	9	1	12,25	25	*73,75*

Система нормальних рівнянь має вид:

$$a \cdot 8 + b\ \ 21{,}5 = 114{,}4$$
$$a \cdot 21{,}5\ + b \cdot 73{,}75^2 = 392{,}85 \qquad (4.20)$$

Розв'язавши систему (4.20) знаходимо значення коефіцієнтів (4.10), (4.11):

$$a = -0{,}0726$$
$$b = 5{,}348$$

Лінійна регресія має вид:

$$y = -\,0{,}0726 + 5{,}348\ \cdot x. \qquad (4.21)$$

Розраховуємо по рівнянню (4.21) $\tilde{y}_i$ в кожній точці x_i (табл. 4.5).

Таблиця 4.5 – Дані розрахунків по рівнянню (4.21)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0
$\tilde{y}_i$	21,319	10,623	2,601	13,297	15,971	5,275	18,645	26,667
$\Delta y_i = \tilde{y}_i - y_i$	0,0191	1,623	–2,899	2,097	1,971	-0,725	1,245	–3,333
$(\Delta y_i)^2$	0,000368	2,635	8,402	4,399	3,886	0,525	1,551	11,108

$$\sum_{i=1}^{8}(\Delta y_i)^2 = 32{,}505$$

Потрібно перевірити адекватність отриманої *лінійної моделі* та оцінити її коефіцієнти.

Дисперсія адекватності моделі (по формулі 4.12):

$$S^2_{ад} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \tilde{y}_i)^2}{n-2} = \frac{32{,}505}{8 - 2} = 5{,}418$$

Для оцінки значимості коефіцієнтів рівняння регресії визначимо дисперсії S^2_a і S^2_b по формулам (4.13).

$$S^2_b = \frac{n \cdot S^2_{ад}}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2} = \frac{8 \cdot 5{,}418}{8 \cdot 73{,}75 - 21{,}5^2} = 0{,}339;$$

$$S^2_a = \frac{S^2_b \sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n} = \frac{0{,}339 \cdot 73{,}75}{8} = 3{,}128$$

$$S_a = 1{,}768$$
$$S_b = 0{,}582$$

Використовуючи формули (4.14) і обравши з табл. 4.1 значення критерію Стьюдента при $n - k = 6$, що дорівнює $t = 2{,}45$ знаходимо довірчі границі Δa і Δb.

$$\Delta a = \pm 2{,}45 \cdot 1{,}768 = \pm 4{,}333$$
$$\Delta b = \pm 2{,}45 \cdot 0{,}582 = \pm 1{,}427$$

Так як по абсолютному значенню $|a|<|\Delta a|$, а $|b|>|\Delta b|$, то коефіцієнти рівняння a – не значущий, b – значущий.

У даному випадку не існує даних для визначення вибіркової дисперсії S_y^2 по результатам паралельних вимірів. Тому вибіркову дисперсію S_y^2 визначаємо по точності виміру тиску $\delta_P=\pm 2\%$ (стандартна характеристика приладу для вимірювання). Середнє відхилення виміру y:

$$\Delta y = \pm 0{,}02 \cdot y_{сер} = \pm 0{,}02 \cdot \frac{\sum_{i=1}^{8} y_i}{8} = \pm 0{,}02 \cdot \frac{114{,}4}{8} = \pm 0{,}286$$

При мінімальній кількості паралельних вимірів у кожній точці $m=2$ максимальне значення дисперсії відтворюваності складе:

$$S_y^2 = \frac{m(\Delta y)^2}{m-1} = \frac{2 \cdot 0{,}286^2}{1} = 0{,}164$$

Критерій Фішера по формулі (4.15)

$$F_{эксп} = \frac{5{,}418}{0{,}164} = 33{,}12 .$$

Табличне значення критерію Фішера ($F_{табл}$) знаходимо по числу ступенів свободи чисельника ($S_{ад}^2$) і знаменника (S_y^2)

$$f_1 = n - k = 8 - 2 = 6 ,$$
$$f_2 = m - 1 = 2 - 1 = 1 ,$$

де $n = 8$ – кількість експериментальних точок; $k = 2$ – кількість знайдених коефіцієнтів моделі; $m = 2$ – кількість паралельних вимірів у кожній точці (приймаємо мінімальне значення $m = 2$).

По табл. 4.2 $F_{6,1} = 234$. Оскільки $F_{експ}<F_{табл}$, то *лінійна модель адекватна результатам експерименту*. Це очевидно і по величинам обчислених значень $\tilde{y}$, що не значно в цілому відрізняються від експериментальних.

При виконанні курсової роботи можливі варіанти неадекватності лінійної моделі.

Розглянемо тепер рівняння нелінійної регресії. Задану нелінійну залежність (4.18) необхідно попередньо призвести до лінійного виду шляхом введення нових змінних $Y = y;\ X = x^2$. В результаті отримаємо таку лінійну залежність:

$$Y = a + b X \qquad (4.22)$$

За допомогою додаткових даних розрахунку табл. 4.6., методу найменших квадратів і отриманих виразів (4.10) і (4.11) знаходимо значення коефіцієнтів a і b:

$$a = 5{,}074$$
$$b = 1{,}00081$$

Таблиця 4.6 – Дані для розрахунку коефіцієнтів нормальних рівнянь лінійної регресії $Y = a + b\,X$ (4.22)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8	$\sum_{i=1}^{8}$
$X = x^2$	16	4	0,25	6,25	9	1	12,25	25	*73,75*
$Y = y$	21,3	9	5,5	11,2	14	6	17,4	30	*114,4*
$X \cdot Y$	340,8	36	1,375	70	126	6	213,15	750	*1543,3*
X^2	256	16	0,0625	39,0625	81	1	150,063	625	*1168,2*

Для оцінки значущості обчислених коефіцієнтів регресії необхідно визначити дисперсію адекватності лінійної моделі

$$\tilde{Y} = 5{,}074 + 1{,}00081 \cdot X. \qquad (4.23)$$

Для цього розраховуємо значення $\tilde{Y}$, користуючись цим рівнянням і порівнюємо їх із значенням Y (табл. 4.7).

Таблиця 4.7 – Дані розрахунків по рівнянню (4.23)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x^2$	16	4	0,25	6,25	9	1	12,25	25
$Y = y$	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0
$\tilde{Y}$	21,087	9,077	5,324	11,329	14,081	6,075	17,334	30,094
$\Delta Y_i = \tilde{Y}_i - Y_i$	–0,213	0,077	–0,176	0,129	0,081	0,075	–0,066	0,094
$(\Delta Y_i)^2$	0,0459	0,0059	0,031	0,0166	0,00657	0,00557	0,0044	0,00884

$$\sum_{i=1}^{8} (\Delta Y_i)^2 = 0{,}124$$

Дисперсія адекватності в цьому випадку

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \tilde{Y}_i)^2}{n-2} = \frac{0{,}124}{8-2} = 0{,}0207$$

Для оцінки значимості коефіцієнтів рівняння регресії визначимо дисперсії S_a^2 і S_b^2 по формулам (4.13).

$$S_b^2 = \frac{n \cdot S_{ад}^2}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} X_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} X_i)^2} = \frac{8 \cdot 0{,}0207}{8 \cdot 1168{,}2 - 73{,}75^2} = 4{,}24 \cdot 10^{-5};$$

$$S_a^2 = \frac{S_b^2 \sum_{i=1}^{n} X_i^2}{n} = \frac{4{,}24 \cdot 10^{-5} \cdot 1168{,}2}{8} = 0{,}0062$$

$$S_a = 0{,}079$$

$$S_b = 0{,}0065$$

Використовуючи формули (4.14) і обравши з табл. 4.1 значення критерію Стьюдента при $n - k = 6$, що дорівнює $t = 2,45$ знаходимо довірчі границі Δa і Δb.

$$\Delta a = \pm 2,45 \cdot 0,079 = \pm 0,193$$

$$\Delta b = \pm 2,45 \cdot 0,0065 = \pm 0,016$$

Так як по абсолютному значенню $|a|>|\Delta a|$, а $|b|>|\Delta b|$, то коефіцієнти рівняння a – значущий, b – значущий. Тобто умови значущості виконуються для обох коефіцієнтів.

Далі, *для розрахунку критерію Фішера* потрібно повернутися до висхідного вигляду рівняння нелінійної регресії і перерахувати наново значення дисперсії адекватності.

$$\tilde{y} = 5,074 + 1,00081 \cdot x^2; \qquad (4.24)$$

Оскільки при введенні нових змінних $Y = y$; $X = x^2$ значення y, а також отриманих коефіцієнтів a і b не змінилось, то дисперсія адекватності буде мати точно таке значення, як і у випадку лінійної залежності. Також розрахунки, представлені в таблиці 4.7. повторювати не потрібно.

$$S^2_{ad} = 0,0207$$

Визначення вибіркової дисперсії S^2_y було виконано у попередньому випадку і також не потребує повторних розрахунків.

$$S^2_y = \frac{m(\Delta y)^2}{m-1} = \frac{2 \cdot 0,286^2}{1} = 0,164$$

Критерій Фішера по формулі (4.15)

$$F_{эксп} = \frac{0,0207}{0,164} = 0,127 \,.$$

Оскільки $F_{експ}<F_{табл}$, то *нелінійна модель адекватна результатам експерименту*. Це очевидно і по величинам обчислених значень $\tilde{y}$, що дуже близькі до експериментальних даних.

Розглянемо рівняння (4.19) нелінійної регресії. Задану нелінійну залежність необхідно попередньо призвести до лінійного виду шляхом введення нових змінних. Для цього формулу потрібно прологарифмувати:

$$ln\, y = ln\, (a\, e^{bx}) = la\, a + b \cdot x.$$

Позначимо $Y = ln\, y$; $A = ln\, a$; $X = x$. В результаті отримаємо таку лінійну залежність:

$$Y = A + b\,X \qquad (4.25)$$

За допомогою додаткових даних розрахунку табл. 4.8., методу найменших квадратів і отриманих виразів (4.10) і (4.11) знаходимо значення коефіцієнтів A і b:

$$A = 1,446$$

$$b = 0,395$$

Таблиця 4.8 – Дані для розрахунку коефіцієнтів нормальних рівнянь лінійної регресії Y = A + b X (4.25)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8	$\sum_{i=1}^{8}$
$X = x$	4	2	0,5	2,5	3	1	3,5	5	*21,5*
$Y = \ln y$	3,058	2,202	1,705	2,416	2,639	1,792	2,856	3,401	*20,065*
$X \cdot Y$	12,234	4,394	0,852	6,040	7,917	1,792	9,998	17,006	*60,234*
X^2	16	4	0,25	6,25	9	1	12,25	25	*73,75*

Для оцінки значущості обчислених коефіцієнтів регресії необхідно визначити дисперсію адекватності лінійної моделі

$$\tilde{Y} = 1{,}446 + 0{,}395 \cdot X. \qquad (4.26)$$

Для цього розраховуємо значення $\tilde{Y}$, користуючись цим рівнянням і порівнюємо їх із значенням Y (табл. 4.9).

Таблиця 4.9 – Дані розрахунків по рівнянню (4.26)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
$X = x$	4	2	0,5	2,5	3	1	3,5	5
$Y = \ln y$	3,058	2,202	1,705	2,416	2,639	1,792	2,856	3,401
$\tilde{Y}$	3,027	2,237	1,644	2,434	2,632	1,841	2,829	3,422
$\Delta Y_i = \tilde{Y}_i - Y_i$	–0,032	0,039	–0,061	0,018	–0,007	0,051	–0,027	0,021
$(\Delta Y_i)^2$	0,001	0,002	0,004	0,0003	$5{,}6 \cdot 10^{-5}$	0,002	0,0007	0,0004

$$\sum_{i=1}^{8} (\Delta Y_i)^2 = 0{,}103$$

Дисперсія адекватності

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \tilde{Y}_i)^2}{n - 2} = \frac{0{,}103}{8 - 2} = 0{,}00172$$

Для оцінки значимості коефіцієнтів рівняння лінійної регресії визначимо дисперсії S_a^2 і S_b^2.

$$S_b^2 = \frac{n \cdot S_{ад}^2}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} X_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} X_i)^2} = \frac{8 \cdot 0{,}00172}{8 \cdot 73{,}75 - 21{,}5^2} = 0{,}000107;$$

$$S_a^2 = \frac{S_b^2 \sum_{i=1}^{n} X_i^2}{n} = \frac{0{,}00107 \cdot 73{,}75}{8} = 0{,}000991$$

$$S_a = 0{,}0315$$

$$S_b = 0{,}0104$$

Довірчі границі Δa і Δb.

$$\Delta a = \pm 2{,}45 \cdot 0{,}0315 = \pm 0{,}0771$$
$$\Delta b = \pm 2{,}45 \cdot 0{,}0104 = \pm 0{,}0254$$

Так як по абсолютному значенню $|a|>|\Delta a|$, а $|b|>|\Delta b|$, то коефіцієнти рівняння a і b – значущі.

Для розрахунку критерію Фішера потрібно повернутися до висхідного вигляду рівняння нелінійної регресії і перерахувати наново значення дисперсії адекватності. В силу введених нами позначень $A = ln\ a$, тоді $a = e^A = e^{1,446} = 4{,}247$. Остаточний вигляд рівняння (4.19):

$$\tilde{y} = 4{,}247\ e^{0,395x}. \qquad (4.27)$$

Таблиця 4.10 – Дані розрахунків по рівнянню (4.27)

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
x	4,0	2,0	0,5	2,5	3,0	1,0	3,5	5,0
y	21,3	9,0	5,5	11,2	14,0	6,0	17,4	30,0
$\tilde{y}_i$	20,629	9,361	5,175	11,405	13,896	6,305	16,931	30,624
$\Delta y_i = \tilde{y}_i - y_i$	–0,671	0,361	–0,325	0,205	–0,104	0,305	–0,469	0,624
$(\Delta y_i)^2$	0,450	0,130	0,106	0,042	0,0108	0,0933	0,220	0,389

$$\sum_{i=1}^{8}(\Delta y_i)^2 = \underline{1{,}441}$$

Дисперсія адекватності:

$$S_{ад}^2 = 0{,}24$$

Вибіркова дисперсія:

$$S_y^2 = 0{,}164$$

Критерій Фішера по формулі (4.15)

$$F_{эксп} = \frac{0{,}24}{0{,}164} = 1{,}468.$$

Оскільки $F_{експ} < F_{табл}$, то *нелінійна модель адекватна результатам експерименту*.

В результаті проведених розрахунків з’ясувалось, що всі три представлені рівняння по статистичній оцінці за допомогою критерію Фішера адекватні результатам експерименту. Таким чином будь яким з них можливо апроксимувати (замінити) задану табличну функцію. При цьому найбільш точно цю задачу виконує нелінійне рівняння (4.18) з його остаточним виглядом (4.24) $\tilde{y} = 5{,}074 + 1{,}00081 \cdot x^2$. Даний висновок добре узгоджується з розрахунками прикладу 3.1.

5 ІНТЕРПОЛЯЦІЯ ФУНКЦІЙ

5.1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ІНТЕРПОЛЯЦІЇ

Нехай деяка функція $y=f(x)$ задана таблицею (табл. 5.1), тобто при значеннях аргументу $x=x_0, x_1, \dots , x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідні значення $y_0, y_1, \dots , y_n$.

Таблиця 5.1 – Таблиця експериментальних значень

x	x_0	x_1	x_2	....	x_n
y	y_0	y_1	y_2	....	y_n

Також нехай необхідно визначити значення $y=f(\bar{x})$, ($x_{i-1}<\bar{x}<x_i$). Величина $x=\bar{x}$ потрапляє між двома табличними значеннями, тому для обчислення значення функції необхідно запропонувати деякий характер її зміни між відомими експериментальними даними.

Інтерполяцію можна розглядати як процес визначення для даного аргументу x значення функції $y=f(x)$ по її декількох відомих значеннях. При цьому розрізняють *інтерполяцію у вузькому смислі*, коли x знаходиться між x_0 і x_n, і *екстраполювання*, коли x знаходиться поза відрізком інтерполяції $[x_0 , x_n]$.

Задача інтерполяції полягає в наступному. На відрізку $[a, b]$ задані $n+1$ точки $x_0, x_1, \dots , x_n$, що називаються *вузлами інтерполяції*, і значення деякої функції $f(x)$ у цих точках.

$$f(x_0) = y_0;$$
$$f(x_1) = y_1;$$
$$\dots\dots\dots$$
$$f(x_n) = y_n \tag{5.1}$$

Потрібно побудувати функцію $P_n(x)$ (*інтерполюючу функцію*), яка б задовольняла таким умовам:

$$P_n(x_0) = y_0;$$
$$P_n(x_1) = y_1;$$
$$\dots\dots\dots$$
$$P_n(x_n) = y_n \tag{5.2}$$

тобто інтерполююча функція $P_n(x)$ повинна приймати ті ж значення, що і функція $f(x)$, для вузлових значень аргументу $x_0, x_1, \dots , x_n$.

Геометрично це означає, що потрібно знайти криву $y=P_n(x)$ деякого визначеного типу, що проходить через задану систему точок M_i (x_i,y_i) $(i=0,1,2,..,n)$. Очевидно, можна побудувати множину неперервних функцій, що будуть проходити через задані вузлові точки.

Заміна функції $f(x)$ її інтерполяційним багаточленом $P_n(x)$ може знадобитися не тільки тоді, коли відома лише таблиця її значень, але і коли аналітичний вираз для $f(x)$ відомо, проте є занадто складним і незручним для подальших математичних перетворень (наприклад, для інтегрування, диференціювання та ін.). Іноді розглядаються задачі тригонометричної інтерполяції (інтерполююча функція – тригонометричний поліном). Інтерполюючою може бути також раціональна функція.

У загалі залежність, якою підпорядковується функція, може бути апроксимована багаточленом ступеня n:

$$P_n(x) = y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + ... + a_n \cdot x^n. \qquad (5.3)$$

Таку задачу називають задачею *параболічної інтерполяції (або інтерполюванням)*.

5.2 Параболічна інтерполяція

Для визначення коефіцієнтів багаточлена (5.3) необхідно мати $n+1$ вузлову точку. Аналітичне визначення коефіцієнтів інтерполяційного багаточлена для $n+1$ точки зводиться до рішення системи лінійних рівнянь $n+1$ порядку, кожне з яких являє собою вираз (5.3), записаний для визначеної вузлової точки

$$y_i = a_0 + a_1 \cdot x_i + a_2 \cdot x_i^2 + ... + a_n \cdot x_i^n, \qquad (5.4)$$

де $i = 1, 2,. . . n+1$.

Даним методом побудови інтерполяційного поліному зручно користуватися, маючи ЕОМ і відповідні програми. У бібліотеці прикладних програм ХТФ «Одеської політехніки» є програми для рішення систем лінійних рівнянь методами Гауса і Зейделя *(gz.exe)*, якими можна користуватися при вирішенні цієї задачі.

Даний метод не є єдиним способом побудови інтерполяційного поліному. Інший підхід, яким часто користуються на практиці, називається методом Лагранжа.

5.3 Метод Лагранжа

Нехай при $x=x_0, x_1, ... , x_n$ функція $f(x)$ приймає відповідно значення $y_0, y_1,... , y_n$. Багаточлен ступеня не вище n, що приймає у вузлових точках задані значення, має вид:

$$P_n(x)=y=\sum_{i=1}^{n}\frac{(x-x_0)(x-x_1).....(x-x_{i-1})(x-x_{i+1}).....(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1).....(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}).....(x_i-x_n)}\cdot y_i. \qquad (5.5)$$

Цей багаточлен (5.5) називається *інтерполяційною формулою Лагранжа* і має такі властивості:

1. При заданій сукупності вузлових точок будова багаточлена можлива тільки єдиним способом.
2. Багаточлен Лагранжа може бути побудовано при будь-якому розташуванні вузлів інтерполяції (включаючи і нерівномірне).

У розгорнутому виді форма Лагранжа має вид:

$$P_n(x)= \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)......(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)......(x_0-x_n)}\cdot y_0 +$$

$$+\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)......(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)......(x_1-x_n)}\cdot y_1+$$

$$+ \ldots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)......(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})......(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)......(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})......(x_i-x_n)}\cdot y_i \ +$$

$$+ \ldots \ + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)......(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)......(x_n-x_{n-1})}\cdot y_n . \qquad (5.6)$$

При $n=1$ формула Лагранжа має вид:

$$P(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}\cdot y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}\cdot y_1 \qquad (5.7)$$

і називається формулою лінійної інтерполяції.

При $n=2$ одержимо формулу квадратичної інтерполяції:

$$P(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\cdot y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\cdot y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\cdot y_2 \qquad (5.8)$$

5.4 Зворотна інтерполяція

Нехай функція $y= f(x)$ задана таблицею. Задача зворотної інтерполяції полягає в тому, щоб по заданому значенню функції y визначити відповідне значення аргументу x.

Якщо вузли інтерполяції x_0, x_1, x_2, ... x_n нерівновіддалені, задача легко вирішується за допомогою інтерполяційної формули Лагранжа (5.5). Для цього достатньо прийняти y за незалежну змінну, а x вважати функцією. Тоді отримаємо

$$x = \sum_{i=0}^{n} x_i \frac{(y-y_0)(y-y_1)\ldots(y-y_{i-1})(y-y_{i+1})\ldots(y-y_n)}{(y_i-y_0)(y_i-y_1)\ldots(y_i-y_{i-1})(y_i-y_{i+1})\ldots(y_i-y_n)} \qquad (5.9)$$

Приклад 5.1. Термодинамічні характеристики води на лінії насичення представлені в таблиці 5.1.

Таблиця 5.2 – Вихідні дані 2

T, °C	**110**	**120**	*130*	*140*	150	160	170	180
$\mu\cdot10^6$, Па·с	**256**	**231**	*212*	*196*	185	174	163	153
$\beta\cdot10^4$, 1/К	8,0	8,6	9,2	9,7	10,3	10,8	11,5	12,2
i, кДж/кг	461	503	545	587	629	671	713	755

Використовуючи метод параболічної інтерполяції, визначити необхідну ступінь поліному, його коефіцієнти і значення параметрів у зазначених *невузлових точках (при T=115°С); аналогічні розрахунки виконати з використанням формули Лагранжу. Визначити при якій температурі коефіцієнт в'язкості (μ) дорівнює 0,2 ·10⁻³ Па· с.*

Рішення. Для визначення, наприклад, значення коефіцієнта в'язкості (μ) в невузловій точці при температурі Т=115°С потрібно припустити на початку самий простіший характер зв'язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (Т) – *лінійний*. Тобто ступінь поліному дорівнює одиниці. Так, можна записати:

$$\mu^{(1)} = a + b \cdot T \qquad (5.10)$$

Для визначення коефіцієнтів a і b прямої потрібно вибрати з таблиці 5.1 *дві вузлові точки* між якими розташовано задане значення Т=115°С (або найближчі значення до нього для випадку екстраполювання). В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°С і 120°С. Використовуючи основну властивість інтерполюючого поліному (5.2) можна записати систему рівнянь і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a і b.

$$256 = a + b \cdot 110$$
$$231 = a + b \cdot 120$$
$$a = 531$$
$$b = -2{,}5$$

Остаточний вигляд залежності (5.10)

$$\mu^{(1)} = 531 - 2{,}5 \cdot T \qquad (5.11)$$

Визначимо коефіцієнт в'язкості для заданої температури:

$$\mu^{(1)} = 531 - 2{,}5 \cdot 115 = 243{,}5\ (\cdot 10^{-6},\ Па\cdot с)$$

Тепер припустимо більш складніший тип зв'язку між коефіцієнтом в'язкості (μ) і температурою (Т) – *квадратичний*. Тоді можна записати наступне:

$$\mu^{(2)} = a + b \cdot T + c \cdot T^2 \qquad (5.12)$$

Для визначення коефіцієнтів параболи потрібно вибрати вже три вузлові точки. В нашому випадку це значення коефіцієнта в'язкості для температур 110°С, 120°С і 130°С. Тоді стає можливим скласти систему 3 рівнянь, а також і розрахувати за допомогою методу Гауса коефіцієнти a, b і c.

$$256 = a + b \cdot 110 + c \cdot 110^2$$
$$231 = a + b \cdot 120 + c \cdot 120^2$$
$$212 = a + b \cdot 130 + c \cdot 130^2$$
$$a = 927$$
$$b = -9{,}4$$
$$c = 0{,}03$$

Тоді поліном другого порядку остаточно:

$$\mu^{(2)} = 927 - 9{,}4 \cdot T + 0{,}03 \cdot T^2 = 242{,}75\ (\cdot 10^{-6},\ Па\cdot с) \qquad (5.13)$$

Розрахуємо відносну похибку обчислень, виконаних для одного і того ж значення по температурі:

$$\beta = \frac{\left|\mu^{(2)} - \mu^{(1)}\right|}{\mu^{(1)}} \cdot 100\% = \frac{\left|242{,}75 - 243{,}5\right|}{243{,}5} \cdot 100\% = 0{,}31\%$$

Якщо прийняти за стандарт похибки експерименту величину 3%, то отримане нами значення виявляється значно меншим. Тобто для виконання задачі інтерполювання у випадку розрахунку коефіцієнта в'язкості для заданої температури остаточно приймаємо *лінійний* характер зв'язку.

Якщо в курсовій роботі виявиться, що похибка перевищує 3%, то потрібно розглянути варіант поліному 3-го порядку, і порівняти отриманий розрахунок з попереднім, з використанням поліному 2-го порядку. Зазвичай із зростанням ступеня поліному похибка в розрахунках буде те ж зростати. Тому в кінцевих висновках потрібно повернутися до поліномів нижчих ступенів.

Для заданих значень повторюємо обчислення за допомогою формули Лагранжа.

При $n=1$

$$\mu^{(1)}(T) = \frac{115-120}{110-120} \cdot 256 + \frac{115-110}{120-110} \cdot 231 = 243{,}5(\cdot 10^{-6},\ Па \cdot с)$$

Як бачимо, значення параметрів, розрахованих за допомогою параболічної інтерполяції і формули Лагранжа збігаються між собою.

При $n=2$

$$\mu^{(2)}(T) = \frac{(115-120)(115-130)}{(110-120)(110-130)} \cdot 256 + \frac{(115-110)(115-130)}{(120-110)(120-130)} \cdot 231 +$$
$$+ \frac{(115-110)(115-120)}{(130-110)(130-120)} \cdot 212 = 242{,}75\ (\cdot 10^{-6},\ Па \cdot с)$$

Зворотною інтерполяцією можна визначити температуру, при якій коефіцієнт в'язкості (μ) дорівнює $0{,}2 \cdot 10^{-3}$ $Па \cdot с$. Для цього скористаємося формулою Лагранжа, прийнявши μ за незалежну змінну, а Т – за функцію. Задане значення $\mu = 0{,}2 \cdot 10^{-3}\ Па \cdot с = 200 \cdot 10^{-6}\ Па \cdot с$ в таблиці 5.2. повинно розміститися між значеннями *212* і *196*, тому в нашу формулу будемо підставляти саме ці данні з таблиці.

$$T^{(1)}{}_{\mu = 0{,}2 \cdot 10^{-3}\ Па \cdot с} = \frac{200-196}{212-196} \cdot 130 + \frac{200-212}{196-212} \cdot 140 = 137{,}5\,℃$$

Потрібно відмітити, що знайдене значення температури знаходиться також між двома відповідними табличними *130℃* і *140℃*.

Для вирішення задач інтерполяції з використанням формули Лагранжа в курсовій роботі можна застосовувати прикладну програму *lagrang.exe*.

Існує ще цілий ряд методів інтерполяції – метод кінцевих різниць, інтерполяційні формули Ньютона та ін. Розглянемо метод кінцевих різниць.

5.5 Інтерполяційні формули Ньютона

5.5.1 Поняття про кінцеві різниці різних порядків

Для табличної функції $y=f(x)$ із постійним шагом h (тобто з рівновіддаленими вузлами інтерполяції):

$$x_k = x_0 + k \cdot h, \; y_k = f(x_k) \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \tag{5.14}$$

побудову інтерполяційного багаточлена зручніше усього робити по формулам, що використовують табличні різниці функції.

Табличні (кінцеві) різниці функції (різниці першого порядку) визначаються так:

$$\Delta y_k = y_{k+1} - y_k \qquad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \tag{5.15}$$

Різниці другого порядку визначаються як різниці різниць першого порядку:

$$\Delta^2 y_k = \Delta y_{k+1} - \Delta y_k = y_{k+2} - 2y_{k+1} + y_k \tag{5.16}$$

Різниці порядку n визначаються:

$$\Delta^n y_k = \Delta^{n-1} y_{k+1} - \Delta^{n-1} y_k \tag{5.17}$$

Різниці різних порядків можуть бути виражені безпосередньо через значення функції:

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i;$$
$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i;$$
$$\Delta^3 y_i = \Delta^2 y_{i+1} - \Delta^2 y_i = (y_{i+3} - 2y_{i+2} + y_{i+1}) - (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i) =$$
$$= y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i. \tag{5.18}$$

Можна довести, що для будь-якого m

$$\Delta^m y_i = y_{i+m} - m\, y_{i+m-1} + \frac{m(m-1)}{2!} y_{i+m-2} -$$
$$- \frac{m(m-1)(m-2)}{3!} y_{i+m-3} + \dots + (-1)^{m-1} m\, y_{i+1} + (-1)^m y_i. \tag{5.19}$$

Кінцеві різниці різних порядків зручно розташовувати у формі таблиць: горизонтальної (табл. 5.3) і діагональної (табл. 5.4).

Таблиця 5.3 – Горизонтальна таблиця різниць

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	
x_2	y_2	Δy_2		
x_3	y_3			

Таблиця 5.4– Діагональна таблиця різниць

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
x_0	y_0			
		Δy_0		
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$	
		Δy_1		$\Delta^3 y_0$
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$	
		Δy_2		
x_3	y_3			

Якщо дані розташовані в таблицях через рівні інтервали Δy, то критерієм вибору показника ступеня n моделі у виді поліному

$$y = b_0 + b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2 + ... + b_n \cdot x^n$$

є стійкість значень n-ої послідовної різниці $\Delta^{(n)}y_i$ табличних даних.

На початку таблиці, де нарощування вузлів інтерполяції можна робити тільки вперед від початкової точки x_0, застосовується *перша інтерполяційна формула Ньютона.* Наприкінці таблиці, де нарощування вузлів інтерполяції можна робити тільки назад від початкової точки x_0, застосовується *друга інтерполяційна формула Ньютона.*

5.5.2 Перша інтерполяційна формула Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції

Будемо шукати багаточлен $P_n(x)$ ступеня n, що задовольняє умовам (5.2), у виді

$$P_n(x)= a_0 + a_1 (x - x_0) + a_2 (x - x_0) (x - x_1) + a_3 (x - x_0) (x - x_1) (x - x_2) + ...+ a_n (x - x_0) (x - x_1) (x - x_2) ...(x - x_{n-1}), \qquad (5.20)$$

де $x_0, x_1, ... x_n$ — задані значення аргументу x, причому $x_i - x_{i-1} = h = const$ ($i=0,1, ... , n$), коефіцієнти $a_0, a_1, . . . , a_n$ нам невідомі. Будемо їх визначати, виходячи з умов (5.2).

Положимо у формулі (5.20) $x = x_0$. Тоді $P_n(x_0) = a_0$. Проте, в силу умов (5.2), $P_n(x_0) = y_0$. Отже, $a_0 = y_0$.

Для визначення a_1 положимо в (5.20) $x = x_1$, після чого отримаємо

$$P_n(x_1) = a_0 + a_1 (x_1 - x_0).$$

Враховуючи, що $P_n(x_1) = y_1$, $a_0 = y_0$, $(x_1 - x_0) = h$, можемо записати $y_1 = y_0 + a_1 h$, відкіля $a_1 = \dfrac{y_1 - y_0}{h}$. Проте $y_1 - y_0 = \Delta y_0$ – кінцева різниця 1-го порядку, отже, $a_1 = \dfrac{\Delta y_0}{h}$.

Далі, вважаючи $x = x_2$, отримаємо

$$P_n(x_2) = a_0 + a_1 (x_2 - x_0) + a_2 (x_2 - x_0) (x_2 - x_1).$$

Оскільки $P_n(x_2) = y_2$, $a_0 = y_0$, $a_1 = \dfrac{\Delta y_0}{h}$, $(x_2 - x_0) = 2h$, $(x_1 - x_0) = h$, запишемо:

$$y_2 = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} \cdot 2 \cdot h + a_2 \cdot 2 \cdot h \cdot h;$$

звідси

$$a_2 = \frac{y_2 - y_0 - 2 \Delta y_0}{2h^2}.$$

Але $\Delta y_0 = y_1 - y_2$, тому

$$y_2 - y_0 - 2 \Delta y_0 = y_2 - y_0 - 2 (y_1 - y_0) = y_2 - 2 y_1 + y_0 = \Delta^2 y_0.$$

Отже,

$$a_2 = \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}.$$

Аналогічні подальші обчислення (з урахуванням формули (5.19), що виражає різниці різних порядків через значення функції), дозволяють записати інші коефіцієнти:

$$a_3 = \frac{\Delta^3 y_0}{3!\,h^3}, \ldots a_k = \frac{\Delta^k y_0}{k!\,h^k}, \ldots a_n = \frac{\Delta^n y_0}{n!\,h^n}.$$

Підставивши знайдені вирази коефіцієнтів у формулу (5.20), отримаємо

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

$$\ldots + \frac{\Delta^n y_0}{n!\,h^n}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_{n-1}). \tag{5.21}$$

Це і є *перша інтерполяційна формула Ньютона.* Її можна представити в декілька іншому виді, більш зручному для практичного використання.

Позначимо

$$\frac{x - x_0}{h} = q.$$

Тоді

$$\frac{x - x_1}{h} = \frac{x - (x_0 + h)}{h} = q - 1;$$

$$\frac{x - x_2}{h} = q - 2;\ \ldots$$

$$\frac{x - x_{n-1}}{h} = q - n + 1$$

і формула (5.21) буде мати вид

$$P_n(x) = y_0 + q\,\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \ldots +$$

$$+ \frac{q(q-1)(q-2)\ldots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0. \tag{5.22}$$

Формулу (5.22) можна використовувати для інтерполяції (екстраполювання) функції $y=f(x)$ в околі початкового значення x_0, де q мало по абсолютному розміру.

Якщо у формулі (5.22) прийняти n=1, одержимо формулу *лінійної інтерполяції:*

$$P_1(x) = y_0 + q\,\Delta y_0.$$

При n=2 будемо мати формулу *параболічної*, або *квадратичної інтерполяції:*

$$P_2(x) = y_0 + q\,\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0.$$

При застосуванні першої інтерполяційної формули Ньютона зручно користуватися горизонтальною таблицею кінцевих різниць, тому що тоді потрібні значення різниць функції знаходяться у відповідному горизонтальному рядку таблиці.

Ступінь *n* поліному $P_n(x)$ на практиці бажано вибирати так, щоб кінцеві різниці $\Delta^n y_i$ були практично постійними. За початкове значення x_0 можна приймати будь-яке табличне значення аргументу *x*.

5.5.3 Друга інтерполяційна формула Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції

Одержимо формулу, котрою зручно користуватися для інтерполяції (екстраполювання) функції $y=f(x)$ наприкінці таблиці. Напишемо інтерполяційний багаточлен $P_n(x)$ у виді

$$P_n(x)= a_0 + a_1 (x-x_n) + a_2 (x-x_n)(x-x_{n-1}) + a_3 (x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2}) + \ldots + a_n (x-x_n)(x-x_{n-1}) \ldots (x-x_1). \quad (5.23)$$

Коефіцієнти $a_0, a_1, \ldots a_n$ визначаємо з тої ж умови (5.2):

$$P_n(x_i) = f(x_i) = y_i \ (i = 0, 1, 2, \ldots , n).$$

Положимо у (5.23) $x = x_n$. Тоді $a_0 = y_n$.

Тепер нехай $x = x_{n-1}$. Враховуючи, що $P_n(x_{n-1}) = y_{n-1}$, $a_0 = y_n$, $x_{n-1}-x_n= -h$, можемо записати:

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

Звідси

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

Далі, положимо в (5.23) $x=x_{n-2}$ і замінюючи знайдені коефіцієнти a_0, a_1 їхніми значеннями, отримаємо

$$a_2 = \frac{y_n - 2y_{n-1} + y_{n-2}}{2h^2} = \frac{\Delta y^2{}_{n-2}}{2!\,h^2}.$$

Продовжуючи аналогічні обчислення, одержимо вирази для інших коефіцієнтів:

$$a_3 = \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!\,h^3}, \ldots a_k = \frac{\Delta^k y_{n-k}}{k!\,h^k}, \ldots a_n = \frac{\Delta^n y_0}{n!\,h^n}.$$

Після підстановки в (5.23) знайдених значень коефіцієнтів формула буде мати вид

$$P_n(x)= y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x-x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2h^2}(x-x_n)(x-x_{n-1}) + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!\,h^3}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2}) + \ldots + \frac{\Delta^n y_0}{n!\,h^n}(x-x_n)(x-x_{n-1})(x-x_{n-2}) \ldots (x-x_1). \quad (5.24)$$

Це і є *друга інтерполяційна формула Ньютона*. Запишемо її у виді, більш зручному для практичного використання. Позначимо $\frac{x-x_n}{h}=q$, одержимо:

$$\frac{x-x_{n-1}}{h}=\frac{x-(x_n-h)}{h}=q+1;$$

$$\frac{x-x_{n-2}}{h}=q+2; \quad \dots$$

$$\frac{x-x_1}{h}=\frac{x-[x_n-(n-1)h]}{h}=q+n-1.$$

Після підстановки цих значень у (5.24):

$$P_n(x)=y_n+q\Delta y_{n-1}+\frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2}+\frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3}+$$

$$+\ldots+\frac{q(q+1)(q+2)\ldots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0. \tag{5.25}$$

Приклад 5.2. В'язкість води η залежить від температури T таким чином (табл. 5.5):

Таблиця 5.5 – Залежність грузькості води η від температури T

T, K	283,15	286,15	289,15	292,15	295,15
η, мПа · с	1,308	1,203	1,111	1,030	0,958

Визначити, яка в'язкість води при:

а) T = 293,15 K; б) T = 285,15 K; в) T = 282,15 K.

Рішення. Побудуємо горизонтальну таблицю кінцевих різниць (табл. 5.6), позначимо: T = x, η = y.

Таблиця 5.6 – Кінцеві різниці

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
283,15	1,308	–0,105	0,013	–0,002
286,15	1,203	–0,092	0,011	–0,002
289,15	1,111	–0,081	0,009	
292,15	1,030	–0,072		
295,15	0,958			

Як випливає з таблиці, кінцеві різниці третього порядку постійні, тому обмежимося ними й у формулі (5.25) положимо $n = 3$.

а) Тому що $x=293,15$ ближче до кінця таблиці, скористаємося другою інтерполяційною формулою Ньютона (5.25), прийнявши $x_n = 295,15$; $y_n = 0,958$.

Знайдемо $h = 3$,

$$q = \frac{x - x_n}{h} = \frac{293{,}15 - 295{,}15}{3} = -\frac{2}{3}.$$

Підставивши з табл. 5.6 у формулу (5.25) двічі підкреслені різниці і значення $q = -2/3$, отримаємо

$$P_3(293{,}15)=0{,}958+\left(-\frac{2}{3}\right)\cdot(-0{,}072)+\left(-\frac{2}{3}\right)\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}\cdot 0{,}009+\left(-\frac{2}{3}\right)\cdot\frac{1}{3}\cdot\frac{4}{3}\cdot\frac{1}{6}\cdot(-0{,}002)=$$

$$=1{,}005.$$

Отже, в'язкість води η при температурі $T=293{,}15$ *К* дорівнює *1,005 мПа·с*.

б) Оскільки $x=285{,}15$ ближче до початку таблиці, скористаємося першою формулою Ньютона (5.22), прийнявши $x_0 = 283{,}15$; $y_0 = 1{,}308$; $h = 3$. Знайдемо

$$q = \frac{x - x_0}{h} = (285{,}15 - 283{,}15) / 3 = 2/3.$$

Підставивши з табл. 5.6 у формулу (5.22) підкреслені різниці і значення $q=2/3$, отримаємо

$$P_3(285{,}15)=1{,}308+$$

$$\frac{2}{3}\cdot(-0{,}105)+\frac{2}{3}\cdot\left(-\frac{1}{3}\right)\cdot\frac{1}{2}\cdot 0{,}013+\left(\frac{2}{3}\right)\cdot\left(-\frac{1}{3}\right)\cdot\left(-\frac{4}{3}\right)\cdot\frac{1}{6}\cdot(-0{,}002)=1{,}237.$$

Таким чином, в'язкість води η при температурі $T=283{,}15$ *К* дорівнює *1,237 мПа·с*.

в) Значення $x=282{,}15$ перебуває за межами табл. 5.5, ближче до $x_0 = 283{,}15$. Тому будемо використовувати першу формулу Ньютона (5.22) для екстраполювання. У цьому випадку

$$q = \frac{x - x_0}{h} = (282{,}15 - 283{,}15) / 3 = -1/3.$$

Підставивши це значення q і підкреслені різниці з табл. 5.5 у формулу (5.22), отримаємо

$$P_3(282{,}15)=1{,}308+$$

$$\left(-\frac{1}{3}\right)\cdot(-0{,}105)+\left(-\frac{1}{3}\right)\cdot\left(-\frac{4}{3}\right)\cdot\frac{1}{2}\cdot 0{,}013+\left(-\frac{1}{3}\right)\cdot\left(-\frac{4}{3}\right)\cdot\left(-\frac{7}{3}\right)\cdot\frac{1}{6}\cdot(-0{,}002)=1{,}346.$$

Отже, в'язкість води при температурі $T=282{,}15$ *К* дорівнює *1,346 мПа · с*.

5.5.4 Зворотна інтерполяція для випадку рівновіддалених вузлів інтерполяції

Розглянемо тепер задачу зворотної інтерполяції для випадку рівновіддалених вузлів інтерполяції. Припустимо, що функція $f(x)$ монотонна і дане значення y знаходиться між $y_0=f(x_0)$ і $y_1 = f(x_1)$.

Замінюючи функцію $y=f(x)$ першим інтерполяційним багаточленом

Ньютона, одержимо:

$$y = y_0 + q\,\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \ldots + \frac{q(q-1)(q-2)\ldots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0 .$$

Звідси

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

тобто $q=\varphi(q)$.

Розмір q визначаємо методом послідовних наближень як границя послідовності:

$$q = \lim_{i\to\infty} q_i ,$$

де $q_i = \varphi(q_{i-1})$ (i=1, 2,…).

За початкове наближення приймаємо

$$q_0 = \frac{y-y_0}{\Delta y_0} \qquad (5.26)$$

Для i-го наближення маємо:

$$q_i = q_0 - \Delta^2 y_0 \frac{q_{i-1}(q_{i-1}-1)}{2!\,\Delta y_0} - \ldots - \Delta^n y_0 \frac{q_{i-1}(q_{i-1}-1)(q_{i-1}-2)\ldots(q_{i-1}-n+1)}{n!\,\Delta y_0}. \qquad (5.27)$$

На практиці ітераційний процес продовжують доти, поки не установляться значення, що відповідають необхідній точності, причому $q \approx q_m$, де m – останнє зі знайдених наближень. Знайдемо q, визначаємо x по формулі

$$\frac{x-x_0}{h} = q,$$

відкіля

$$x = x_0 + q\,h. \qquad (5.28)$$

Ми застосували метод ітерації для рішення задачі зворотної інтерполяції, користуючись першою інтерполяційною формулою Ньютона. Аналогічно можна застосувати цей спосіб і до другої формули Ньютона:

$$y = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3} + \ldots + \frac{q(q+1)(q+2)\ldots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0 .$$

Звідси

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

Позначимо $q_0 = \dfrac{y - y_n}{\Delta y_{n-1}}$ – початкове наближення.

Для і-го наближення маємо:

$$q_i = q_0 – \Delta^2 y_{n-2} \frac{q_i(q_i+1)}{2!\,\Delta y_{n-1}} - ... – \Delta^n y_0 \frac{q_i(q_i+1)(q_i+2)...(q_i+n-1)}{n!\,\Delta y_{n-1}} ... \qquad (5.29)$$

Знайдемо

$$q = \lim_{i\to\infty} q_i ,$$

визначимо x по формулі

$$x = x_n + q\,h . \qquad (5.30)$$

Приклад 5.3. Користуючись табл. 5.5 прикладу 5.2 визначити, при якій температурі в'язкість води дорівнює 1,262 мПа · с.

Рішення. Задане значення $y = \eta = 1{,}262$ знаходиться між $y_0 = \eta_0 = 1{,}308$ і $y_1 = \eta_1 = 1{,}203$. Тому за початкове значення у приймаємо $y_0 = 1{,}308$. По формулі (5.26)

$$q_0 = \frac{y - y_0}{\Delta y_0} = (1{,}262 – 1{,}308)/(–0{,}105) = 0{,}438.$$

Далі, користуючись формулою (5.27), знаходимо послідовні наближення q_i $(i = 1,2,...)$:

$$q_1 = q_0 – \Delta^2 y_0 \frac{q_0(q_0-1)}{2!\,\Delta y_0} – \Delta^3 y_0 \frac{q_0(q_0-1)(q_0-2)}{3!\,\Delta y_0} = 0{,}438 – \frac{0{,}013}{2\cdot(-0{,}105)} \cdot 0{,}422\cdot(0{,}422–1)$$

$$– \frac{(-0{,}002)}{6\cdot(-0{,}105)} \cdot 0{,}438\cdot(0{,}438–1)\cdot(0{,}438–2) = 0{,}438 – 0{,}015 – 0{,}001 = 0{,}422;$$

$$q_2 = q_0 – \Delta^2 y_0 \frac{q_1(q_1-1)}{2!\,\Delta y_0} – \Delta^3 y_0 \frac{q_0(q_1-1)(q_1-2)}{3!\,\Delta y_0} = 0{,}438 – \frac{0{,}013}{2\cdot(-0{,}105)} \cdot$$

$$0{,}422\cdot(0{,}422–1) – \frac{(-0{,}002)}{6\cdot(-0{,}105)} \cdot 0{,}422\cdot(0{,}422 – 1)\cdot(0{,}422–2) = 0{,}438–0{,}015–0{,}001 =$$

$$0{,}422;$$

$$q = q_2 = 0{,}422.$$

Тепер по формулі (5.28) одержимо

$$x = x_0 + q\,h = 283{,}15 + 0{,}422 \cdot 3 \approx 284{,}42.$$

Отже, $\eta = 1{,}262$ *мПа · с* при $T = 284{,}42$ *К*.

У курсовій роботі необхідно проаналізувати результати, отримані різними методами.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Брановицька С. В., Медведєв Р. Б., Фіалков Ю. Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Підручник. – К: ІВЦ “Видавництво «Політехніка»”, 2004. – 220 с.
2. Математична обробка даних хімічного експерименту. Навчальний посібник/ Укладачі: В.О Мінаєва, В.М. Бочарнікова, Т.А. Григоренко. – Черкаси, Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2003. – 208 с.
3. Вычислительная техника в инженерных и экономических расчетах / А.В.Крушевский, А.В.Беликов, В.Д.Тищенко – Киев: Вища школа. Головне изд-во, 1985. – 290 с.
4. Романенко В.Н., Орлов А.Г., Никитина Г.В. Книга для начинающего исследователя-химика. – Л.: Химия, 1987. – 280 с.
5. Математическая обработка результатов эксперимента / Л.З.Румшинский – М.: Наука, 1971. – 192 с.
6. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики – М.: Наука, 1966. – 664 с.
7. Хемминг Р.В. Численные методы. – М.: Наука, 1972. – 400 с.
8. Поршнев С.В. Вычислительная математика. Курс лекций. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 320 с