5. Вычислительная математика. Обработка данных

5.1. Аппроксимация функций

Задача для аппроксимации:

```
x = [0.43 0.75 1.64 2.32 4.12 4.85];
y = [2.42 1.54 1.33 2.51 3.12 2.93];
plot(x, y,'o');
```

Первый способ – использование меню *tools* : *basic fitting* в окне графика – интерактивный выбор метода аппроксимации из ограниченного списка. Можно вывести график погрешностей.

Второй способ – утилита Curve Fitting Tool:

```
cftool
```

Третий способ – использование команд:

```
p = polyfit(x,y,2) % аппроксимация полиномом степени 2
X = [x(1): 0.1 : x(end)]; % выравниваем сетку по X
plot(x, y, 'o', X, polyval(p, X), 'r');
%
load lum-exp/diamond; % спектр люминесценции алмаза
plot(sx, sy)
ftype = fittype('gauss4') % либо свою функцию, либо предопределённую
fresult = fit(sx, sy, ftype)
plot(fresult, sx, sy)
```

Задание: попытаться аппроксимировать кривую так, как показано на рис. *calibration.png* (в каталоге MATLAB). Исходные точки взять отсюда:

```
load calibration
x = mass(:,1);
y = mass(:,2);
```

Формула для расчёта индекса корреляции (если потребуется):

$$R = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - M_y)^2}}$$

Здесь y_i – значения экспериментальных точек, Y_i – результат аппроксимации в тех же точках, M_y – среднее по $\vec{Y}$.

5.2. Оптимизационные задачи

Под оптимизацией понимают выбор наилучшего варианта из всех возможных. Данные задачи обычно сводятся к поиску минимумов (локальных и глобального) для функций одной или нескольких переменных.

1. Поиск минимума функции одной переменной на указанном интервале

```
x = 5 : 0.1 : 20;
y = 24 - 2/3*x + x.^2/30;
plot(x,y)
% первый способ
[X, Y] = fminbnd('24-2/3*x+x.^2/30', 5, 20)
% второй способ
MyF = @(x) (24 - 2/3*x + x.^2/30) % это анонимная функция (можно обычную)
plot(x,MyF(x))
[X, Y] = fminbnd(MyF,5,20)
```

Ещё один вариант: найти все минимумы функции $e^{x^2} + \sin 3\pi x$

```
x = -3: 0.01: 3;
MyF = @(x) (exp(x.^2)+sin(3*pi*x))
plot(x, MyF(x))
ylim([0 10])
fminsearch(MyF,-1)
fminsearch(MyF,-0.5)
```

2. Поиск минимума функции нескольких переменных

Создадим функцию:

```
function Z = MySinF (V) % к сожалению, только так
x = V(1);
y = V(2);
Z = sin(pi*x).*sin(pi*y);
```

```
[X Y] = meshgrid(0 : 0.05 : 2);
surf(X, Y, sin(pi*X).*sin(pi*Y)); % посмотрели вид функции
[W F] = fminsearch(@MySinF, [0 2]) % @  - для «настоящих» функций
[W F] = fminsearch(@MySinF, [2 0])
%
Info = optimset('Display','final') % контроль за процессом счёта, вариант - iter
[W F] = fminsearch(@MySinF, [0 2], Info)
```

5.3. Решение нелинейных уравнений и их систем

```
x = 0 : 0.1 : 10;
f = @(x)(0.25*x+sin(x)-1) % пример
plot(x, f(x), [x(1) x(end)], [0 0]); % находим границы интервалов
r1 = fzero(f, [0.5 1]) % либо [r1 rf] = fzero(f, 0.5)
r2 = fzero(f, [2 3])
r3 = fzero(f,[5 6])
%
% парадокс
f2 = @(x) (x^2)
f2(0) % конечно, нуль
fzero(f2,[-1 1]) % сообщения об ошибке (кроме 0)
%
solve('0.25*X+sin(X)-1') % только один корень
solve('sin(2*x)-0.5') % два корня
```

Задание: решить уравнение $\sin(x) - x^2\cos(x)$ для $-5 \leq x \leq 5$.

Поиск корней полинома:

```
p = [-2.1 16.0 7.0 -1.5]
plot(x, polyval(p,x), [x(1) x(end)], [0 0]);
ylim([-10 10])
r = roots(p)
polyval(p,r) % оценка точности вычислений
p = [1 0 0]; roots(p) % обслужили функцию x^2
```

Решение систем нелинейных уравнений:

```
function F = MyEqu (X)
F = [2*X(1)-X(2)-exp(-X(1));
    -X(1)+2*X(2)-exp(-X(2))];
```

```
S1='2*x-y-exp(-x)';
S2='-x+2*y-exp(-y)'
ezplot(S1)
hold on
ezplot(S2)
%
x0 = [-5; -5];
[x,f] = fsolve(@MyEqu,x0)
plot(x(1),x(2),'ko')
%
R = solve(S1,S2)
```

5.4. Решение систем дифференциальных уравнений

Рассмотрим наиболее часто встречающийся вариант – решение задачи Коши. Решение состоит в нахождении функции, удовлетворяющей дифференциальному уравнению:

$$y^{(n)} = f\left(t, y, y', \dots, y^{(n-1)}\right)$$

с начальными условиями $y(t_0) = u_0, y'^{(t_0)} = u_1, \dots, y^{(n-1)}(t_0) = u_{n-1}$. Перед численным решением дифференциального уравнения порядка n его приводят к системе n диффереациальных уравнений первого порядка.

Пример: решить уравнение $\frac{d^2y}{dt^2} + 2\frac{dy}{dt} + 10y = \sin t$ при $y(0) = 1$ и $\frac{dy(0)}{dt} = 0$.

Уравнение второго порядка превращаем в систему уравнений:

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -2y_2 - 10y + \sin t \end{cases}$$

Программируем функцию:

```
function F = MyODE (t, y)
F = [y(2); -2*y(2)-10*y(1)+sin(t)];
```

Решаем задачу:

```
Y0 = [1 0];
```

```
[T Y] = ode113(@MyODE, [0 15], Y0)
plot(T, Y(:,1), T, Y(:,2))
%
```

ode45 – функция решает методом Рунге-Кутты 4-5 порядка;
ode23 – метод Рунге-Кутты 2-3 порядка;
ode113 – метод Адамса-Бэшфорта-Милтона переменного порядка;
ode15s – метод Гира (для особо трудных случаев)
ode23s – одношаговый метод Розенброка второго порядка.

Задание:

Решить задачу Коши

$$\begin{aligned} &x' = \cos(xy)\,, \\ &y' = \sin(x + ty)\,, \\ &x(0) = 0, \quad y(0) = 0. \end{aligned}$$

на интервале $[0;\ 10]$.