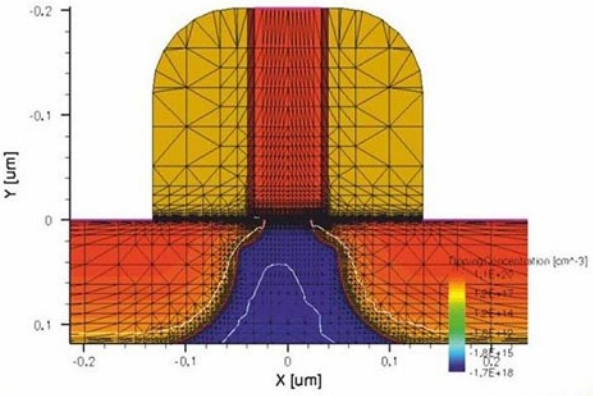
НГТУ НЭТИ
Факультет радиотехники и электроники

С.В. КАЛИНИН
Н.В. МАЛЬЦЕВ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ И СИСТЕМ



НОВОСИБИРСК
2022

УДК 519.6(075.8)
К 172

Рецензенты:

д-р техн. наук, доцент *Е. А. Краснопевцев*
канд. техн. наук, доцент *С. А. Стрельцов*

Калинин С. В.

К 172 Математическое моделирование устройств и систем: учебное пособие / С. В. Калинин, Н. В. Мальцев. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2022. – 152 с.

ISBN 978-5-7782-4620-1

В настоящее время математическое моделирование устройств и систем основывается на использовании таких средств вычислительной математики, как численный анализ и численное решение краевых задач для уравнений математической физики. В настоящем пособии рассматриваются вопросы интерполяции и сглаживания экспериментальных данных, численного вычисления интегралов, а также введения в численные методы решения краевых задач методом сеток и методом конечных элементов.

Материал пособия предназначен для обучения магистров по направлению 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника». Он может быть также полезен для будущих бакалавров и магистров других специальностей факультета РЭФ НГТУ, желающих углубить свои знания в области математического моделирования с использованием современных численных методов вычислительной математики.

Пособие подготовлено на кафедре полупроводниковых приборов и микроэлектроники НГТУ.

УДК 519.6(075.8)

Калинин Сергей Васильевич
Мальцев Никита Вячеславович

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ И СИСТЕМ

Учебное пособие

Редактор *И.Л. Кескевич*
Выпускающий редактор *И.П. Брованова*
Корректор *И.Е. Семенова*
Дизайн обложки *А.В. Ладыжская*
Компьютерная верстка *Л.А. Веселовская*

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции
Издание соответствует коду 95 3000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 21.02.2022. Формат 60 × 84 1/16. Бумага офсетная. Тираж 50 экз.
Уч.-изд. л. 8,83. Печ. л. 9,5. Изд. № 208/21. Заказ № 98. Цена договорная

Отпечатано в типографии
Новосибирского государственного технического университета
630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

ISBN 978-5-7782-4620-1

© Калинин С. В., Мальцев Н. В., 2022
© Новосибирский государственный технический университет, 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

Список сокращений и условных обозначений 3
Предисловие 5
Глава 1. Интерполяционное моделирование кривой по экспериментальным точкам 9
1.1. Интерполяция сеточных функций 9
1.1.1. Постановка задачи интерполяции 9
1.1.2. Методы интерполяции 12
1.2. Глобальная полиноминальная интерполяция 13
1.2.1. Метод неопределенных коэффициентов 14
1.2.2. Интерполяция с помощью полиномов Лагранжа 15
1.2.3. Интерполяция с помощью полиномов Ньютона 16
1.2.4. О точности полиномиальной интерполяции 21
1.2.5. Феномен Рунге (явление Рунге) 23
1.2.6. Основные выводы о глобальной интерполяции алгебраическими полиномами 26
1.3. Интерполяция сплайнами 27
1.3.1. Основные идеи, термины и определения 27
1.3.2. Кусочно-линейная интерполяция 29
1.3.3. Интерполяция кубическими сплайнами 31
1.3.4. Основной алгоритм интерполяции кубическими сплайнами 34
1.3.5. Аппроксимационные модели. Сглаживающий кубический сплайн 39
Контрольные вопросы к главе 1 45
Библиографический список к главе 1 47

Глава 2. Численное интегрирование 49
2.1. Квадратурные формулы интерполяционного типа 49
2.1.1. Первые понятия о численном интегрировании 49
2.1.2. Простейшие квадратурные формулы прямоугольников и трапеций 51
2.1.3. Интерполяционные формулы Ньютона–Котеса 55
2.1.4. Формула Симпсона 56
2.1.5. Формула Симпсона 3/8 59
2.1.6. Метод неопределенных коэффициентов 60
2.1.7. Формула Рунге для апостериорной оценки погрешности численного интегрирования 61
2.2. Интегрирование на основе метода Монте-Карло 63
2.2.1. Метод «средних значений» 63
2.2.2. Генераторы псевдослучайных чисел 65
2.2.3. Геометрический метод 66
Контрольные вопросы к главе 2 68
Библиографический список к главе 2 69
Глава 3. Разностные методы решения краевых задач (метод сеток) 71
3.1. Краевые задачи для уравнений математической физики 71
3.1.1. Первые понятия о математической задаче переноса тепла 71
3.1.2. Задача Коши для уравнения теплопроводности 74
3.1.3. Смешанная задача и граничные условия для уравнения теплопроводности 74
3.2. Разностный метод решения одномерной смешанной задачи для уравнения теплопроводности (метод сеток) 78
3.2.1. Численное решение стационарной одномерной краевой задачи для уравнения теплопроводности 78
3.2.2. Численное решение одномерной смешанной краевой задачи для уравнения теплопроводности 80
Контрольные вопросы к главе 3 93
Библиографический список к главе 3 95
Глава 4. Метод конечных элементов 97
4.1. Основы метода конечных элементов 97
4.1.1. Первые понятия о методе конечных элементов 97

4.1.2. Особенности дискретизации области моделирования.....100
4.1.3. Интерполирующие функции конечных элементов.....104
4.2. Основные численные методы конечных элементов.....110
4.2.1. Иллюстративная краевая задача.....110
4.2.2. Численное решение краевой задачи на основе вариационного принципа Ритца.....112
4.2.3. Численное решение краевой задачи на основе метода Галеркина.....119
Контрольные вопросы к главе 4.....125
Библиографический список к главе 4.....126
Заключение.....128
Приложения.....131
Приложение 1. Контрольные практические задания к главе 1.....131
Приложение 2. Контрольные практические задания к главе 2.....136
Приложение 3. Контрольные практические задания к главе 3.....140
Приложение 4. Контрольные практические задания к главе 4.....146

ГЛАВА 1

ИНТЕРПОЛЯЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВОЙ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ТОЧКАМ

1.1. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ СЕТОЧНЫХ ФУНКЦИЙ

1.1.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

Если значения функции $f(x)$ известны в дискретных точках числового отрезка $[x_0, x_n]$. т. е. $f(x_i) = y_i$, где $i = 0, 1, \ldots, n$, то задача доопределения этой функции во всех остальных точках отрезка называется интерполированием.

Множество точек отрезка $[x_0, x_n]$, в которых определена функция $f(x)$, называется сеткой, значения x_i – узлами интерполяции, а функция $f(x)$ – сеточной или дискретной или табличной функцией:

x_i	x_0	x_1	...	x_n
y_i	y_0	y_1	...	y_n

Сетка называется равномерной, если $x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$, $i = 0, 1, \ldots, n - 1$, где h – шаг сетки.

Геометрический смысл интерполяции легко понять из рис. 1.1.

Решение задачи интерполирования заключается в выборе какой-либо известной непрерывной функции $I(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$, называемой интерполирующей функцией или интерполянтом (рис. 1.2), для которой в узлах сетки выполняются условия интерполяции:

$$I(x_i) = y_i, \quad 0 \le i \le n. \tag{1.1}$$

Впервые термин «интерполирование» («интерполяция») был употреблен в 1656 году Дж. Валлисом при составлении астрономических

и математических таблиц. Он происходит от латинского слова «interpolo», означающего «переделывать», «подновлять», «ремонтировать» [4].

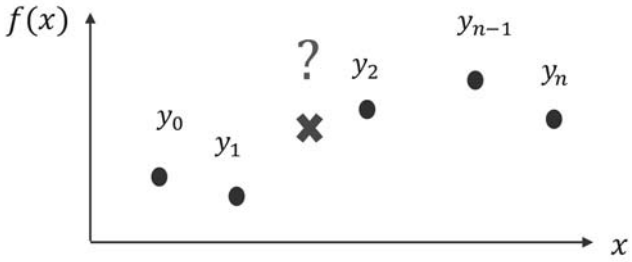


Рис. 1.1. Геометрический смысл задачи интерполяции

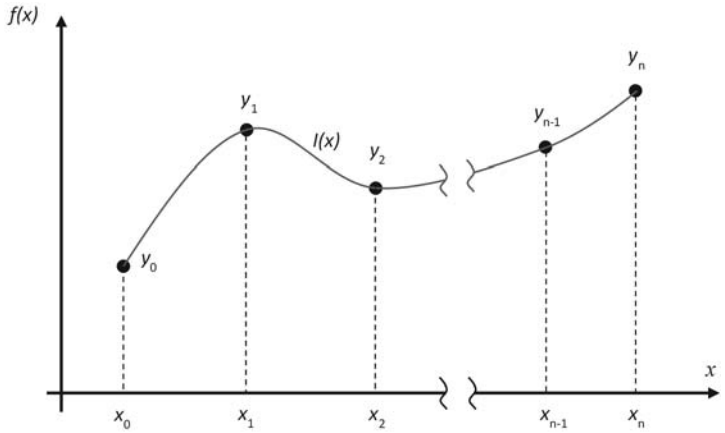


Рис. 1.2. Геометрический смысл интерполирующей функции $I(x)$

Очевидно, что сформулированная выше задача интерполяции с условиями (1.1) является математически некорректной, так как в общем случае она имеет неединственное решение (рис. 1.3).

Задачу интерполяции экспериментальных данных следует отличать от другой задачи численного моделирования экспериментальных данных, которая называется задачей аппроксимации (приближения). Геометрический смысл этой задачи в ее сравнении с интерполяцией можно уяснить из рис. 1.4.

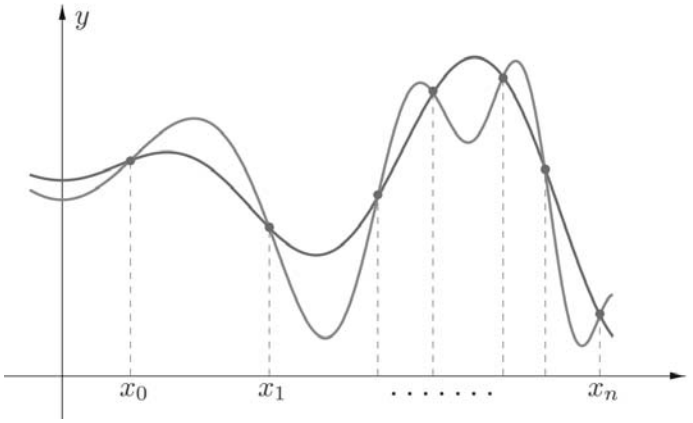
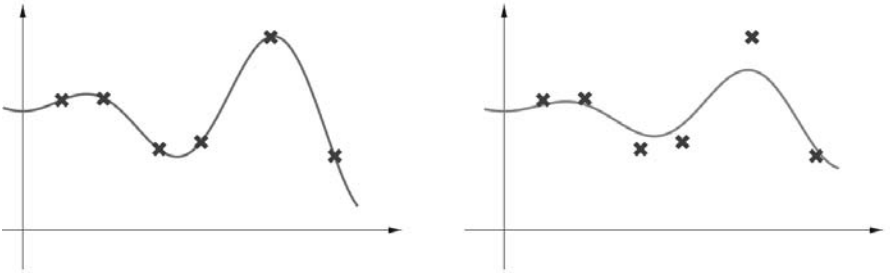


Рис. 1.3. Задача интерполяции может иметь неединственное решение [4]



а *б*

Рис. 1.4. Геометрическое сравнение задач интерполяции (*а*) и аппроксимации (*б*) [4]

В курсе ММЛ подробно рассматривался базовый метод решения задач аппроксимации – метод наименьших квадратов. Его суть заключалась в том, чтобы аппроксимировать экспериментальные данные линейной комбинацией базисных функций, а коэффициенты комбинации находить путем минимизации отклонений суммы квадратов комбинации от экспериментальных данных.

1.1.2. МЕТОДЫ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

В настоящее время в численном анализе существует много методов интерполяции [1–3, 4–11]. Выбор метода, как правило, определяется классом решаемой задачи. Поскольку решение задачи интерполяции неединственное, кроме условий интерполяции (1.1) на интерполирующую функцию могут накладываться дополнительные условия, вытекающие из физической природы исходных данных: положительность значений, выпуклость, монотонность, непрерывность производной в узлах интерполяции и т. д. Например, при обработке экспериментальных данных ВАХ МОП транзистора, описывающих зависимость тока стока, от напряжения сток-исток, при построении интерполирующей функции на нее накладывается условие монотонности, обусловленное физической природой работы полевого транзистора. Аналогичное условие используется при интерполяционном моделировании ВАХ диода или БТ.

В зависимости от того, сколько экспериментальных узлов сетки требуется для вычисления промежуточного интерполяционного значения, различают алгоритмы глобальной и локальной интерполяции. К глобальной интерполяции относят те алгоритмы, в которых при вычислении промежуточного значения используются все узлы сетки. В противном случае интерполяция называется локальной.

Если на каждом интервале интерполяции используются математически различные интерполирующие функции, то такая интерполяция называется кусочной. Простейшим примером этого вида интерполяции служит часто используемая на практике (особенно при вычислении значений специальных функций на основе их таблиц) кусочно-линейная интерполяция (см. рис. 1.9), при которой на каждом ее интервале используется своя линейная функция. Очевидно, что для ее построения на каждом промежутке достаточно использовать только две крайние точки этого промежутка. Поэтому кусочно-линейная интерполяция – это локальная интерполяция.

К одним из самых распространенных практических методов интерполяции относятся: глобальная интерполяция полиномом, кусочно-линейная интерполяция, глобальная интерполяция кубическими сплайнами.

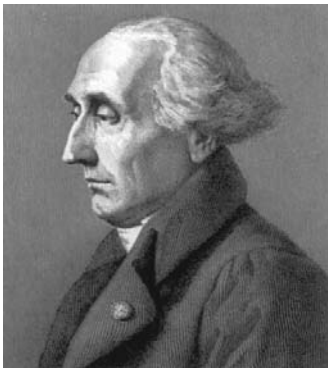
1.2. ГЛОБАЛЬНАЯ ПОЛИНОМИАЛЬНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

При полиномиальной интерполяции в качестве интерполирующей функции $I(x)$ используется алгебраический полином $P_n(x)$ произвольной степени n, заданный на всем промежутке $[x_0, x_n]$:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i. \qquad (1.2)$$

В этом случае математически метод интерполяции состоит в вычислении $n + 1$ значения коэффициентов a_i этого многочлена по известным дискретным экспериментальным значениям. При этом чаще всего используют три широко известных алгоритма: метод неопределенных коэффициентов, многочлен Лагранжа и многочлен Ньютона.

Несмотря на то что конструктивно формы записи интерполирующего полинома в этих алгоритмах различны, но, как следует из теоремы единственности, они по своей сути представляют собой один и тот же полином.



Ж.Л. Лагранж – выдающийся французский математик XVIII в.



И. Ньютон – выдающийся английский физик, математик, механик XVII–XVIII вв.

1.2.1. МЕТОД НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Для нахождения коэффициентов интерполирующего многочлена с учетом условия интерполяции (1.1) можно составить СЛАУ вида

$$\begin{cases} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \ldots + a_0 = y_0, \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \ldots + a_0 = y_1, \\ \qquad\qquad \vdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \ldots + a_0 = y_n, \end{cases} \tag{1.3}$$

или в матричной форме

$$\begin{pmatrix} x_0^n & x_0^{n-1} & \cdots & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1} & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}. \tag{1.4}$$

Очевидно, что такой полином – единственный из всех полиномов степени n, поскольку определитель матрицы системы (1.4), известный как определитель Вандермонда, теоретически не равен нулю. Однако на практике даже для полиномов невысоких порядков его величина численно существенно мала, что является признаком плохой обусловленности матрицы Вандермонда.

Существенная особенность данного алгоритма заключается в том, что для нахождения коэффициентов полинома нужно составлять и решать СЛАУ. При обработке экспериментальных данных с большим числом точек (тысячи и выше), как показано в курсе ММП, возникают значительные вычислительные затруднения. Кроме того, плохая обусловленность может приводить к большим погрешностям при вычислении коэффициентов a_i.

Однако, как заметил Лагранж, найти явный вид полинома можно и без построения и решения СЛАУ, что значительно упрощает вычислительный процесс.

1.2.2. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ С ПОМОЩЬЮ ПОЛИНОМОВ ЛАГРАНЖА

Интерполирующий полином составляется как линейная комбинация специальных фундаментальных (базисных) полиномов $L_i^n(x)$:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i L_i^n(x). \tag{1.5}$$

При этом полиномы $L_i^n(x)$ удовлетворяют следующим условиям:

$$L_i^n(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i. \end{cases} \tag{1.6}$$

Легко проверить, даже не зная явного вида этих полиномов, что они обеспечивают выполнение условий интерполяции (1.1).

Нетрудно понять, что фундаментальные полиномы Лагранжа можно представить следующим образом:

$$L_i^n(x) = \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\ldots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)}. \tag{1.7}$$

Для лучшего запоминания при построении фундаментального полинома Лагранжа с индексом *i* можно использовать следующее правило: составляем дробь

$$\frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)}{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)},$$

затем в числителе и знаменателе убираем скобку $(x - x_i)$, а потом в знаменателе вместо x подставляем x_i. Полученное в итоге выражение и есть фундаментальный полином Лагранжа *n*-го порядка с индексом *i*.

С вычислительной точки зрения многочлены Лагранжа представляют собой очень удобную для практического использования конструкцию. Несмотря на внешнюю сложность записи, алгоритм их построения легко программируется. Так как при вычислении фундаментальных многочленов не используются значения сеточной функции y_i, этот метод особенно эффективен при интерполяции на одной и той же сетке одновременно нескольких функций (модельных кривых).

Однако метод весьма чувствителен к изменению числа узлов сетки. Так, при добавлении хотя бы одного нового экспериментального узла фундаментальные многочлены приходится перевычислять заново. Ньютон предложил другую форму записи интерполирующего полинома, которая лишена указанного недостатка.

1.2.3. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ С ПОМОЩЬЮ ПОЛИНОМОВ НЬЮТОНА

В этом методе интерполирующий полином записывается в виде суммы из $n + 1$ полиномов $N_i(x)$ возрастающих степеней i от нуля до n:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} N_i(x) , \tag{1.8}$$

или в развернутом виде

$$P_n(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)(x - x_1) + \\ + ... + c_n(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1}), \tag{1.9}$$

где c_i – неизвестные коэффициенты, которые вычисляются только по узлам $x_0, x_1, \ldots, x_i$.

Очевидно, что при такой форме записи добавление новой экспериментальной точки с узлом x_{n+1} приведет лишь к добавлению к сумме (1.8) нового полинома $N_{n+1}(x)$ без перевычисления всех предыдущих полиномов:

$$P_{n+1}(x) = P_n(x) + N_{n+1}(x) = P_n(x) + \\ + c_{n+1}(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1})(x - x_n) . \tag{1.10}$$

Выражаемое формулой (1.10) свойство многочленов Ньютона делает его особенно полезным в вычислительной практике во многих случаях.

Общие формулы для неизвестных коэффициентов c_i можно найти из условий интерполяции методом неопределенных коэффициентов. Матрица СЛАУ в этом случае будет нижнетреугольной, что теоретически не приведет к затруднениям при нахождении коэффициентов. Однако этот метод численно трудоемок и сложен.

Ньютон предложил более компактный способ нахождения коэффициентов c_i на основе понятия разделенной разности. Он показал, что c_i в точности равны разделенным разностям i порядка, вычисленным по узлам $x_0, x_1, \ldots, x_i$:

$$c_0 = y_0, \quad c_i = f\left(x_0, x_1, \ldots, x_i\right), \quad 1 \le i \le n, \tag{1.11}$$

и что многочлены $N_i(x)$ в (1.8) есть

$$\begin{aligned} N_0(x) &= f(x_0) = y_0, \\ N_i(x) &= f\left(x_0, x_1, \ldots, x_i\right) \prod_{k=0}^{i-1} \left(x - x_k\right), \quad 1 \le i \le n. \end{aligned} \tag{1.12}$$

Рассмотрим понятие разделенной разности более подробно и установим алгоритм ее вычисления.

Разделенные разности в вычислительной математике являются аналогом понятия производной в математическом анализе. Определять разделенные разности лучше всего индуктивным (рекуррентным) способом.

Разделенной разностью сеточной функции нулевого порядка в узле x_i называется значение такой функции в этом узле:

$$f(x_i) = y_i, \quad 0 \le i \le n. \tag{1.13}$$

Разделенной разностью первого порядка в узле x_i называют отношение

$$f(x_i, x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}, \quad 0 \le i \le n-1. \tag{1.14}$$

Разделенной разностью второго порядка в узле x_i называют отношение

$$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}, \quad 0 \le i \le n-2. \tag{1.15}$$

Если уже известны разделенные разности $(k-1)$-го порядка в узлах $x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{n-(k-1)}$, то разделенная разность k-го порядка в узле x_i есть

$$f(x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) - f(x_i, \ldots, x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i},$$

$$0 \le i \le n-k. \qquad (1.16)$$

Приведем важную теоретическую формулу, устанавливающую точную взаимосвязь между производными n раз дифференцируемой функции $f(x)$ в некоторой неизвестной точке ξ из интерполяционного интервала и разделенными разностями, для упорядоченных узлов сетки $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$. Формулу выпишем без доказательства (вывод см., например, [4]):

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{n!} f^n(\xi), \qquad (1.17)$$

где $\xi \in [x_0, x_n]$.

Для лучшего уяснения алгоритма вычисления разделенных разностей в качестве примера рассмотрим случай с пятью узлами интерполяции:

x_i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
y_i	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4

Составим таблицу разделенных разностей, где номер строки будет соответствовать узлу, а номер столбца – порядку разделенной разности.

Номер узла	Порядок разделенной разности				
	0	1	2	3	4
0	$f(x_0) = y_0$	$f(x_0, x_1)$	$f(x_0, x_1, x_2)$	$f(x_0, x_1, x_2, x_3)$	$f(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4)$
1	$f(x_1) = y_1$	$f(x_1, x_2)$	$f(x_1, x_2, x_3)$	$f(x_1, x_2, x_3, x_4)$	
2	$f(x_2) = y_2$	$f(x_2, x_3)$	$f(x_2, x_3, x_4)$		
3	$f(x_3) = y_3$	$f(x_3, x_4)$			
4	$f(x_4) = y_4$				

Поскольку изначально нам известны только значения функции в узлах, нетрудно заполнить столбец с индексом 0, записав в него все разделенные разности нулевого порядка.