

Р. К. Бельхеева, С. П. Шары́й

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ПРИМЕРАХ



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Механико-математический факультет
Кафедра математического моделирования

Р. К. Бельхеева, С. П. Шарый

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ПРИМЕРАХ

Учебное пособие

Новосибирск
2022

УДК 519.6(075)
ББК В192я73-1
Б443

Рецензент
канд. физ.-мат. наук, доцент А. С. Лебедев

Б43 Бельхеева, Р. К.

Вычислительные методы в примерах: учеб. пособие /
Р. К. Бельхеева, С. П. Шарый ; Новосиб. гос. ун-т. — Новоси-
бирск : ИПЦ НГУ, 2022. — 90 с.

ISBN 978-5-4437-1291-8

Учебное пособие предназначено для развития навыков самостоя-
тельного решения задач по вычислительной математике в объёме
первой части университетского курса. Детально разобраны приме-
ры решения задач по всем темам вычислительных методов анализа
и линейной алгебры.

Пособие предназначено для студентов и преподавателей матема-
тических дисциплин и смежных специальностей высших учебных
заведений.

УДК 519.6(075)
ББК В192я73-1

Рекомендовано к печати кафедрой математического моделиро-
вания ММФ НГУ (протокола от 31 мая 2021 г.)

ISBN 978-5-4437-1291-8

© Новосибирский государственный
университет, 2022

Предисловие

Общеизвестно, что при изучении наук решение задач и упражнений является не менее важным, чем усвоение теоретических сведений. Тем не менее, несмотря на наличие большого количества учебников и задачников по вычислительным методам, обучению навыкам решения задач, разбору решений типичных задач посвящено сравнительно мало учебных пособий. Задачники по вычислительным методам, даже самые хорошие, как правило, содержат весьма краткие решения, не обсуждающие все детали построений и умозаключений, проводимых в процессе решения тех или иных задач. Сравнительно недавно появились, правда, «решебники» по вычислительным методам (см., к примеру, [3]), но даже в них разбор решений подчас весьма краток и не содержит всех тонкостей, необходимых при решении нетривиальных задач университетского курса. Наше небольшое сочинение призвано до некоторой степени восполнить этот пробел. Его основу составили задачи потоковых контрольных работ по предмету «Вычислительные методы анализа и линейной алгебры», которые предлагались студентам 2-го курса механико-математического факультета Новосибирского государственного университета.

Глава 1

Интерполирование и приближение функций

В естественных науках и технике часто приходится исследовать объекты и явления, для которых не построена полная модель или теория, их объясняющая. Тем не менее, необходимо как-то представлять математическими формулами наблюдаемые опытные данные, или, иными словами, строить *эмпирические формулы*, описывающие рассматриваемое явление. Как правило, в подобных ситуациях результаты измерений (опытов) представлены в виде таблицы для набора значений некоторой независимой переменной x . Как в этих условиях построить выражение для интересующей нас функциональной зависимости, которое работает при всех возможных значениях x ? С другой стороны, что делать, если нас интересует значение зависимой переменной, которое соответствует x , не входящему в таблицу, но находящемуся недалеко от имеющихся в ней? Для ответа на эти вопросы нам необходимо использовать *интерполяцию* (интерполирование). Латинское слово *interpolare*, от которого происходит этот термин, означает «подновлять», «исправлять». Задачу интерполирования можно рассматривать как частный случай общей задачи приближения функций.

Постановка задачи приближения функций (которую называют также задачей аппроксимации функций) такова. Пусть дана функция $f(x)$, принадлежащая некоторому пространству функций $\mathcal{F}$, и пусть также задано пространство функций $\mathcal{G}$. Будем считать, что имеет место включение $\mathcal{G} \subset \mathcal{F}$, и в пространстве $\mathcal{F}$ задано некоторое расстояние (метрика) dist . Для заданного $\epsilon > 0$ нужно найти функцию $g(x)$ из $\mathcal{G}$, которая

отличается от $f(x)$ не более чем на ϵ в метрике dist , т. е.

$$\text{dist}(f, g) \leq \epsilon.$$

Усиленный вариант этой задачи — *задача о наилучшем приближении*. Она требует нахождения функций $g(x)$ из $\mathcal{G}$, которая приближает данную функцию $f(x)$ наилучшим возможным образом, т. е. чтобы выполнялось условие

$$\text{dist}(f, g) = \inf_{h \in \mathcal{G}} \text{dist}(f, h).$$

Функция $g(x)$ называется *наилучшим приближением* для $f(x)$ в рассматриваемой задаче аппроксимации, а число $\text{dist}(f, g)$ — это отклонение наилучшего приближения g от приближаемой функции f .

Напомним, что *расстоянием (метрикой)* на множестве Y , образованном элементами произвольной природы, называется определённая на декартовом произведении $Y \times Y$ функция dist с неотрицательными вещественными значениями, удовлетворяющая для любых $f, g, h \in Y$ следующим условиям [10]:

- (1) $\text{dist}(f, g) = 0$ тогда и только тогда, когда $f = g$,
- (2) $\text{dist}(f, g) = \text{dist}(g, f)$ — симметричность,
- (3) $\text{dist}(f, h) \leq \text{dist}(f, g) + \text{dist}(g, h)$ — неравенство треугольника.

В данном пособии для измерения отклонения друг от друга вещественных функций $f, g : \mathbb{R} \supseteq [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ будут использованы различные расстояния. Это равномерное (чебышёвское) расстояние, которое определяется как

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - g(x)|. \quad (1.1)$$

Далее, это интегральное расстояние, определяемое как

$$\int_a^b |f(x) - g(x)| \, dx, \quad (1.2)$$

Наконец, мы рассмотрим также задачу среднеквадратичного приближения функций, в которой расстояние между функциями f и g на интервале $[a, b]$ полагается равным

$$\sqrt{\int_a^b (f(x) - g(x))^2 \, dx}. \quad (1.3)$$

При решении задачи аппроксимации нужно установить существование и единственность наилучшего приближения и возможность нахождения $g(x)$.

Интерполяцию применяют, когда аппроксимируемой функции $f(x)$ сопоставляют функцию $g(x)$ из некоторого класса, выбранную так, чтобы значения $g(x)$ совпадали со значениями $f(x)$ для данного множества значений аргумента (узлов интерполяции). Для вещественных функций одного аргумента её постановка такова.

Пусть на интервале $[a, b] \subset \mathbb{R}$ заданы несовпадающие узлы $x_0, x_1, \dots, x_n$ и вещественные числа $y_0, y_1, \dots, y_n$. Требуется построить функцию $g(x)$ от непрерывного аргумента $x \in [a, b]$, которая принадлежит заданному классу функций $\mathcal{G}$ и в узлах x_i принимает значения y_i , $i = 0, 1, \dots, n$. Искомую функцию $g(x)$ называют при этом *интерполирующей функцией* или *интерполянтom*.

Часто значения $y_0, y_1, \dots, y_n$ принимаются в заданных узлах $x_0, x_1, \dots, x_n$ некоторой реальной функцией непрерывного аргумента $f(x)$. Как и ранее, требуется построить функцию $g(x)$ от аргумента $x \in [a, b]$, которая принадлежит заданному классу функций $\mathcal{G}$ и в узлах x_i принимает значения $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$. В этом случае будем говорить, что рассматривается *задача интерполяции функции $f(x)$ по узлам $x_0, x_1, \dots, x_n$* .

1.1 Алгебраическое интерполирование

Определение Интерполирование функций с помощью алгебраических полиномов называют *алгебраической интерполяцией*. Алгебраический полином

$$P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m, \quad (1.4)$$

решающий задачу алгебраической интерполяции, называется *интерполяционным полиномом* или *алгебраическим интерполянтom*.

В самом общем случае, если мы не накладываем никаких ограничений на степень полинома m и количество узлов интерполяции $n + 1$, система (1.4) может не иметь решения, а если оно существует, то может быть неединственным. Имеется, тем не менее, важный частный случай задачи алгебраической интерполяции, для которого гарантируется однозначная разрешимость.

Теорема 1.1.1 [4, 13, 22] *Если степень интерполяционного полинома на единицу меньше количества узлов (т. е. $m = n$), то решение задачи алгебраической интерполяции существует и единственно.*

Рассмотрим несколько способов построения интерполяционного полинома.

Первый способ — решение системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов $a_0, a_1, \dots, a_n$ искомого полинома.

Подставим в выражение (1.4) значения аргумента $x_0, x_1, \dots, x_n$ и, учитывая, что получающиеся при этом значения полинома должны быть равны $y_0, y_1, \dots, y_n$ соответственно, приходим к соотношениям

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n = y_0, \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n = y_1, \\ \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n = y_n. \end{cases}$$

Решив систему, найдём коэффициенты, тем самым построим сам полином.

Пример 1.1.1 ([16], с. 104) Построить многочлен наименьшей степени, принимающий в данных точках следующие значения :

x	0	1	2	5
$f(x)$	2	3	12	147

Решение. Количество узлов интерполяции равно четырём, следовательно, в силу сформулированной теоремы можем построить полином третьей степени, совпадающий с таблично заданной функцией в узлах интерполяции. Пусть $P_3(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ — искомый полином. Для определения коэффициентов a_0, a_1, a_2, a_3 получаем систему уравнений

$$\begin{cases} a_0 + a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 0 + a_3 \cdot 0 = 2, \\ a_0 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1 + a_3 \cdot 1 = 3, \\ a_0 + a_1 \cdot 2 + a_2 \cdot 4 + a_3 \cdot 8 = 12, \\ a_0 + a_1 \cdot 5 + a_2 \cdot 25 + a_3 \cdot 125 = 147. \end{cases}$$

Решив её, найдём $a_0 = 2, a_1 = -1, a_2 = 1, a_3 = 1$. Следовательно,

$$P_3(x) = 2 - x + x^2 + x^3.$$

■

Второй способ построения интерполяционного полинома — использование формы Лагранжа.

1.2 Интерполяционный полином Лагранжа

Построим полином n -й степени $P_n(x)$ в виде линейной комбинации полиномов одинаковой n -й степени, удовлетворяющих интерполяционным условиям в отдельных узлах интерполяции. Более точно, будем искать интерполяционный полином в виде

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \phi_i(x), \quad (1.5)$$

где $\phi_i(x)$ — полином степени n , такой что

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{при } i \neq j, \\ 1, & \text{при } i = j, \end{cases} \quad (1.6)$$

$i, j = 0, 1, \dots, n$, и посредством δ_{ij} обозначен символ Кронекера. В этом случае для полинома $P_n(x)$ вида (1.5) в каждом узле x_j в силу (1.6) справедливо соотношение $P_n(x_j) = y_j$, т. е. выполняются условия интерполяции. Иными словами, полином $P_n(x)$, задаваемый представлением (1.5), действительно удовлетворяет условиям задачи.

Таким образом, для решения задачи осталось найти полиномы $\phi_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n$, которые называются *базисными интерполяционными полиномами Лагранжа*. Нетрудно показать (см. подробности, к примеру, в учебниках [4, 13, 22]), что они имеют вид

$$\phi_i(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}. \quad (1.7)$$

Их называют также *полиномами влияния i -го узла* (последний термин объясняется условием (1.6)).

В целом, из (1.5) и (1.7) следует, что задачу алгебраической интерполяции решает полином

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}. \quad (1.8)$$

Его называют *интерполяционным полиномом в форме Лагранжа* или просто *интерполяционным полиномом Лагранжа*.

Пример 1.2.1 Для табличных значений, приведённых в примере 1.1.1, построить интерполяционный полином Лагранжа. Напомним эти числовые данные :

x	0	1	2	5
$f(x)$	2	3	12	147

Решение. В задаче заданы значения функции в четырёх узлах. Интерполяционный полином Лагранжа в этом случае составляется с помощью четырёх базисных полиномов третьей степени и имеет вид

$$P_3(x) = y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \\ + y_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + y_3 \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}.$$

Подставив в выражение в правой части значения x_i и y_i , $i = 0, 1, 2, 3$, будем иметь

$$P_3(x) = 2 \cdot \frac{(x-1)(x-2)(x-5)}{(-1) \cdot (-2) \cdot (-5)} + 3 \cdot \frac{x(x-2)(x-5)}{1 \cdot (-1) \cdot (-4)} \\ + 12 \cdot \frac{x(x-1)(x-5)}{2 \cdot 1 \cdot (-3)} + 147 \cdot \frac{x(x-1)(x-2)}{5 \cdot 4 \cdot 3}$$

Наконец, после преобразований, получим $P_3(x) = 2 - x + x^2 + x^3$. ■

Сравнив результаты Примеров 1.1.1 и 1.2.1, убеждаемся, что получили одинаковые полиномы третьей степени. Так и должно быть, поскольку мы строили полиномы, проходящие через одни и те же точки плоскости.

Пример 1.2.2 ([16], с. 104) Функция $f(x)$ задана следующей таблицей:

x	14	17	31	35
$f(x)$	68.7	64	44	39.1

Найти $f(27)$.

Решение. Интересующего нас значения аргумента в таблице нет. Для ответа на вопрос задачи можно построить для функции интерполант, и

его значение на аргументе 27 принять за приближённое значение функции. К сожалению, класс функций, к которому принадлежит исследуемая зависимость, тоже не указан. Предположив, что функция имеет достаточную гладкость, можно заменить её интерполяционным алгебраическим полиномом. Иными словами, будем считать, что в промежутках между узлами значения функции с приемлемой погрешностью можно заменить значениями интерполяционного полинома, совпадающего с функцией в узлах.

Так как значения функции заданы в четырёх узлах, то можем построить единственный интерполяционный полином Лагранжа третьей степени. Согласно (1.8) он задаётся выражением

$$P_3(x) = 68.7 \cdot \frac{(x-17)(x-31)(x-35)}{(-3) \cdot (-17) \cdot (-21)} + 64 \cdot \frac{(x-14)(x-31)(x-35)}{3 \cdot (-14) \cdot (-18)} \\ + 44 \cdot \frac{(x-14)(x-17)(x-35)}{17 \cdot 14 \cdot (-4)} + 39.1 \cdot \frac{(x-14)(x-17)(x-31)}{21 \cdot 18 \cdot 4}.$$

Подставив в него значение x , равное 27, получим $f(27) \approx P_3(27) = 49.317$. ■

Введём вспомогательную функцию

$$\omega_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n) \quad (1.9)$$

— полином $(n+1)$ -й степени, зануляющийся во всех узлах интерполяции. Она играет важную роль при анализе погрешности алгебраической интерполяции, а также в других вопросах приближённых вычислений.

Напомним, что *равномерной нормой* (или чебышёвской нормой, или ∞ -нормой) функции ω_n называется величина, определяемая как

$$\|\omega_n\|_\infty = \max_{x \in [a, b]} |\omega_n(x)|.$$

Пример 1.2.3 ([3], с. 57) Пусть на интервале $[a, b]$ заданы равноотстоящие узлы $x_i = a + \frac{b-a}{n}i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Вычислить $\|\omega_n\|_\infty$, $n = 1, 2, 3$.

Решение. Случай $n = 1$. Найдём экстремум функции

$$\omega_1(x) = (x - a)(x - b).$$

Из условия равенства нулю производной

$$\omega_1'(x) = x - b + x - a = 0$$

получим точку экстремума: $x = \frac{b+a}{2}$. Поскольку нас интересует максимум абсолютной величины, тип экстремума можно дополнительно не определять. В целом,

$$\|\omega_1\|_\infty = \max_{x \in [a, b]} |\omega_1(x)| = \frac{(b-a)^2}{4}.$$

Случай $n = 2$. Для удобства вычислений выполним в представлении

$$\omega_2(x) = (x-a) \left(x - \frac{a+b}{2} \right) (x-b)$$

стандартную замену переменной

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}y, \quad y \in [-1, 1],$$

не влияющую на значения экстремумов. В результате получим

$$\omega_2(y) = y \left(y^2 - \left(\frac{b-a}{2} \right)^2 \right).$$

Точки экстремума полинома равны, соответственно, $y_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{b-a}{2} \right)$.

Следовательно, $\|\omega_2(x)\|_\infty = \frac{(b-a)^3}{12\sqrt{3}}$.

Случай $n = 3$. Выполнив стандартную замену переменной, найдём экстремум:

$$\|\omega_3(x)\|_\infty = \frac{(b-a)^4}{81}.$$

■

Замечание. Для полинома $\omega_n(x)$ с равноотстоящими корнями на интервале $[a, b]$ можно получить оценку (см. [3])

$$\|\omega_n(x)\|_\infty \leq \frac{(b-a)^{n+1} n!}{4n^{n+1}} \quad \text{при } n \geq 3.$$

1.3 Погрешность алгебраической интерполяции с простыми узлами

В Примерах 1.1.1, 1.2.1, 1.2.2 мы строили интерполяционные полиномы для представления функции $f(x)$, заданной в конечном множестве точек, на всём интервале $[a, b]$ её области определения. Значения функции в точках между узлами сетки можно приближённо принять равным значениям алгебраического интерполанта, т. е. $f(x) \approx P_n(x)$. Естественно возникает вопрос: насколько различаются значения интерполируемой функции $f(x)$ и интерполанта $P_n(x)$ на интервале $[a, b]$ в точках, не совпадающих с узлами сетки?

Теорема 1.3.1 [4, 13, 22] Пусть $f \in C^{n+1}[a, b]$, т. е. функция $f(x)$ непрерывно дифференцируема $n + 1$ раз на интервале $[a, b]$. При её интерполировании по несовпадающим узлам $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ с помощью полинома n -й степени остаточный член $R_n(f, x) = f(x) - P_n(x)$ может быть представлен в виде

$$R_n(f, x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \cdot \omega_n(x), \quad (1.10)$$

где $\xi(x)$ — некоторая точка, принадлежащая открытому интервалу $]a, b[$ и зависящая от x , а $\omega_n = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$.

В некоторых случаях можно найти $\xi(x)$.

Пример 1.3.1 ([14], с. 9) Оценить погрешность, возникающую при приближении функции $f(x) = \sin x$ интерполяционным полиномом второй степени $P_2(x)$, совпадающим с данной функцией при значениях $x = 0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}$.

Решение. Построенный по формуле (1.8) полином Лагранжа имеет вид:

$$P_2(x) = \frac{8}{\pi^2} \cdot x \left((1 - \sqrt{2})x + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{1}{4} \right) \pi \right).$$

Функция $f(x) = \sin x$ приближается на интервале $[0, \pi/2]$ по трём равноотстоящим узлам, степень полинома равна двум, $f^{(3)}(x) = -\cos x$, следовательно, на основании формулы (1.10) имеем

$$R_2(f, x) = \sin x - P_2(x) = \frac{-\cos \xi(x)}{3!} \cdot \omega_2(x),$$

где

$$\omega_2(x) = x \left(x - \frac{\pi}{4} \right) \left(x - \frac{\pi}{2} \right).$$

Так как точка $\xi(x) \in]0, \frac{\pi}{2}[$ неизвестна, можно делать лишь оценки остаточного члена. Максимум модуля третьей производной

$$M_3 = \max_{x \in [0, \frac{\pi}{2}]} | - \cos(x) | = 1,$$

а максимальное значение модуля функции $\omega_2(x)$ достигается в двух точках интервала $x_{1,2} = \frac{\pi}{12}(3 \pm \sqrt{3})$ и принимает значения

$$\|\omega_2(x)\|_\infty = \left(\frac{\pi}{12} \right)^3 6\sqrt{3} \approx 0.1862.$$

Отсюда получается максимальная погрешность на интервале, т. е. оценка остаточного члена в чебышёвской норме.

Найдём значение погрешности интерполяции в точке $\tilde{x} = \frac{\pi}{6}$. Значение интерполируемой функции отличается от значения интерполанта на величину

$$\begin{aligned} R_2(f, x) &= \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) - P_2\left(\frac{\pi}{6}\right) \\ &= \frac{1}{2} - \frac{2}{9} \left(2\sqrt{2} - \frac{1}{2} \right) \approx 0.5 - 0.51743 \approx -0.017, \end{aligned}$$

меньшую, чем это допускается оценкой по формуле (1.10):

$$\frac{| - \cos \xi(x) |}{3!} \cdot \omega_3\left(\frac{\pi}{6}\right) \leq \frac{M_3}{3!} \cdot \left| \omega_3\left(\frac{\pi}{6}\right) \right| = \frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{6} \right)^3 \approx 0.02392.$$

Получили естественный результат: фактическая погрешность в точке меньше оценки погрешности в точке, которая меньше максимальной погрешности на интервале. ■

Пример 1.3.2 ([7], с. 537) С какой точностью можно вычислить значение $\sqrt{115}$ с помощью интерполяционной формулы Лагранжа для функции $y = \sqrt{x}$, выбрав узлы интерполирования $x_0 = 100$, $x_1 = 121$, $x_2 = 144$, т. е. точно вычисляемые значения полных квадратов?

Решение. Имеем:

$$y' = \frac{1}{2\sqrt{x}}, \quad y'' = -\frac{1}{4\sqrt{x^3}}, \quad y''' = \frac{3}{8\sqrt{x^5}}.$$

Отсюда

$$M_3 = \max_{x \in [100, 144]} |y'''| = \frac{3}{8} \cdot \frac{1}{\sqrt{100^5}} = \frac{3}{8} \cdot 10^{-5}.$$

На основании формулы (1.10) получаем

$$\begin{aligned} |R_2| &\leq \frac{3}{8} \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1}{3!} |(115 - 100)(115 - 121)(115 - 144)| \\ &= \frac{1}{16} \cdot 10^{-5} \cdot 15 \cdot 6 \cdot 29 \approx 1.6 \cdot 10^{-3}. \end{aligned}$$

■

Пример 1.3.3 Необходимо составить практичную таблицу значений функции

$$\mathcal{F}(x) := \int_0^x \sin(t^2) dt$$

на интервале $[0, 4]$ с постоянным шагом h . Далее предполагается использовать эту таблицу при нахождении значений $\mathcal{F}(x)$, $x \in [0, 4]$, для аргументов, не обязательно присутствующих в таблице. Каким следует взять шаг h , чтобы при квадратичной интерполяции табличных значений (по трём соседним) погрешность не превышала 0.001?

Для справки. Выписанный интеграл является известной неэлементарной функцией, широко используемой в оптике под именем *функции Френеля*.

Решение. Это задача на применение оценки погрешности алгебраической интерполяции.

Погрешность квадратичной интерполяции (по трём точкам x_0 , x_1 и x_2) оценивается, как известно, через третью производную. В данном случае

$$\mathcal{F}'(x) = \sin(x^2) \quad \text{по формуле Ньютона-Лейбница,}$$

$$\mathcal{F}''(x) = 2x \cos(x^2),$$

$$\mathcal{F}'''(x) = 2 \cos(x^2) - 4x^2 \sin(x^2).$$

Оценки максимума модуля для $\mathcal{F}'''(x)$ можно взять самые простейшие и грубые, ограничив, к примеру, $\sin(x^2)$ и $\cos(x^2)$ по модулю единицами, так что

$$\max_{\xi \in [0, 4]} |\mathcal{F}'''(\xi)| \leq 2 \cdot 1 + 4 \cdot 4^2 \cdot 1 = 66.$$

Из Примера 1.2.3 мы знаем оценку для полинома

$$\omega_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

она равна

$$\|\omega_2(x)\| = \frac{(b-a)^3}{12\sqrt{3}}.$$

На основании формулы (1.10) получаем

$$|R_2| \leq \frac{M_3}{3!} \cdot (x_{i+1} - x_{i-1})^3 \leq \frac{M_3}{3!} (2h)^3,$$

так как максимальное расстояние между узлами x_{i+1} и x_{i-1} не превосходит $2h$.

Поэтому из оценки погрешности интерполирования

$$\frac{M_3 (2h)^3}{3!} = \frac{66 (2h)^3}{3!} \leq 10^{-3}$$

имеем:

$$h^3 \leq \frac{3! \cdot 10^{-3}}{8 \cdot 66} = \frac{10^{-3}}{88},$$

отсюда $h < 0.224$. ■

В Примере 1.3.3 мы решили задачу нахождения максимального шага по заданной погрешности интерполяции. Далее, наоборот, решим задачу вычисления наибольшей погрешности по заданному шагу.

Пример 1.3.4 Какова наибольшая погрешность кусочно-линейной интерполяции для функции $f(x) = e^x$ при заданном шаге h и равномерном разбиении интервала $[a, b]$?

Решение. При кусочно-линейной интерполяции между соседними узлами x_j и x_{j+1} производится линейная интерполяция. На основании формулы (1.10) имеем

$$R_1(f, x) = e^x - P_1(x) = \frac{f''(\xi(x))}{2!} \cdot \omega_1(x).$$

Максимальное значение возрастающей функции $f''(x) = e^x$ принимается на правом конце интервала, при $x = b$, и равно e^b . Из Примера 1.2.3 знаем, что при линейной интерполяции на интервале $[x_j, x_{j+1}]$ имеет место равенство

$$\|\omega_1\| = \max_{x \in [a, b]} |\omega_1(x)| = \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{4} = \frac{h^2}{4}.$$

Отсюда

$$R_1(f, x) = e^x - P_1(x) \leq \frac{e^b}{2!} \cdot \frac{h^2}{4}.$$

■

1.4 Разделённые разности и их свойства

Пусть дана функция f и несовпадающие точки $x_0, x_1, \dots, x_n$ из её области определения, в которых функция принимает значения $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$. *Разделёнными разностями* функции f , обозначаемыми $f^\angle(x_i, x_{i+1})$, называются отношения

$$f^\angle(x_i, x_{i+1}) := \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}, \quad (1.11)$$

$i = 0, 1, \dots, n-1$. Их также называют *разделёнными разностями первого порядка*.

Разделённые разности второго порядка — это величины

$$f^\angle(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) := \frac{f^\angle(x_{i+1}, x_{i+2}) - f^\angle(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}, \quad (1.12)$$

$i = 0, 1, \dots, n-2$, которые являются разделёнными разностями от разделённых разностей. Аналогичным образом вводятся разделённые разности высших порядков: *разделённая разность k -го порядка* от функции f есть, по определению,

$$f^\angle(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}) := \frac{f^\angle(x_{i+1}, \dots, x_{i+k}) - f^\angle(x_i, \dots, x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i}, \quad (1.13)$$

$i = 0, 1, \dots, n-k$, т.е. она равна разделённой разности от разделённых разностей предыдущего $(k-1)$ -го порядка. Порядок разделённой разности нашими обозначениями специально не указывается; он определяется числом аргументов разделённой разности и на единицу его меньше. Для удобства и единообразия можно считать, что сами значения функции являются разделёнными разностями нулевого порядка, т.е. $f^\angle(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Операция взятия разделённой разности является линейной: для любых функций f, g и для любых скаляров α, β справедливо

$$(\alpha f + \beta g)^\angle = \alpha f^\angle + \beta g^\angle \quad (1.14)$$

при одинаковых аргументах разделённых разностей.

Пример 1.4.1 Вычислить последовательные разделённые разности от полинома $f(x) = x^4 - 2x^3 + 3x^2 - 5x + 1$.

Решение. Используя свойство линейности (1.14), будем искать по отдельности разделённые разности от мономов, образующих $f(x)$.

$$\begin{aligned}\frac{x_1^4 - x_0^4}{x_1 - x_0} &= x_1^3 + x_1^2 x_0 + x_1 x_0^2 + x_0^3, \\ \frac{x_1^3 - x_0^3}{x_1 - x_0} &= x_1^2 + x_1 x_0 + x_0^2, \quad \frac{x_1^2 - x_0^2}{x_1 - x_0} = x_1 + x_0.\end{aligned}$$

Для линейного монома $(-5x)$ разделённая разность находится тривиально и равна (-5) , а для константы 1 она равна нулю. Следовательно, в целом

$$f^\angle(x_0, x_1) = (x_1^3 + x_1^2 x_0 + x_1 x_0^2 + x_0^3) - 2(x_1^2 + x_1 x_0 + x_0^2) + 3(x_1 + x_0) - 5.$$

Вычислим вторую разделённую разность от $f(x)$:

$$f^\angle(x_0, x_1, x_2) = \frac{f^\angle(x_1, x_2) - f^\angle(x_0, x_1)}{x_2 - x_0}$$

Сначала вычислим числитель:

$$\begin{aligned}& f^\angle(x_1, x_2) - f^\angle(x_0, x_1) \\&= ((x_2^3 + x_2^2 x_1 + x_2 x_1^2 + x_1^3) - 2(x_2^2 + x_2 x_1 + x_1^2) + 3(x_2 + x_1) - 5) \\&- ((x_1^3 + x_1^2 x_0 + x_1 x_0^2 + x_0^3) - 2(x_1^2 + x_1 x_0 + x_0^2) + 3(x_1 + x_0) - 5) \\&= (x_2^3 - x_0^3) + x_1(x_2^2 - x_0^2) + x_1^2(x_2 - x_0) - 2(x_2^2 - x_0^2) \\&- 2x_1(x_2 - x_0) + 3(x_2 - x_0),\end{aligned}$$

сократив на $(x_2 - x_0)$, получим

$$f^\angle(x_0, x_1, x_2) = x_2^2 + x_2 x_0 + x_0^2 + x_1(x_2 + x_1 + x_0) - 2(x_2 + x_1 + x_0) + 3.$$

Вычислим третью разделённую разность от $f(x)$:

$$f^\angle(x_0, x_1, x_2, x_3) = \frac{f^\angle(x_1, x_2, x_3) - f^\angle(x_0, x_1, x_2)}{x_3 - x_0}.$$

Аналогично, сначала вычислим числитель:

$$\begin{aligned}
 & f^{\angle}(x_1, x_2, x_3) - f^{\angle}(x_0, x_1, x_2) \\
 &= (x_3^2 + x_3x_1 + x_1^2 + x_2(x_3 + x_2 + x_1) - 2(x_3 + x_2 + x_1) + 3) \\
 &- (x_2^2 + x_2x_0 + x_0^2 + x_1(x_2 + x_1 + x_0) - 2(x_2 + x_1 + x_0) + 3) \\
 &= (x_3^2 - x_0^2) + (x_1 + x_2)(x_3 - x_0) - 2(x_3 - x_0),
 \end{aligned}$$

сократив на $(x_3 - x_0)$, получим

$$f^{\angle}(x_0, x_1, x_2, x_3) = x_3 + x_2 + x_1 + x_0 - 2.$$

Вычислим четвёртую разделённую разность от $f(x)$:

$$\begin{aligned}
 f^{\angle}(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4) &= \frac{f^{\angle}(x_1, x_2, x_3, x_4) - f^{\angle}(x_0, x_1, x_2, x_3)}{x_4 - x_0} \\
 &= \frac{(x_4 + x_3 + x_2 + x_1 - 2) - (x_3 + x_2 + x_1 + x_0 - 2)}{x_4 - x_0} = 1.
 \end{aligned}$$

Пятая и последующие разделённые разности от $f(x)$ будут, очевидно, тождественно нулевыми функциями. ■

Пример 1.4.2 Для некоторой функции $g(x)$ имеет место равенство $g^{\angle}(x_0, x_1, \dots, x_n) = 0$ при любом расположении точек $x_0, x_1, \dots, x_n$ из интервала $[a, b]$. Доказать, что функция $g(x)$ — алгебраический полином степени не выше n .

Решение. Пусть дана функция $g(x)$ и её разделённая разность 1-го порядка $g^{\angle}(x_0, x_1)$. Какие выводы можно сделать о функции, если мы знаем вид разделённой разности?

Предположим, что $g^{\angle}(x_0, x_1) = 0$ для любых точек x_0 и x_1 из интервала области определения функции. Зафиксируем точку x_0 и организуем предел

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g^{\angle}(x_0, x_1) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Так как $g^{\angle}(x_0, x_1) = 0$, то рассматриваемый предел существует и тоже равен нулю:

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g^{\angle}(x_0, x_1) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0} = 0.$$

Но этот предел равен производной $g'(x_0)$, так что в силу произвольного выбора точки x_0 можем заключить, что функция $g(x)$ всюду на своей области определения дифференцируема, и её производная — нулевая. Как следствие, функция $g(x)$ — константа.

Предположим теперь, что $g^\zeta(x_0, x_1) = C = \text{const}$ для любых точек x_0 и x_1 из интервала области определения функции. Снова зафиксируем точку x_0 и снова организуем предел

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g^\zeta(x_0, x_1) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Так как всегда $g^\zeta(x_0, x_1) = C$, то рассматриваемый предел существует и тоже равен этой константе:

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g^\zeta(x_0, x_1) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0} = C.$$

С другой стороны, рассматриваемый предел равен производной $g'(x_0)$, так что в силу произвольного выбора точки x_0 заключаем, что функция $g(x)$ всюду на своей области определения дифференцируема, и её производная — константа C . Как следствие, функция $g(x)$ — линейная, вида

$$g(x) = Cx + D$$

для некоторой константы $D \in \mathbb{R}$.

Наконец, предположим, что $g^\zeta(x_0, x_1)$ — алгебраический полином степени $k-1$, $k > 1$, от переменных x_0 и x_1 . Как и раньше, зафиксируем точку x_0 и организуем предел

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_0} g^\zeta(x_0, x_1) = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Предел в левой части равенства существует в силу сделанного нами предположения о разделённой разности $g^\zeta(x_0, x_1)$, никаких подвохов здесь нет. По этой причине при $x_1 \rightarrow x_0$ предел отношения в правой части тоже обязан существовать и совпадать, по определению, с производной $g'(x_0)$. С другой стороны, он является полиномом степени $(k-1)$ относительно переменной x_0 . Поэтому сама функция $g(x)$ должна быть полиномом степени k по этой переменной.

Прилагая результаты рассуждений к условию задачи, начиная с разделённой разности самого высокого порядка, получим требуемое.

■

Как видим из Примеров 1.4.1 и 1.4.2, взятие разделённой разности от алгебраического полинома уменьшает его степень на единицу, так

что разделённые разности порядка более n от полинома степени n равны нулю. Сделанное наблюдение демонстрирует глубокую аналогию между разделёнными разностями и производными: каждое применение к полиному операции дифференцирования так же последовательно уменьшает его степень на единицу. В действительности, эта связь видна даже из определения разделённой разности первого порядка, которую можно рассматривать как «неполную производную», поскольку у неё отсутствует предельный переход одного аргумента к другому.

1.5 Интерполяционный полином Ньютона

Теперь выведем другую форму интерполяционного полинома с учётом требования иметь такое выражение, которое в минимальной степени перестраивалось бы при смене набора узлов интерполяции.

Построим интерполяционный полином первой степени по двум узлам x_0 и x_1 , представив его следующим образом: $P_1(x) = a_0 + a_1(x - x_0)$. Тогда

$$a_0 = f(x_0) = f^{\zeta}(x_0), \quad a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f^{\zeta}(x_0, x_1).$$

Применяя эту идею последовательно к сетке из $n + 1$ узла, получим

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \dots + a_n(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1}),$$

где $a_k = f^{\zeta}(x_0, x_1, \dots, x_k)$.

Пример 1.5.1 По заданной таблице значений функции построить интерполяционный полином Ньютона наименьшей степени:

x	-1	0	1	2
$f(x)$	2	2	2	5

Решение. Интерполяционный полином Ньютона будем искать в каноническом виде

$$P_3(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2).$$

Представим разделённые разности функции в виде таблицы:

k	x_k	$f(x_k)$	$f^{\angle}(x_{k-1}, x_k)$	$f^{\angle}(x_{k-2}, x_{k-1}, x_k)$	$f^{\angle}(x_0, x_1, x_2, x_3)$
0	-1	$a_0 =$ $f^{\angle}(x_0)=2$			
1	0	2	$a_1 =$ $f^{\angle}(x_0, x_1)=0$	$a_2 =$ $f^{\angle}(x_0, x_1, x_2)=0$	
2	1	2	$f^{\angle}(x_1, x_2)=0$	$f^{\angle}(x_1, x_2, x_3)=\frac{3}{2}$	$a_3 =$ $f^{\angle}(x_0, x_1, x_2, x_3)=\frac{1}{2}$
3	2	5	$f^{\angle}(x_2, x_3)=3$		

В итоге получим: $P_3(x) = 2 + \frac{1}{2}(x+1)x(x-1) = 2 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}x^3$. ■

Пример 1.5.2 Для некоторого квадратного трёхчлена $p(x)$ получена следующая таблица значений :

x	-2	-1	0	1	2
$p(x)$	7	3	1	0	3

Известно, что во второй строке таблицы при занесении значений функции была допущена одна ошибка. Требуется найти её, исправить таблицу и восстановить исходный трёхчлен.

Решение. Это задача на владение свойствами разделённых разностей, в частности, разделённых разностей от алгебраических полиномов.

Мы уже отмечали, что разделённые разности ведут себя очень похоже на производные. В Примере 1.4.1 рассмотрели применение разделённых разностей к алгебраическим полиномам и показали, что при каждом очередном взятии разделённой разности степень полинома уменьшается на единицу, так что, в конце концов, она зануляется. Для полинома степени n разделённая разность n -го порядка — это постоянная, а разделённые разности порядка выше n зануляются. Это свойство можно использовать для проверки того, представляет ли некоторая таблица значений алгебраический полином или же какую-то другую функцию. Его нужно применить и к решению рассматриваемой задачи.

Составим таблицу последовательных разделённых разностей по данной таблице значений квадратного трёхчлена $p(x)$:

x	-2	-1	0	1	2
$p(x)$	7	3	1	0	3
$p'(x_i, x_j)$	-4	-2	-1	3	
$p'(x_i, x_j, x_k)$		1	$\frac{1}{2}$	2	
$p'(x_i, x_j, x_k, x_l)$		$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{2}$		

Мы видим, что третья разделённая разность не зануляется. Как следствие, данная таблица значений не может быть таблицей значений квадратного трёхчлена!

Для того, чтобы исправить ошибку, нужно скорректировать одно (это дано по условию задачи!) число из второй строки таблицы. Чтобы определить, какое именно, нужно понять, какими должны быть те или иные разделённые разности алгебраического полинома 2-й степени — нашего квадратного трёхчлена. Для зануления третьих разделённых разностей вторые должны быть равными, т. е. быть константой. Тогда первые разделённые разности должны образовывать арифметическую прогрессию, следуя с равномерным приращением. В построенной выше таблице этого нет, и мы имеем последовательность чисел

$$-4 \quad -2 \quad -1 \quad 3,$$

расстояния (интервалы) между которыми не равны, и потому арифметической прогрессией она не является.

Нетрудно сообразить, что, изменяя по отдельности крайние значения во второй строке таблицы, мы не сможем уравнивать расстояния между членами этой последовательности. Нужно задействовать внутренние узлы (их всего три), которые тянут за собой сразу по два члена последовательности.

Если сдвинуть предпоследнее значение трёхчлена $p(1)$ в единицу, т. е. заменить $p(1) = 0$ на $p(1) = 1$, то правильный ход первых разделённых разностей будет достигнут, мы получим для них арифметическую прогрессию

$$-4 \quad -2 \quad 0 \quad 2.$$

Соответственно, третья разделённая разность при этом занулится и скорректированная таблица значений в самом деле будет представлять

полином 2-й степени. Она будет выглядеть следующим образом:

x	-2	-1	0	1	2
$p(x)$	7	3	1	1	3
$p^\zeta(x_i, x_j)$	-4	-2	0	2	
$p^\zeta(x_i, x_j, x_k)$		1	1	1	
$p^\zeta(x_i, x_j, x_k, x_l)$			0	0	

Чтобы выписать искомый квадратный трёхчлен $p(x)$ в явном виде, можно воспользоваться любыми тремя его значениями из скорректированной таблицы. Например, удобно сделать это с помощью интерполяционного полинома Ньютона, взятого, скажем, в точках $0, 1, 2$:

$$\begin{aligned}
 p(x) &= p(0) + p^\zeta(0, 1)(x - 0) + p^\zeta(0, 1, 2)(x - 0)(x - 1) \\
 &= 1 + 0 \cdot (x - 0) + 1 \cdot (x - 0)(x - 1) \\
 &= 1 + x(x - 1) = x^2 - x + 1.
 \end{aligned}$$

Не возбраняется построить трёхчлен $p(x)$ любым другим доступным способом. ■

Основной недостаток построения интерполяционного полинома в форме Лагранжа заключается в том, что при добавлении в таблицу нового узла (новых результатов измерений), в формуле приходится пересчитывать все слагаемые. От этого недостатка свободен интерполяционный полином в форме Ньютона, в котором добавление нового узла ведёт к добавлению лишь одного слагаемого к построенному ранее полиному. Но в случае изменения хотя бы одного значения y_i в исходной таблице метод Ньютона теряет свое преимущество — приходится пересчитывать всю схему, в то время как в форме Лагранжа достаточно поменять значения числовых множителей (y_i) базисных полиномов.

1.6 Алгебраическая интерполяция с кратными узлами

Кратным узлом называют узел, в котором информация о функции задаётся более одного раза. Заданы могут быть значение функции и значения производных в одном и том же узле. К задаче интерполяции с кратными узлами мы приходим, в частности, если степень интерполяционного полинома, который нужно однозначно построить по некоторым узлам, равна либо больше количества этих узлов.

Далее *задачей алгебраической интерполяции с кратными узлами* мы будем называть следующую постановку. Даны несовпадающие точки x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, — узлы интерполирования, в которых заданы значения $y_i^{(k)}$, $k = 0, 1, \dots, N_i - 1$, — их принимают интерполируемая функция f и её производные $f^{(k)}(x)$. При этом число N_i называют *кратностью* узла x_i . Требуется построить полином $H_m(x)$ степени m , такой что

$$\begin{aligned} H_m(x_0) &= y_0^{(0)}, & H'_m(x_0) &= y_0^{(1)}, & \dots, & & H_m^{(N_0-1)}(x_0) &= y_0^{(N_0-1)}, \\ H_m(x_1) &= y_1^{(0)}, & H'_m(x_1) &= y_1^{(1)}, & \dots, & & H_m^{(N_1-1)}(x_1) &= y_1^{(N_1-1)}, \\ &\vdots & &\vdots & & \ddots & &\vdots \\ H_m(x_n) &= y_n^{(0)}, & H'_m(x_n) &= y_n^{(1)}, & \dots, & & H_m^{(N_n-1)}(x_n) &= y_n^{(N_n-1)} \end{aligned}$$

или, кратко,

$$H_m^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots, N_i - 1, \quad (1.15)$$

где полагается $H_m^{(0)} = H_m$. Иными словами, в узлах x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, как сам полином $H_m(x)$, так и все его производные $H_m^{(k)}(x)$ вплоть до заданных порядков $(N_i - 1)$ должны принимать предписанные им значения $y_i^{(k)}$.

Для случая вещественной интерполяционной таблицы задаче можно придать следующую геометрическую интерпретацию: требуется провести алгебраическую кривую через заданные точки так, чтобы в каждой точке обеспечить заданные наклоны касательных (а также, возможно, кривизны и т. п.). Задачу алгебраической интерполяции с кратными узлами в исследуемой нами постановке часто называют также задачей *эрмитовой интерполяции*, а сам полином $H_m(x)$, решающий эту задачу, называют *интерполяционным полиномом Эрмита*.

Справедлив следующий результат:

Теорема 1.6.1 [4, 13, 22] *Решение задачи алгебраической интерполяции с кратными узлами при $m = N_0 + N_1 + \dots + N_n - 1$ существует и единственно.*

Пример 1.6.1 Построить полином, удовлетворяющий условиям

$$P(-1) = 1, \quad P(1) = 5, \quad P'(-1) = 2, \quad P'(1) = 6.$$

Решение. Имеем два узла сетки и два значения полинома в узлах, по этим данным можем построить полином первого порядка, но ещё даны два значения производной полинома в узлах, следовательно, по теореме можем построить единственный полином третьей степени. Нам нужно найти четыре коэффициента полинома $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, производная которого имеет вид

$$P'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2.$$

Вариант 1. Найдём коэффициенты из решения системы

$$\begin{cases} -a_3 + a_2 - a_1 + a_0 = 1, \\ a_3 + a_2 + a_1 + a_0 = 5, \\ 3a_3 - 2a_2 + a_1 = 2, \\ 3a_3 + 2a_2 + a_1 = 6. \end{cases}$$

Получим $a_0 = 2, a_1 = a_2 = a_3 = 1$, или $P(x) = 2 + x + x^2 + x^3$.

Замечание. Описанным выше способом удобно вычислять коэффициенты при небольшом количестве интерполяционных данных (до десятка).

Вариант 2. Будем искать полином в виде

$$P(x) = (x+1)^2(b_0 + b_1(x-1)) + (x-1)^2(c_0 + c_1(x+1)),$$

приняв за его базисные функции многочлены

$$Q_1 = (x+1)^2, \quad Q_2 = b_0 + b_1(x-1), \quad Q_3 = (x-1)^2, \quad Q_4 = c_0 + c_1(x+1).$$

Производная полинома имеет вид

$$\begin{aligned} P'(x) = & 2(x+1)(b_0 + b_1(x-1)) + (x+1)^2 b_1 \\ & + (x-1)(c_0 + c_1(x+1)) + (x-1)^2 c_1. \end{aligned}$$

Входящие в это выражение неизвестные коэффициенты найдём из решения системы линейных уравнений

$$\left\{ \begin{array}{rcl} (-2)^2 c_0 & = & 1, \\ 2^2 b_0 & = & 5, \\ 2 \cdot (-2) c_0 + (-2)^2 c_1 & = & 2, \\ 2 \cdot 2 b_0 + 2^2 b_1 & = & 6. \end{array} \right.$$

Получим $b_0 = \frac{5}{4}$, $b_1 = \frac{1}{4}$, $c_0 = \frac{1}{4}$, $c_1 = \frac{3}{4}$, так что в целом

$$P(x) = 2 + x + x^2 + x^3.$$

■

Пример 1.6.2 Для функции $f(x) = \cos x$ построить интерполяционный полином, удовлетворяющий условиям

$$P(0) = 1, \quad P\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \quad P'(0) = 0, \quad P'\left(\frac{\pi}{2}\right) = -1.$$

Оценить погрешность интерполяции для $0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}$.

Решение. Будем искать полином в виде (см. Пример 1.6.1, вариант 2)

$$P(x) = x^2 \left(b_0 + b_1 \left(x - \frac{\pi}{2} \right) \right) + \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 (c_0 + c_1 x),$$

а его производная имеет вид

$$\begin{aligned} P'(x) &= 2x \left(b_0 + b_1 \left(x - \frac{\pi}{2} \right) \right) + x^2 b_1 + \\ &\quad + 2 \left(x - \frac{\pi}{2} \right) (c_0 + c_1 x) + \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 c_1. \end{aligned}$$

Неизвестные коэффициенты найдём из соотношений

$$1 = P(0) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \cdot c_0 \Rightarrow c_0 = \left(\frac{2}{\pi} \right)^2,$$

$$0 = P\left(\frac{\pi}{2}\right) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \cdot b_0 \Rightarrow b_0 = 0,$$

$$0 = P'(0) = 2 \cdot \left(-\frac{\pi}{2} \right) \cdot c_0 + \left(-\frac{\pi}{2} \right)^2 \cdot c_1 \Rightarrow c_1 = \frac{16}{\pi^3},$$

$$-1 = P'\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2 \cdot \frac{\pi}{2} \cdot b_0 + \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \cdot b_1 \Rightarrow b_1 = -\frac{4}{\pi^2}.$$

Искомый полином имеет поэтому вид

$$P(x) = \left(\frac{16}{\pi^3} - \frac{4}{\pi^2} \right) x^3 + \left(\frac{2}{\pi} - \frac{12}{\pi^2} \right) x^2 + 1.$$

Для оценки погрешности используем формулу

$$|R_3| = \left| \frac{\cos^{(4)}(\xi(x))}{4!} x^2 \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 \right| \leq \frac{M_4}{4!} x^2 \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2,$$

где

$$M_4 = \max_{x \in [0, \frac{\pi}{2}]} |\cos^{(4)}(x)| = 1.$$

При этом

$$\omega'_3(x) = \left(x^2 \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 \right)' = 2x \left(x - \frac{\pi}{2} \right) \left(2x - \frac{\pi}{2} \right).$$

Так как $\omega_3(0) = \omega_3\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$, то $\max_{x \in [0, \frac{\pi}{2}]} |\omega_3(x)| = \omega_3\left(\frac{\pi}{4}\right) = \left(\frac{\pi}{4}\right)^4$.

$$|R_3| \leq \frac{1}{4!} \left(\frac{\pi}{4} \right)^4 = \frac{\pi^4}{24 \cdot 256}.$$

■

1.7 Полиномы Чебышёва

Полиномы Чебышёва — это семейство алгебраических полиномов, зависящих от неотрицательного целого параметра n и по традиции обозначаемых $T_n(x)$, которые имеют несколько равносильных друг другу представлений. Популярно их *тригонометрическое представление*:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), \quad x \in [-1, 1]. \quad (1.16)$$

Функция $T_n(x)$, задаваемая формулой (1.16), — алгебраический полином степени n , и его старший коэффициент равен 2^{n-1} при $n \geq 1$ (см.

[4, 8, 22]). В частности,

$$\begin{aligned}
 T_0(x) &= 1, \\
 T_1(x) &= x, \\
 T_2(x) &= 2x^2 - 1, \\
 T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\
 T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \\
 T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x, \\
 &\dots \qquad \dots \qquad .
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

Нетрудно показать, что все корни полинома Чебышёва $T_n(x)$ находятся на интервале $[-1, 1]$ и выражаются в виде

$$\tilde{x}_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \tag{1.18}$$

Приведённые полиномы Чебышёва $\tilde{T}_n(x) = 2^{1-n} T_n(x)$ с единичным старшим коэффициентом обладают замечательным экстремальным свойством: среди полиномов степени n , $n \geq 1$, со старшим коэффициентом, равным 1, полином $\tilde{T}_n(x) := 2^{1-n} T_n(x)$ имеет на интервале $[-1, 1]$ наименьшее равномерное отклонение от нуля. Иными словами, если $Q_n(x)$ — полином степени n со старшим коэффициентом 1, то (см. [4, 8, 22])

$$\max_{x \in [-1, 1]} |Q_n(x)| \geq \max_{x \in [-1, 1]} |\tilde{T}_n(x)| = 2^{1-n}. \tag{1.19}$$

Пример 1.7.1 ([8], с. 66) С помощью полинома первой степени $Q_1(x) = Ax + B$ наилучшим образом равномерно (в чебышёвской норме) приблизить функцию $f(x) = x^2$ на интервале $[0, 1]$.

Решение. Требуется определить коэффициенты A и B так, чтобы величина

$$R_2 = \max_{x \in [0, 1]} |x^2 - Ax - B|$$

принимала наименьшее возможное значение. Следовательно, тогда полином $Q_2(x) = x^2 - Ax - B$ наименее отклоняется от нуля на интервале $[0, 1]$.

Применим замену переменных

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t,$$

преобразующую интервал $[a, b] \ni x$ в интервал $[-1, 1] \ni t$. При этом старший коэффициент, при t^m , будет равен $\left(\frac{b-a}{2}\right)^m$, так что

$$\tilde{T}_m(x) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^m \cdot T_m(t) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^m \cdot T_m\left(\frac{x - \frac{b+a}{2}}{\frac{b-a}{2}}\right).$$

В нашем примере $a = 0$ и $b = 1$. Используя линейную замену, имеем

$$\begin{aligned} Q_2(x) &= \left(\frac{1}{2}\right)^2 \cdot T_2\left(\frac{x - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2}}\right) = \frac{1}{4} \cdot T_2(2x - 1) \\ &= \frac{1}{4} \cdot \left((2x - 1)^2 - \frac{1}{2}\right) = x^2 - x + \frac{1}{8}, \end{aligned}$$

(см. (1.17)). Отсюда $Q_1(x) = x - \frac{1}{8}$, причём $R_2 = 2 \cdot \left(\frac{1}{4}\right)^2 = \frac{1}{8}$. ■

Пример 1.7.2 Построить алгебраический полином 3-й степени со свободным членом 10, равномерно наименее отклоняющийся от нуля на интервале $[2, 6]$.

Решение. Прежде всего, нужно признать, что в самой формулировке этой задачи имеется некоторая недосказанность, и для полной определённости желательно «доформулировать» её так: «Построить алгебраический полином 3-й степени со свободным членом 10, равномерно наименее отклоняющийся от нуля на интервале $[2, 6]$ *среди всех полиномов 3-й степени с тем же свободным членом*».

В [4, 8, 22] подробно рассматриваются полиномы Чебышёва (первого рода) и их свойство иметь наименьшее равномерное отклонение от нуля на интервале $[-1, 1]$ среди всех алгебраических полиномов одинаковой степени с тем же самым старшим коэффициентом. Если требуется полином, равномерно наименее отклоняющийся от нуля на интервале $[a, b]$, отличным от канонического интервала $[-1, 1]$, то мы можем организовать взаимно-однозначное линейное преобразование между $[-1, 1]$ и $[a, b]$, потом сделать соответствующую замену переменных в полиноме Чебышёва и получить полином той же степени, который на $[a, b]$ обладает тем же экстремальным свойством. Последнее утверждение следует из его доказательства для $[-1, 1]$, в котором специфика этого интервала никак, в общем-то, не используется. То же самое в аналогичных условиях мы можем повторить и для $[a, b]$.

Но в решаемой задаче речь идёт о другом: требуется наименьшее равномерное отклонение от нуля среди полиномов, имеющих одинаковый свободный член, а не старший коэффициент! Таким образом, существующая формулировка экстремального свойства полиномов Чебышёва на $[-1, 1]$ для решения задачи напрямую не применима. Тем не менее, творчески воспользовавшись теорией полиномов Чебышёва, мы всё-таки сможем задачу решить.

Снова проанализируем доказательство экстремального свойства для произвольного интервала $[a, b]$. В нём исследуется разность двух полиномов, а именно, полинома $T(x)$, который является полиномом Чебышёва или получен из него линейным преобразованием, и пробного полинома $Q(x)$, который предполагается имеющим меньшее равномерное отклонение. Эта разность $(T(x) - Q(x))$ образует полином меньшей степени $(n - 1)$ из-за совпадения старших коэффициентов в $T(x)$ и $Q(x)$. Используя наше знание экстремумов полинома Чебышёва — тот факт, что все они равны по модулю и чередуются по знаку, выводим, что у разности $(T(x) - Q(x))$ имеется n различных корней. Так как степень разности $(T(x) - Q(x))$ равна не более $n - 1$, то эта разность должна быть тождественно нулевой, что и требовалось.

Если в $T(x)$ и $Q(x)$ старшие коэффициенты не обязательно одинаковы, то степень разности $(T(x) - Q(x))$ уже не меньше n , и наши рассуждения здесь не проходят. Тем не менее, если у $T(x)$ и $Q(x)$ совпадают свободные члены, то разность $(T(x) - Q(x))$ имеет нулевой свободный член, и из неё можно вынести переменную x , представив в виде

$$T(x) - Q(x) = x R(x),$$

где $R(x)$ — полином степени $n - 1$. Если рассматриваемый интервал $[a, b]$ не содержит нуля, то переменная x в нуль не обращается и корня разности $(T(x) - Q(x))$ не даёт. Следовательно, и в этом случае разность $(T(x) - Q(x))$ на $[a, b]$ должна иметь не более $n - 1$ корней, а из рассмотрения знакочередующихся экстремумов полинома $T(x)$ мы выводим наличие n корней. Снова противоречие, и снова экстремальное свойство полиномов Чебышёва имеет место.

Как следствие, алгебраический полином, имеющий среди всех полиномов той же степени с одинаковым свободным членом наименьшее равномерное отклонение от нуля на интервале, не содержащем нуля, — это снова полином, построенный из полинома Чебышёва с помощью линейного преобразования.

Для решения задачи нужно построить взаимно однозначное линейное отображение между интервалами $[-1, 1]$ и $[2, 6]$. Оно даётся фор-

мулами

$$y = 2x + 4, \quad x = \frac{1}{2}y - 2.$$

Далее подставляем выражение для x в формулу для 3-го полинома Чебышёва (см. (1.17)), $T_3(x) = 4x^3 - 3x$, получаем полином

$$4\left(\frac{1}{2}y - 2\right)^3 - 3\left(\frac{1}{2}y - 2\right),$$

и масштабируем его так, чтобы свободный член стал равным 10.

Конкретно,

$$\begin{aligned} & 4\left(\frac{1}{2}y - 2\right)^3 - 3\left(\frac{1}{2}y - 2\right) \\ &= 4\left(\left(\frac{1}{2}y\right)^3 - 3\left(\frac{1}{2}y\right)^2 \cdot 2 + 3\left(\frac{1}{2}y\right) \cdot 2^2 - 2^3\right) - 3\left(\frac{1}{2}y - 2\right) \\ &= \left(\frac{1}{2}y^3 - 6y^2 + 24y - 32\right) - \left(\frac{3}{2}y - 6\right) \\ &= \frac{1}{2}y^3 - 6y^2 + \frac{45}{2}y - 26. \end{aligned}$$

Чтобы получить свободный член 10, нужно умножить этот полином на $(-\frac{10}{26})$. Окончательно: алгебраический полином 3-й степени со свободным членом 10, равномерно наименее отклоняющийся от нуля на интервале $[2, 6]$ среди всех полиномов 3-й степени с таким же старшим коэффициентом, есть

$$-\frac{5}{26}y^3 + \frac{30}{13}y^2 + \frac{225}{26}y + 10.$$

■

1.8 Сплайны

Алгебраическое интерполирование на интервалах большой ширины может встретить следующие трудности:

- если узлов немного и расстояния между ними большие, то получается малая точность интерполяции;
- если используется большое число узлов с частым расположением, то получаются интерполяционные многочлены высокого порядка, с которыми не очень удобно работать и которые могут сильно осциллировать, искажая поведение функции.

В таких случаях более благоприятный результат может дать интерполирование с помощью сплайн-функций.

Пусть интервал $[a, b] \subset \mathbb{R}$ разбит несовпадающими точками $a = x_0, x_1, \dots, x_n = b$ на подинтервалы. *Полиномиальным сплайном* на $[a, b]$ называется функция, которая на каждом подинтервале $[x_{i-1}, x_i]$ является алгебраическим полиномом и на всём интервале $[a, b]$ непрерывна вместе со своими производными вплоть до некоторого порядка.

Максимальная на всём интервале $[a, b]$ степень полиномов, задающих сплайн, называется *степенью сплайна*. Наивысший порядок производной сплайна, которая непрерывна на $[a, b]$, — это *гладкость сплайна*, а разность между степенью сплайна и его гладкостью называется *дефектом сплайна*. Наконец, точки $x_i, i = 0, 1, \dots, n$, — концы подинтервалов, на которые разбивается $[a, b]$, — называют *узлами сплайна*.

Сплайны степени 1 являются кусочно-линейными функциями. Наиболее популярны в прикладных задачах, по-видимому, сплайны третьей степени дефекта 1, которые называются *кубическими сплайнами*. Сплайны $S(x)$, удовлетворяющие на концах рассматриваемого интервала $[a, b]$ дополнительным условиям

$$S''(a) = S''(b) = 0, \quad (1.20)$$

называются *естественными сплайнами* или *натуральными сплайнами*.

Пример 1.8.1 Построить интерполяционный квадратичный (параболический) сплайн дефекта 1 для функции $f(x)$, заданной таблицей

x	0	1	2
$f(x)$	2	3	12
$f'(x)$	1	—	—

Найти значение функции в точке $x = 1.5$.

Решение. На подинтервале $[0, 1]$ строим полином второго порядка $S_1 = a_2x^2 + a_1x + a_0$, такой что $S_1(0) = 1, S_1(1) = 3$, а $S'_1(0) = 1$. Получим систему

$$\begin{cases} a_0 & = 2, \\ a_0 + a_1 + a_2 & = 3, \\ a_1 & = 1. \end{cases}$$

Отсюда $a_0 = 2, a_1 = 1, a_2 = 0$, и, следовательно, $S_1(x) = x + 2$.

На подинтервале $[1, 2]$ строим другой полином второго порядка $S_2 = b_2x^2 + b_1x + b_0$, такой что $S_2(1) = 3$, $S_2(3) = 12$, а в точке $x = 1$, где склеиваются полиномы, $S'_1(1) = S'_2(1)$. Получим систему

$$\begin{cases} b_0 + b_1 + b_2 = 3, \\ b_0 + 2b_1 + 4b_2 = 12, \\ b_1 + 2b_2 = 1. \end{cases}$$

Отсюда $b_0 = 10$, $b_1 = -15$, $b_2 = 8$, и, следовательно, $S_2(x) = 8x^2 - 15x + 10$. Точка $x = 1.5$ лежит в интервале $[1, 2]$, следовательно, $S_2(1.5) = 5.5$. ■

Пример 1.8.2 Построить естественный интерполяционный кубический сплайн $S(x)$ дефекта 1 по следующей таблице значений:

x	-1	0	1
$S(x)$	0	1	0

Решение. По условию задачи из того, что сплайн естественный, следует $S'_1(-1) = S''_2(-1) = 0$. На подинтервале $[-1, 0]$ строим полином третьего порядка $S_1 = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$, такой что $S_1(-1) = 0$, $S_1(0) = 1$, а $S''_1(-1) = -6a_3 + 2a_2 = 0$. Получим систему уравнений

$$\begin{cases} a_0 = 1, \\ a_0 - a_1 + a_2 - a_3 = 0, \\ 2a_2 - 6a_3 = 1. \end{cases}$$

Отсюда $S_1 = a_3x^3 + 3a_3x^2 + (1 + 2a_3)x + 1$.

На подинтервале $[0, 1]$ строим другой полином третьего порядка $S_2 = b_3x^3 + b_2x^2 + b_1x + b_0$, такой что $S_2(0) = 1$, $S_2(1) = 0$, а $S''_2(-1) = 6b_3 + 2b_2 = 0$. Получим систему

$$\begin{cases} b_0 = 1, \\ b_0 + b_1 + b_2 + b_3 = 0, \\ 2b_2 + 6b_3 = 1. \end{cases}$$

Отсюда $S_2 = b_3x^3 - 3b_3x^2 + (-1 + 2b_3)x + 1$.

В точке $x = 0$, где склеиваются полиномы, $S'_1(1) = S'_2(1)$, и $S''_1(1) = S''_2(1)$. Получим систему

$$\begin{cases} -1 + 2b_3 = 1 + 2a_3, \\ -6b_3 = 6a_3 \end{cases}.$$

В результате получаем значения коэффициентов:

$$a_0 = 1, a_1 = 0, a_2 = -\frac{3}{2}, a_3 = -\frac{1}{2}, b_0 = 1, b_1 = 0, b_2 = -\frac{3}{2}, b_3 = \frac{1}{2}. \\ \text{Следовательно, } S_1 = -\frac{1}{2}x^3 - \frac{3}{2}x^2 + 1, S_2 = \frac{1}{2}x^3 - \frac{3}{2}x^2 + 1. \blacksquare$$

Пример 1.8.3 Интерполяционный квадратичный сплайн $S(x)$ дефекта 1 построен по следующей таблице значений:

x	0	1	2
$S(x)$	1	0	0

Кроме того, $S'(2) = 1$. Найти значение $S'(0.5)$.

Решение. Квадратичный кусок сплайна на интервале $[1, 2]$ легко строится из двух условий интерполяции на концах этого интервала и условия на производную $S'(2) = 1$. Далее аналогично строим квадратичный кусок сплайна на интервале $[0, 1]$. Обозначим кусок сплайна на подинтервале $[0, 1]$ через $S_1(x)$, а на подинтервале $[1, 2]$ — через $S_2(x)$.

Таблица значений сплайна говорит, что у $S_2(x)$ в точках 1 и 2 имеются нули, так что выражение для $S_2(x)$ обязано иметь вид

$$S_2(x) = A(x-1)(x-2) = A(x^2 - 3x + 2),$$

где A — некоторая константа. Для её определения продифференцируем выражение для $S_2(x)$ и подставим $x = 2$:

$$S'_2(x) = A(2x - 3),$$

$$S'_2(2) = A = 1,$$

так что $A = 1$. Следовательно,

$$S_2(x) = x^2 - 3x + 2, \quad S'_2(x) = 2x - 3,$$

в частности, $S'_2(1) = -1$.

Далее пусть $S_1(x) = ax^2 + bx + c$, так что $S'_1(x) = 2ax + b$.

Тот факт, что таблица значений сплайна требует $S_1(0) = 1$, сразу же влечёт равенство $c = 1$. Далее из интерполяционного условия

котором достигается наименьшее значение выбранной нормы невязки этого уравнения (системы уравнений).

Одной из наиболее популярных норм, которую минимизируют для невязки, является евклидова норма вектора (т. е. его обычная длина), которую часто называют 2-нормой:

$$\|x\|_2 := \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} \quad \text{для } x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top.$$

Известен следующий классический результат:

Теорема 1.9.1 (см., к примеру, [9, 22]) *Для систем линейных алгебраических уравнений $Ax = b$ псевдорешения относительно евклидовой нормы являются решениями так называемой нормальной системы уравнений $A^\top Ax = A^\top b$.*

Пример 1.9.1 Найти нормальное псевдорешение для системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Решение. По определению, *нормальным псевдорешением* называется псевдорешение, имеющее минимальную норму. Псевдорешения — векторы, минимизирующие норму невязки между левой и правой частями уравнения или системы уравнений. Норму всюду понимается как евклидова, т. е. корень квадратный из суммы квадратов компонент вектора (она порождается стандартным скалярным произведением в $\mathbb{R}^n$).

Для системы линейных алгебраических уравнений $Ax = b$ псевдорешения относительно евклидовой нормы являются решениями так называемой *нормальной системы уравнений $A^\top Ax = A^\top b$* , которая получается из исходной системы домножением слева на транспонированную матрицу системы (это преобразование называется *первой трансформацией Гаусса*, см. [18, 22]).

Таким образом, наша задача — найти все псевдорешения исходной системы и потом выбрать из них (если их более одного) наименьшее по евклидовой норме.

Организуем нормальную систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix},$$

то есть

$$\begin{pmatrix} 6 & 12 \\ 12 & 24 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 12 \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Матрица получившейся нормальной системы — особенная, определитель её равен нулю. Как следствие, псевдорешений будет не одно, а целое линейное многообразие. Но найти его нетрудно, опираясь на стандартные знания, полученные в курсе алгебры.

Общее решение неоднородной линейной системы есть, как известно, сумма какого-то её частного решения и общего решения однородной системы. Частное решение здесь легко угадывается по виду системы: им может быть, к примеру, вектор $(1, 0)^T$. Найдём теперь общее решение однородной системы

$$\begin{pmatrix} 6 & 12 \\ 12 & 24 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Первое и второе уравнения в этой системе пропорциональны, так что можно решать, скажем, только первое уравнение, и найти

$$x_1 + 2x_2 = 0,$$

т. е. $x_1 = -2x_2$. В целом решением нормальной системы уравнений (1.22) является множество векторов вида

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2x_2 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2x_2 \\ x_2 \end{pmatrix},$$

когда параметр x_2 пробегает всю вещественную ось $\mathbb{R}$.

Теперь будем минимизировать евклидову норму векторов из полученного множества решений. Для простоты можно заменить её просто суммой квадратов, так что ищем минимум

$$p(x_2) = (1 - 2x_2)^2 + x_2^2 = 1 - 4x_2 + 5x_2^2 \rightarrow \min \quad \text{для } x_2 \in \mathbb{R}.$$

Нахождение минимума квадратного трёхчлена — задача известная, и решать её можно разными способами. Например, как в анализе, продифференцируем $p(x_2)$ по единственной переменной x_2 и приравняем

производную нулю:

$$p'(x) = -4 + 10x_2 = 0,$$

откуда $x_2 = 0.4$. Соответственно, $x_1 = 1 - 2x_2 = 0.2$. Итак, нормальным псевдорешением нашей системы линейных алгебраических уравнений является вектор

$$\begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.4 \end{pmatrix}.$$

■

Пример 1.9.2 Найти нормальное псевдорешение для системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 0, \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1. \end{cases}$$

Решение. Теория, требуемая для решения этой задачи, изложена выше в решении аналогичного Примера 1.9.1. Здесь приведём только выкладки и числовые расчёты.

В матричной форме решается система

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Для неё нормальная система уравнений имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

или

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

Нам нужно найти общее решение системы (1.23), что даст все псевдорешения исходной линейной системы, и выбрать из них то, которое имеет минимальную евклидову норму.

Будем искать общее решение для (1.23) в виде суммы её частного решения и общего решения однородной системы

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Все уравнения этой однородной системы одинаковы и приводят к соотношению

$$x_1 = -x_2 - x_3,$$

так что общее решение однородной системы (1.24) образовано векторами вида

$$\begin{pmatrix} -x_2 - x_3 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

для всевозможных $x_2, x_3 \in \mathbb{R}$. Частное решение системы (1.23) также легко угадывается из-за её полной симметричности: это может быть, к примеру, $(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6})^\top$. Следовательно, общее решение нормальной системы (1.23) имеет вид

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -x_2 - x_3 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} - x_2 - x_3 \\ \frac{1}{6} + x_2 \\ \frac{1}{6} + x_3 \end{pmatrix}.$$

Квадрат евклидовой нормы таких векторов равен

$$\begin{aligned} \Phi &= \left(\frac{1}{6} - x_2 - x_3\right)^2 + \left(\frac{1}{6} + x_2\right)^2 + \left(\frac{1}{6} + x_3\right)^2 \\ &= \frac{1}{12} + 2x_2^2 + 2x_2x_3 + 2x_3^2. \end{aligned}$$

Чтобы минимизировать выписанное выражение по x_2 и x_3 , продифференцируем по этим переменным и приравняем частные производные нулю:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_2} = 4x_2 + 2x_3 = 0,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_3} = 2x_2 + 4x_3 = 0.$$

Так как матрица

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

неособенна (имеет ненулевой определитель), то выписанная система соотношений на частные производные удовлетворяется лишь при $x_2 = x_3 = 0$. Соответствующий минимум, очевидно, достигается, так как эта матрица является ещё и матрицей вторых производных и она положительно определена.

Следовательно, искомое псевдорешение с минимальной нормой — нормальное псевдорешение — есть $(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6})^\top$. ■

1.10 Приближение функций

В задаче приближения функций (частным случаем которой можно считать задачу интерполирования) заданную функцию $f(x)$ требуется заменить другой функцией $g(x)$, которая близка или даже «наиболее близка» к $f(x)$. В частности, в задаче наилучшего приближения необходимо найти $g(x)$ так, чтобы

$$\text{dist}(f, g) = \|f(x) - g(x)\| = \inf_{h \in \mathcal{G}} \|f(x) - h(x)\|.$$

Функция $g(x)$ называется *наилучшим приближением* для $f(x)$ в рассматриваемой задаче аппроксимации, а число $\text{dist}(f, g)$ — это отклонение наилучшего приближения g от приближаемой функции f . Отклонение функций друг от друга, мера их взаимной близости, измеряется нормой разности этих функций в соответствующем пространстве $\text{dist}(f, g) = \|f - g\|$.

В этом разделе мы будем заниматься задачей приближения функций алгебраическими полиномами, когда в качестве функции $g(x)$ берётся алгебраический полином. Далее мы подробно рассмотрим задачу квадратичного приближения функций, как непрерывную, так и дискретную. Напомним, что два этих варианта задачи приближения отличаются множеством точек, на котором сравниваются исходная функция $f(x)$ и приближающая функция $g(x)$. Для задачи дискретного приближения это множество состоит из конечного набора точек.

В частности, в дискретном варианте задачи квадратичного приближения за меру отклонения полинома $P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ от функции $y = f(x)$ можно принять величину

$$\Phi = \sum_{i=0}^n (P_n(x_i) - f(x_i))^2.$$

Здесь мы, фактически, рассматриваем квадрат евклидовой нормы отклонения функций на дискретном множестве точек-узлов, что удобнее и обладает лучшими математическими свойствами: нам не нужно брать квадратный корень, который имеет особенность производной в нуле.

Пример 1.10.1 Найти квадратичный трёхчлен, который обеспечивает наилучшее среднеквадратичное приближение для функции, заданной следующей таблицей:

x_i	1	2	3
y_i	3	2	1

Решение. Эта задача может быть решена общим способом, теория которого изложена в книгах [2, 8, 22] и др., но мы приведём здесь прямое решение задачи, вытекающее из смысла постановки. Далее в примерах 1.10.2–1.10.4, приведённых ниже, будет рассмотрен общий способ решения.

Итак, требуется найти коэффициенты квадратичной функции $f(x) = ax^2 + bx + c$, такие что функция

$$\Phi(a, b, c) = \sum_{i=0}^2 ((ax_i^2 + bx_i + c) - y_i)^2$$

достигает наименьшего значения. Подозрительные на экстремум коэффициенты определим из системы:

$$\Phi'_a(a, b, c) = 0, \quad \Phi'_b(a, b, c) = 0, \quad \Phi'_c(a, b, c) = 0.$$

$$\begin{cases} \Phi'_a(a, b, c) = 2 \sum_{i=0}^2 (ax_i^2 + bx_i + c - y_i) x_i^2 = 0, \\ \Phi'_b(a, b, c) = 2 \sum_{i=0}^2 (ax_i^2 + bx_i + c - y_i) x_i = 0, \\ \Phi'_c(a, b, c) = 2 \sum_{i=0}^2 (ax_i^2 + bx_i + c - y_i) = 0. \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} a \sum_{i=0}^2 x_i^4 + b \sum_{i=0}^2 x_i^3 + c \sum_{i=0}^2 x_i^2 = \sum_{i=0}^2 x_i^2 y_i, \\ a \sum_{i=0}^2 x_i^3 + b \sum_{i=0}^2 x_i^2 + c \sum_{i=0}^2 x_i = \sum_{i=0}^2 x_i y_i, \\ a \sum_{i=0}^2 x_i^2 + b \sum_{i=0}^2 x_i + 3c = \sum_{i=0}^2 y_i. \end{cases}$$

Для удобства вычислений составим таблицу:

				Σ
x_i	1	2	3	6
y_i	3	2	1	6
x_i^2	1	4	9	14
x_i^3	1	8	27	36
x_i^4	1	16	81	98
$x_i y_i$	3	4	3	10
$x_i^2 y_i$	3	8	9	20

Тогда из системы

$$\begin{cases} 98a + 36b + 14c = 20, \\ 36a + 14b + 6c = 10, \\ 14a + 6b + 3c = 6 \end{cases}$$

найдем коэффициенты $a = 0$, $b = -1$, $c = 4$ и $f(x) = 4 - x$. ■

В непрерывной задаче среднеквадратичного приближения за меру отклонения полинома $P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$ от непрерывной функции $y = f(x)$ на интервале $[a, b]$ принимают величину

$$\Phi = \int_a^b (P_n(x) - f(x))^2 dx.$$

Рассмотрим примеры построения аппроксимирующего полинома наилучшего среднеквадратичного приближения методом, изложенным в [2, 8, 22] и др. Считаем что линейное подпространство, которому принадлежит полином, имеет размерность $n + 1$ и его базис $\{\varphi_i\}_{i=1}^{n+1}$ нам известен. Для заданной f мы ищем приближение P_n в виде

$$P_n = \sum_{i=1}^{n+1} a_{i-1} \varphi_i, \quad (1.25)$$

где a_i , $i = 1, 2, \dots, n$, — неизвестные коэффициенты, подлежащие определению.

Если через Φ обозначить квадрат нормы отклонения f от P_n , то

$$\Phi = \|f - P_n\|^2 = \langle f - P_n, f - P_n \rangle = \int_a^b (P_n(x) - f(x))^2 dx.$$

Пример 1.10.2 Среди двучленов вида $ax^2 + b$ с параметрами $a, b \in \mathbb{R}$ найти тот, который на интервале $[-1, 1]$ обеспечивает наилучшее среднеквадратичное приближение (с единичным весом) к функции модуля $f(x) = |x|$.

Решение. Применяем стандартный метод среднеквадратичного приближения в линейном подпространстве функций с базисом $\{1, x^2\}$.

Для составления системы линейных алгебраических уравнений, из которой определяются коэффициенты разложения b и a наилучшего приближения по этому базису, нам нужно найти взаимные скалярные произведения векторов базиса (из них образована матрица Грама) и скалярные произведения векторов базиса на приближаемую функцию (из них образован вектор правой части системы).

Имеем

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 1 \cdot 1 \, dx &= 2, & \int_{-1}^1 1 \cdot x^2 \, dx &= \frac{2}{3} \\ \int_{-1}^1 x^2 \cdot 1 \, dx &= \frac{2}{3}, & \int_{-1}^1 x^2 \cdot x^2 \, dx &= \frac{2}{5}, \\ \int_{-1}^1 |x| \cdot 1 \, dx &= 1, & \int_{-1}^1 |x| \cdot x^2 \, dx &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Следовательно, искомая система для определения коэффициентов разложения есть

$$\begin{pmatrix} 2 & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Решив её, находим $b = \frac{3}{16} = 0.1875$, $a = \frac{15}{16} = 0.9375$.

Итак, наилучшее среднеквадратичное приближение требуемого вида к функции $f(x) = |x|$ на интервале $[-1, 1]$ есть

$$y = \frac{15}{16}x^2 + \frac{3}{16} = 0.9375x^2 + 0.1875.$$

■

Пример 1.10.3 Найти линейную функцию, которая обеспечивает наилучшее среднеквадратичное приближение (с единичным весом) к функции $f(x) = \sin x$ на интервале $[0, \frac{\pi}{2}]$.

Решение. Воспользуемся стандартным способом построения квадратичного приближения, изложенным в [7, 8, 22], взяв в пространстве линейных функций в качестве базиса функции $\varphi_1(x) = 1$ и $\varphi_2(x) = x$.

Находим взаимные скалярные произведения векторов базиса, а также их скалярные произведения с приближаемой функцией:

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int_0^{\pi/2} 1 \cdot 1 \, dx = \frac{\pi}{2}, \quad \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \int_0^{\pi/2} 1 \cdot x \, dx = \frac{\pi^2}{8},$$

$$\langle \varphi_2, \varphi_1 \rangle = \int_0^{\pi/2} x \cdot 1 \, dx = \frac{\pi^2}{8}, \quad \langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle = \int_0^{\pi/2} x \cdot x \, dx = \frac{\pi^3}{24},$$

$$\langle f(x), \varphi_1 \rangle = \int_0^{\pi/2} \sin x \cdot 1 \, dx = 1, \quad \langle f(x), \varphi_2 \rangle = \int_0^{\pi/2} \sin x \cdot x \, dx = 1.$$

Поэтому для определения коэффициентов разложения c_1, c_2 наилучшего приближения искомой функции $y = c_1 x + c_0$ по выбранному базису должна быть решена система линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\pi & \frac{1}{8}\pi^2 \\ \frac{1}{8}\pi^2 & \frac{1}{24}\pi^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Для решения системы умножим первое уравнение на $(-\pi/4)$ и сложим со вторым уравнением, получим

$$\left(\frac{1}{24} - \frac{1}{32}\right)\pi^3 c_2 = 1 - \frac{\pi}{4},$$

так что

$$c_2 = \frac{1 - \pi/4}{\frac{1}{96}\pi^3} = 24 \frac{4 - \pi}{\pi^3} \approx 0.66444.$$

После подстановки этого значения c_2 в первое уравнение получим

$$\frac{1}{2}\pi c_1 + \frac{1}{8}\pi^2 \cdot 24 \frac{4 - \pi}{\pi^3} = 1,$$

откуда

$$c_1 = 8 \frac{\pi - 3}{\pi^2} \approx 0.11477.$$

Итак, линейной функцией, наилучшим образом приближающей функцию $f(x) = \sin x$ на интервале $[0, \pi/2]$ в среднеквадратичном смысле, является

$$y = 24 \frac{4 - \pi}{\pi^3} x + 8 \frac{\pi - 3}{\pi^2} \approx 0.66444 x + 0.11477.$$

■

Пример 1.10.4 Построить алгебраический полином 2-й степени со старшим коэффициентом 3, который на интервале $[0, 4]$ наименее отклоняется от нуля в среднеквадратичном смысле (с единичным весом).

Решение. Это задача на знание свойств полиномов Лежандра и того факта, что они являются наименее отклоняющимися от нуля на интервале $[-1, 1]$ в среднеквадратичном смысле (с единичным весом) среди всех полиномов с заданным старшим коэффициентом (см. [2, 8, 22]).

Если нужно минимизировать среднеквадратичное отклонение от нуля на каком-то другом интервале $[a, b]$, отличном от $[-1, 1]$, то строим линейное преобразование из $[-1, 1]$ в $[a, b]$ и делаем в полиноме Лежандра замену переменных с помощью формул обратного преобразования. Почему это работает — также обосновывается на лекциях и в учебнике.

В данном случае интервал $[-1, 1]$ взаимно-однозначно переводится в интервал $[0, 4]$ с помощью отображения $y = 2 + 2x$, и обратное отображение задаётся формулой $x = \frac{1}{2}y - 1$. Полином Лежандра 2-й степени, который даёт формула Родрига (см. [4, 22]), выглядит как

$$\frac{1}{2}(3x^2 - 1) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}.$$

Можно взять просто $x^2 - \frac{1}{3}$, который получается при ортогонализации Грама-Шмидта последовательных степеней $1, x, x^2$. Как бы то ни было, после обратной замены переменной получаем полином

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}y - 1\right)^2 - \frac{1}{2} &= \frac{3}{2}\left(\frac{1}{4}y^2 - y + 1\right) - \frac{1}{2} \\ &= \frac{3}{8}y^2 - \frac{3}{2}y + 1. \end{aligned}$$

Окончательный результат получается после домножения этого полинома на 8, чтобы обеспечить требуемый задачей старший коэффициент:

$$3y^2 - 12y + 8.$$

■

Глава 2

Численное дифференцирование

Численным дифференцированием называется процесс нахождения значения производной от функции, который использует только значения этой функции в некотором наборе точек её области определения. К численному дифференцированию обращаются, когда приходится вычислять производные от функций, заданных таблично, или же когда непосредственное аналитическое дифференцирование выражений для функции затруднительно (например, выражение является слишком сложным). Фактически, численное дифференцирование дополняет известное из курса дифференциального исчисления аналитическое дифференцирование функций.

2.1 Интерполяционный подход

Одним из наиболее простых и практичных способов численного дифференцирования является *интерполяционный подход*. При его применении данную табличную функцию $f(x)$, заданную на интервале $[a, b]$, заменяют интерполирующей функцией, задаваемой простым выражением, а затем дифференцируют этот интерполянт. Полученное численное значение производной интерполянта можно считать приближением к производной исходной функции.

Чаще всего в качестве интерполирующей функции берут алгебраический интерполянт, т. е. некоторый полином $P(x)$, и затем полагают $f'(x) = P'(x)$ для $x \in [a, b]$.

Пусть на сетке $x_0, x_1, \dots, x_n$ с шагом $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$, заданы значения функции $f_0 = f(x_0), \dots, f_n = f(x_n)$. Необходимо получить формулу для приближённого вычисления первой производной по значениям функции в нескольких узлах.

Пример 2.1.1 На шаблоне $\{x_i, x_{i+1}\}$ с шагом $h_i = x_{i+1} - x_i$ заданы значения функции $f_{i+1} = f(x_{i+1})$, $f_i = f(x_i)$. Получить формулу для приближённого вычисления первой производной вида $f_x \approx \alpha f_i + \beta f_{i+1}$.

Решение. По двум узлам мы можем построить интерполяционный полином Лагранжа первой степени

$$\begin{aligned} P_1(x) &= \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} f_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} f_{i+1} = \\ &= \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} x - \frac{f_{i+1}x_i - f_i x_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}. \end{aligned}$$

Его производная равна

$$P'_1(x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} = -\frac{1}{h_i} f_i + \frac{1}{h_i} f_{i+1}.$$

Это значение можно взять за приближение к производной от рассматриваемой функции на интервале $]x_{i-1}, x_i[$, $i = 1, 2, \dots, n$, $f_x \approx \alpha f_i + \beta f_{i+1}$, где $\alpha = -\frac{1}{h_i}$, $\beta = \frac{1}{h_i}$. ■

2.2 Метод неопределённых коэффициентов

Другой подход к получению формул численного дифференцирования — *метод неопределённых коэффициентов*, особенно удобный в многомерном случае.

Зафиксируем некоторое натуральное число p и будем считать, что приближённая формула для вычисления производной от функции имеет вид линейной формы

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^p c_i f(x_i). \quad (2.1)$$

Он мотивируется, например, линейным характером операции дифференцирования. Идея метода неопределённых коэффициентов заключается в том, что мы требуем точного выполнения равенства (2.1) на

некотором наборе простейших функций. Это позволяет определить систему уравнений для коэффициентов c_i формулы (2.1) и затем решить её, восстановив всю формулу.

Чаще всего в качестве простейших пробных функций берут набор мономов $1, x, x^2, \dots, x^p$. Поочерёдно подставляя их в (2.1) и требуя выполнение точного равенства в формуле, получим систему линейных алгебраических уравнений для нахождения $c_i, i = 0, 1, \dots, p$.

Пример 2.2.1 На шаблоне $\{x_{i-1}, x_i\}$ с шагом $h_i = x_{i+1} - x_i$ заданы значения функции $f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $f_i = f(x_i)$. Получить формулу для приближённого вычисления первой производной вида

$$f_x \approx c_{i-1}f_{i-1} + c_i f_i$$

и оценить погрешность численного дифференцирования.

Решение. На этот раз построим формулу, используя метод неопределённых коэффициентов. По двум узлам мы можем построить интерполяционный полином первой степени, в котором используется два базисных монома $1, x$. Сначала в равенство (2.1) подставим $f(x) = 1$, тогда $f_x = 0, f_{i-1} = f_i = 1$, получим

$$0 = c_{i-1} \cdot 1 + c_i \cdot 1.$$

Во второй раз в (2.1) подставим $f(x) = x$, тогда $f_x = 1, f_{i-1} = x_{i-1}, f_i = x_i$, получим

$$1 = c_{i-1} \cdot x_{i-1} + c_i \cdot x_i.$$

Решение получившейся системы:

$$c_i = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} = \frac{1}{h_i}, \quad c_{i-1} = -\frac{1}{h_i},$$

а искомое выражение имеет вид

$$f_x \approx -\frac{1}{h_i} f_{i-1} + \frac{1}{h_i} f_i. \quad (2.2)$$

■

Оценим погрешность численного дифференцирования, предполагая необходимую гладкость функции и представляя её формулой Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа. Если функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема, то получим

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i) \cdot (-h_i) + \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot (-h_i)^2,$$

где ξ — некоторая точка из открытого интервала $]x_{i-1}, x_i[$.

Полученное выражение подставим в (2.2):

$$f'(x_i) = -\frac{1}{h_i} \left(f_i + f'(x_i) \cdot (-h_i) + \frac{f''(\xi)}{2!} \cdot (-h_i)^2 \right) + \frac{1}{h_i} f_i.$$

Правая и левая части последнего равенства отличаются на слагаемое $\frac{f''(\xi)}{2!} \cdot h$, следовательно, погрешность аппроксимации является величиной первого порядка относительно шага сетки.

Пример 2.2.2 Определить коэффициенты a , b и c в приближённом равенстве

$$f'(0) \approx \frac{1}{h} (af(0) + bf(-h) + cf(2h))$$

таким образом, чтобы из него получилась формула численного дифференцирования наиболее высокого порядка точности по h .

Решение. 1. Сначала построим решение методом неопределённых коэффициентов. По трём узлам мы можем построить интерполяционный полином второй степени, в котором используется три базисных монома $1, x, x^2$. Сначала в равенство (2.1) подставим $f(x) = 1$, тогда $f'(x) = 0$, $f'(0) = 0$, $f(0) = f(-h) = f(2h) = 1$, получим

$$0 = \frac{1}{h} (a + b + c) \cdot 1.$$

Во второй раз в равенство (2.1) подставим $f(x) = x$, тогда $f'(x) = 1$, $f'(0) = 1$, $f(0) = 0$, $f(-h) = -h$, $f(2h) = 2h$, получим

$$1 = \frac{1}{h} (b(-h) + c(2h)).$$

В третий раз в равенство (2.1) подставим $f(x) = x^2$, тогда $f'(x) = 2x$, $f'(0) = 0$, $f(0) = 0$, $f(-h) = h^2$, $f(2h) = 4h^2$, получим

$$0 = \frac{1}{h} (b(h^2) + c(4h^2)).$$

Решение получившейся системы:

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = -\frac{2}{3}, \quad c = \frac{1}{6}.$$

а искомая формула имеет вид

$$f'(0) \approx \frac{1}{h} \left(\frac{1}{2} f(0) - \frac{2}{3} f(-h) + \frac{1}{6} f(2h) \right).$$

2. Решим задачу, используя разложение функции по формуле Тейлора в окрестности $x = 0$ до производной второго порядка:

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} x + \frac{f''(0)}{2!} x^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!} x^3,$$

здесь остаток взят в форме Лагранжа. Для $x = -h$ и $x = 2h$ разложение по формуле Тейлора функции $f(x)$, соответственно, имеет вид:

$$f(-h) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} (-h) + \frac{f''(0)}{2!} (-h)^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!} (-h)^3,$$

$$f(2h) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} (2h) + \frac{f''(0)}{2!} (2h)^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!} (2h)^3,$$

где ξ — некоторая точка из открытого интервала $]0, x[$. Подставим выражения для $f(-h)$ и $f(2h)$ в заданную формулу для $f'(0)$, получим

$$\begin{aligned} f'(0) \approx \frac{1}{h} \left(af(0) + b \left(f(0) + \frac{f'(0)}{1!} (-h) + \frac{f''(0)}{2!} (-h)^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!} (-h)^3 \right) \right. \\ \left. + c \left(f(0) + \frac{f'(0)}{1!} (2h) + \frac{f''(0)}{2!} (2h)^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!} (2h)^3 \right) \right). \end{aligned}$$

Приведём подобные слагаемые, далее приравняем нулю слагаемые, которые не зависят от h^3 , получим

Ответ.

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = -\frac{2}{3}, \quad c = \frac{1}{6}.$$

■

Пример 2.2.3 ([21], с. 26) Найти коэффициенты формул численного дифференцирования максимальной степени точности

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2} (af(x-h) + bf(x) + cf(x+h)).$$

Решение. 1. Здесь для вычисления производной используется симметричный шаблон. Построим решение методом неопределённых коэффициентов. Для вычисления трёх неизвестных коэффициентов достаточно использовать три базисных монома $1, x, x^2$.

Сначала в равенство (2.1) подставим $f(x) = 1$, тогда $f''(x) = 0$, $f(x) = f(x-h) = f(x+h) = 1$, получим

$$0 = \frac{1}{h^2} (a + b + c) \cdot 1.$$

Во второй раз в равенство (2.1) подставим $f(x) = x$, тогда $f''(x) = 0$, $f(x) = x$, $f(x - h) = x - h$, $f(x + h) = x + h$, получим

$$0 = \frac{1}{h^2} (a(x - h) + bx + c(x + h)).$$

В третий раз в равенство (2.1) подставим $f(x) = x^2$, тогда $f''(x) = 2$, $f(x) = x^2$, $f(x - h) = (x - h)^2$, $f(x + h) = (x + h)^2$, получим

$$2 = \frac{1}{h^2} (a(x - h)^2 + bx^2 + c(x + h)^2).$$

Решение получившейся системы:

$$a = c = 1 \quad b = -2,$$

а искомая формула имеет вид

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2} (f(x - h) - 2f(x) + f(x + h)).$$

2. Решим задачу, используя разложение функции по формуле Тейлора в окрестности точки x до производной четвёртого порядка с остатком в форме Лагранжа:

$$f(x - h) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!} (-h) + \frac{f''(x)}{2!} (-h)^2 + \frac{f'''(x)}{3!} (-h)^3 + \frac{f^4(\xi)}{4!} (-h)^4,$$

$$f(x + h) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!} h + \frac{f''(x)}{2!} h^2 + \frac{f'''(x)}{3!} h^3 + \frac{f^4(\xi)}{4!} h^4,$$

где ξ — некоторая точка из открытого интервала $]x - h, x + h[$. Подставим выражения для $f(x - h)$ и $f(x + h)$ в заданную формулу для $f''(x)$, получим

$$\begin{aligned} f''(x) \approx \frac{1}{h^2} & \left[a \left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!} (-h) + \frac{f''(x)}{2!} (-h)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{f'''(x)}{3!} (-h)^3 + \frac{f^4(\xi)}{4!} (-h)^4 \right) + bf(x) + \right. \\ & \left. c \left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!} h + \frac{f''(x)}{2!} h^2 + \frac{f'''(x)}{3!} h^3 + \frac{f^4(\xi)}{4!} h^4 \right) \right]. \end{aligned}$$

Приведём подобные слагаемые

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2} \left(f(x)(a+b+c) + \frac{f'(x)}{1!}(-h)(a-c) + \right. \\ \left. + \frac{f''(x)}{2!}(-h)^2(a+c) + \frac{f'''(x)}{3!}(-h)^3(a-c) + \frac{f^4(\xi)}{4!}h^4(a+c) \right).$$

Приравнявая коэффициенты при $f(x)$, $f'(x)$ и $f''(x)$ в правой и левой частях равенства, получим

$$a = c = 1, \quad b = -2.$$

В результате можно заключить, что точное значение производной, стоящее в правой части равенства, отличается от значения производной, которое вычислено по аппроксимационной формуле, на величину $O(h^2)$

$$f''(x) \approx f''(x) + O(h^2).$$

Замечание. В этом примере мы использовали разложение функции по формуле Тейлора до производной четвёртого порядка, так как коэффициент при третьей производной занулился.

Ответ.

$$a = c = 1 \quad b = -2.$$



Глава 3

Численное интегрирование

Задачей *численного интегрирования* называют задачу нахождения определённого интеграла $\int_a^b f(x) dx$ на основе знания значений функции $f(x)$, без привлечения её первообразных и формулы Ньютона-Лейбница

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a). \quad (3.1)$$

Задача численного интегрирования возникает в случае, когда подинтегральная функция $f(x)$ задана таблично, или когда первообразная для интегрируемой функции не выражается через известные функции, элементарные или даже специальные функции.

3.1 Основные понятия

Для нахождения интегралов наибольшее распространение в вычислительной практике получили формулы вида

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n c_k f(x_k), \quad (3.2)$$

где c_k — некоторые постоянные коэффициенты, x_k — точки из интервала интегрирования $[a, b]$, $k = 0, 1, \dots, n$. Такие формулы называются *квадратурными формулами*, их коэффициенты c_k — это *весовые коэффициенты*, или просто *веса* квадратурной формулы, а точки x_k — её *узлы*.

Как и ранее, совокупность узлов $x_0, x_1, \dots, x_n$ квадратурной формулы называют *сеткой*. Разность

$$R(f) = \int_a^b f(x) \, dx - \sum_{k=0}^n c_k f(x_k)$$

называется *погрешностью квадратурной формулы* или её *остаточным членом*. Это число, зависящее от подинтегральной функции f , в отличие от остаточного члена интерполяции, который является ещё и функцией точки.

Если для некоторой функции f имеет место точное равенство

$$\int_a^b f(x) \, dx = \sum_{k=0}^n c_k f(x_k),$$

то будем говорить, что квадратурная формула *точна* (является точной) на f .

Пример 3.1.1 Построить квадратурную формулу вида

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx c_1 f(a) + c_2 f(\xi),$$

где ξ — заданная точка из интервала $a < \xi \leq b$, точную для многочленов максимально высокой степени.

Решение. По двум точкам (a и ξ) можно построить полином первой степени $P(x) = Ax + B$, для которого базисными мономы являются 1 и x .

Воспользуемся методом неопределённых коэффициентов.

1) Сначала возьмём в качестве функции $f(x)$ моном, равный 1. Для него выражение (3.2) принимает вид

$$\int_a^b 1 \cdot dx = c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 1,$$

отсюда

$$b - a = c_1 + c_2, \quad \text{и} \quad c_2 = b - a - c_1.$$

2) Возьмём в качестве функции $f(x)$ моном, равный x . Для него выражение (3.2) принимает вид

$$\int_a^b x \, dx = c_1 \cdot a + c_2 \cdot \xi.$$

Отсюда

$$\frac{1}{2}(b^2 - a^2) = c_1 \cdot a + c_2 \cdot \xi.$$

В итоге получим

$$c_1 = \frac{(b-a)(b+a-2\xi)}{2(a-\xi)}, \quad c_2 = \frac{(b-a)^2}{2(\xi-a)}$$

и искомая формула примет вид

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)(b+a-2\xi)}{2(a-\xi)} f(a) + \frac{(b-a)^2}{2(\xi-a)} f(\xi).$$

■

Пример 3.1.2 Построить квадратурную формулу вида

$$\int_a^b f(x) dx \approx c_1 f(a) + c_2 f'(\beta), \quad (3.3)$$

где β — неизвестная точка из интервала $a < \beta \leq b$, точную для многочленов максимально высокой степени.

Решение. В искомой квадратурной формуле имеются три неизвестные величины — c_1 , c_2 и β , поэтому интерполяционный полином для подынтегральной функции является полиномом второй степени вида $P(x) = Ax^2 + Bx + C$. Для него базисными мономами являются 1, x и x^2 . Потребуем, чтобы формула (3.3) была точна на этих мономах. Методом неопределённых коэффициентов найдём эти неизвестные величины.

1) Пусть $f(x) = 1$, тогда $f'(x) = 0$. Соответственно, точное равенство в (3.3) принимает вид

$$\int_a^b 1 \cdot dx = c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 0.$$

Отсюда $b - a = c_1$.

2) Для $f(x) = x$ производная $f'(x) = 1$, так что требование равенства в соотношении (3.3) влечёт

$$\int_a^b x dx = c_1 \cdot a + c_2.$$

Отсюда $\frac{1}{2}(b-a)^2 = c_2$.

3) Для $f(x) = x^2$ производная $f'(x) = 2x$, и требование равенства в соотношении (3.3) влечёт условие

$$\int_a^b x^2 dx = c_1 \cdot a + 2 c_2 \beta.$$

Отсюда

$$\beta = \frac{1}{3} \frac{b^2 + ab - a^2}{b - a}.$$

Искомая квадратурная формула получает вид

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b - a) f(a) + \frac{1}{2}(b - a)^2 f' \left(\frac{1}{3} \frac{b^2 + ab - a^2}{b - a} \right).$$

В частности, при $a = 0$ и $b = 2$, т. е. на интервале интегрирования $[0, 2]$ квадратурная формула будет выглядеть следующим образом:

$$\int_0^2 f(x) dx \approx 2 f(a) + 2 f' \left(\frac{b}{3} \right).$$

■

3.2 Интерполяционные квадратурные формулы

Интерполяционными квадратурными формулами называются квадратурные формулы, которые получаются в результате замены интегрируемой функции алгебраическим интерполантом, который построен по узлам этой формулы.

Пример 3.2.1 Рассматривается задача численного нахождения интеграла

$$\int_{-a}^a \varrho(x) f(x) dx,$$

где $\varrho(x)$ — некоторая весовая функция, положительная на $[-a, a]$. Для её решения применяется интерполяционная квадратурная формула с симметричным относительно нуля расположением узлов. Показать, что весовые коэффициенты квадратуры, соответствующие симметричным узлам, равны друг другу.

Решение. Формулировка задачи не вполне корректна и должна быть дополнена условием на весовую функцию $\varrho(x)$. Если она не является

«симметричной» относительно нуля, как узлы рассматриваемой квадратуры, т. е. не является *чётной*, то весовые коэффициенты формулы, соответствующие симметричным относительно нуля узлам, легко могут быть сделаны неравными. Такой пример нетрудно построить.

Если дополнительно привлечь предположение, что весовая функция — чётная, т. е. что $\varrho(x) = \varrho(-x)$, то утверждение задачи в самом деле верно, и его доказательство таково.

Интерполяционная квадратурная формула — это, по определению, квадратурная формула, полученная в результате замены интегрируемой функции интерполяционным алгебраическим полиномом, который построен по узлам формулы. Пусть $L_n(x)$ — интерполяционный полином в форме Лагранжа, построенный на интервале $[-a, a]$ для функции $f(x)$ по узлам $x_0, x_1, \dots, x_n$, которые симметричны относительно нуля:

$$\begin{aligned} L_n(x) &= \sum_{i=0}^n f(x_i) \frac{(x-x_1) \cdots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \cdots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \cdots (x_i-x_n)} = \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_i) \phi_i(x), \end{aligned}$$

где

$$\phi_i(x) = \frac{(x-x_0) \cdots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \cdots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \cdots (x_i-x_n)},$$

— базисные интерполяционные полиномы Лагранжа. В нашей квадратурной формуле точное значение интеграла

$$\int_{-a}^a \varrho(x) f(x) dx,$$

заменяется на

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a \varrho(x) L_n(x) dx &= \int_{-a}^a \varrho(x) \sum_{i=0}^n f(x_i) \phi_i(x) dx = \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_{-a}^a \varrho(x) \phi_i(x) dx. \end{aligned}$$

Как следствие, весовые коэффициенты c_i интерполяционной квадратурной формулы получаются как интегралы

$$c_i = \int_{-a}^a \varrho(x) \phi_i(x) dx, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

и мы рассмотрим их подробнее. Для этого воспользуемся альтернативным представлением для базисных интерполяционных полиномов Лагранжа в виде (см. [22])

$$\phi_i(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i) \omega'_n(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

где

$$\omega_n(x) = (x - x_0)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

— произведение линейных множителей, отвечающих всем узлам интерполяции.

Если узлы x_i расположены симметрично относительно нуля, то в зависимости от того, чётно или нечётно их общее количество $n + 1$, возможны различные ситуации. При нечётном $n + 1$ один узел (со «средним» номером) обязательно должен быть нулевым. Остальные узлы разбиваются на пары с противоположными значениями, т. е. x_ν и $-x_\nu$. Если $n + 1$ чётно, то среднего нулевого узла нет, и таким парным образом можно сгруппировать вообще все узлы. В выражении для $\omega_n(x)$ симметричные относительно нуля узлы, группирующиеся парами, образуют множители

$$(x - x_\nu)(x + x_\nu) = x^2 - x_\nu^2.$$

При чётном $n + 1$ всё выражение для $\omega_n(x)$ может быть исчерпано такими парными множителями и кроме них ничего нет, а при нечётном $n + 1$ к ним добавляется множитель x , соответствующий нулевому узлу. Как следствие,

$\omega_n(x)$ является чётной функцией от x при чётных $n + 1$,

$\omega_n(x)$ является нечётной функцией от x при нечётных $n + 1$.

Далее, производная чётной функции есть функция нечётная, а нечётной функции — чётная. Таковы свойства $\omega'_n(x)$.

Теперь рассмотрим выражения для весовых коэффициентов

$$c_i = \int_{-a}^a \varrho(x) \phi_i(x) dx = \int_{-a}^a \varrho(x) \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i) \omega'_n(x_i)} dx$$

$i = 0, 1, \dots, n$. Если сделать в интеграле замену переменных $x = -y$, то

$dx = -dy$, и будем иметь

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a \varrho(x) \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i) \omega'_n(x_i)} dx &= - \int_a^{-a} \varrho(-y) \frac{\omega_n(-y)}{(-y - x_i) \omega'_n(x_i)} dy = \\ &= \int_{-a}^a \varrho(y) \frac{\omega_n(-y)}{(y - (-x_i)) (-\omega'_n(x_i))} dy \end{aligned}$$

в силу чётности весовой функции ϱ . Кроме того,

$$\frac{\omega_n(-y)}{-\omega'_n(x_i)} = \frac{\omega_n(y)}{\omega'_n(-x_i)},$$

что вытекает из отмеченных выше свойств функции $\omega_n(x)$ и её производной. Если $n+1$ чётно, то сама $\omega_n(x)$ чётна и её производная нечётна, а если $n+1$ нечётно, то всё наоборот. Но при любом раскладе выписанное равенство верно, и из него следует, что

$$\int_{-a}^a \varrho(x) \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i) \omega'_n(x_i)} dx = \int_{-a}^a \varrho(y) \frac{\omega_n(y)}{(y - (-x_i)) \omega'_n(-x_i)} dy.$$

Последний интеграл — это весовой коэффициент, соответствующий симметричному относительно нуля узлу $(-x_i)$. Получается, что он равен весовому коэффициенту для x_i , что и означает доказываемое. ■

3.3 Квадратурные формулы Гаусса

Рассмотрим вопрос о приближённом вычислении интеграла

$$\int_a^b \varrho(x) f(x) dx,$$

где $[a, b]$ — конечный или бесконечный интервал числовой оси, $f(x)$ — функция некоторого класса, $\varrho(x)$ — некоторая фиксированная положительная функция, которую называют весовой функцией. Как и ранее, приближённое значение интеграла будем искать в виде квадратурной формулы, определяемой узлами x_k и коэффициентами c_k ,

$$\int_a^b \varrho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n c_k f(x_k). \quad (3.4)$$

В этом параграфе мы будем заниматься так называемыми квадратурными формулами Гаусса, в которых удобно нумеровать узлы с $k = 1$, а не с нуля, как было ранее. Напомним, что разность

$$R_n(f) = \int_a^b \varrho(x) f(x) dx - \sum_{k=1}^n c_k f(x_k)$$

называют остаточным членом, или остатком квадратурной формулы.

При фиксированном n квадратурная формула (3.4) содержит $2n$ параметров: n узлов x_k , n коэффициентов c_k . Коэффициенты и узлы подбирают так, чтобы приближённое равенство (3.4) было точным для многочленов наивысшей возможной степени. Множно показать, что она равна $N = 2n - 1$.

Задачу нахождения параметров квадратурной формулы обычно разбивают на отдельные подзадачи

- 1) построения узлов формулы и
- 2) вычисления её весовых коэффициентов.

Подробное изложение теории квадратурных формул Гаусса можно найти, например, в учебниках [2, 4, 13, 22], и следующие из неё выводы формулируются следующим образом:

- 1) Узлы являются корнями полинома $\omega(x) = (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$, который должен удовлетворять условиям

$$\int_a^b \varrho(x) \omega(x) x^s dx = 0, \quad s = 0, 1, \dots, n - 1.$$

- 2) Весовые коэффициенты формулы находят из системы уравнений

$$\begin{cases} \int_a^b \varrho(x) x^s dx = \sum_{k=1}^n c_k x_k^s, \\ s = 0, \dots, n - 1, \end{cases}$$

либо методом неопределённых коэффициентов.

Перейдём к построению квадратурных формул Гаусса. При небольших n и простых весовых функциях $\varrho(x)$ выписанная выше система уравнений для узлов и весов может быть решена с помощью несложных аналитических преобразований.

Пример 3.3.1 Построить квадратурную формулу Гаусса с одним узлом для вычисления интеграла вида

$$\int_a^b f(x) dx \approx c_1 f(x_1).$$

Решение. Здесь весовая функция $\varrho(x) = 1$, один узел, $n = 1$, $\omega(x) = (x - x_1)$. Сначала из уравнения $\int_a^b \omega(x) x^s dx = 0$ при $s = 0$ найдём $x_1 = \frac{a+b}{2}$. Затем из уравнения $\int_a^b x^0 dx = c_1 \cdot 1$ найдём $c_1 = b - a$.

Ответ:
$$\int_a^b f(x) dx \approx (b - a) \cdot f\left(\frac{a + b}{2}\right). \quad \blacksquare$$

Пример 3.3.2 Построить квадратурную формулу Гаусса с двумя узлами для вычисления интеграла вида

$$\int_a^b f(x) dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2).$$

Решение. Здесь весовая функция $\varrho(x) = 1$, имеются два узла, $n = 2$, $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)$. Величины x_1 и x_2 можно найти из системы

$$\begin{cases} \int_a^b (x - x_1)(x - x_2) dx = 0, \\ \int_a^b (x - x_1)(x - x_2)x dx = 0. \end{cases}$$

Воспользуемся тем фактом, что для интервала интегрирования $[-1, 1]$ в случае, когда $\varrho(x) = 1$, параметры x_k в выражении (3.4) являются корнями полинома Лежандра n -й степени. Выполнив замену

$$x_k = \frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2} y_k, \quad y \in [-1, 1],$$

и приравняв нулю полином Лежандра 2-й степени

$$L_2(y) = \frac{1}{2}(3y^2 - 1),$$

найдем корни $y_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $y_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Тогда, соответственно,

$$x_1 = \frac{a + b}{2} - \frac{b - a}{2\sqrt{3}}, \quad x_2 = \frac{a + b}{2} + \frac{b - a}{2\sqrt{3}}.$$

Коэффициенты c_1 и c_2 найдём стандартным образом из системы уравнений

$$\begin{cases} \int_a^b x^0 dx = c_1 + c_2, \\ \int_a^b x dx = c_1 x_1 + c_2 x_2. \end{cases}$$

Отсюда получим $c_1 = c_2 = \frac{b-a}{2}$.

Ответ: $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} (f(x_1) + f(x_2)).$ ■

Пример 3.3.3 Доказать, что для любого интервала интегрирования узлы квадратурных формул Гаусса расположены симметрично относительно его середины. Соответственно, при нечётном количестве узлов средний по номеру узел совпадает с серединой интервала интегрирования.

Решение. Узлы квадратурной формулы Гаусса на интервале $[-1, 1]$ — это, как известно, корни полиномов Лежандра. Поэтому решение задачи следует из свойств корней полиномов Лежандра на $[-1, 1]$ и того факта, что для произвольного интервала интегрирования $[a, b]$ узлы формул Гаусса получаются из корней полиномов Лежандра линейным преобразованием с канонического интервала $[-1, 1]$. Точку 0 оно переводит в середину интервала $[a, b]$, а симметричные относительно нуля точки — в точки, симметричные относительно середины этого интервала. ■

Перейдём к построению квадратурных формул Гаусса при наличии нетривиальной весовой функции $\varrho(x)$. В этом случае узлы x_k в выражении (3.4) уже не будут являться корнями полинома Лежандра n -й степени, и вычислять их следует, пользуясь ортогональностью $\omega(x)$ и x^s , $s = 0, \dots, n-1$, в весовом пространстве.

Пример 3.3.4 Построить квадратурную формулу Гаусса с одним узлом для вычисления интеграла вида

$$\int_a^b x f(x) dx \approx c_1 f(x_1).$$

Решение. Здесь весовая функция $\varrho(x) = x$, задан один узел, $n = 1$, $\omega(x) = (x - x_1)$. Параметр x_1 найдём из равенства

$$\int_a^b x \omega(x) x^s dx = \left(\frac{x^3}{3} - x_1 \frac{x^2}{2} \right) \Big|_a^b = 0,$$

которое влечёт

$$x_1 = \frac{2b^3 - a^3}{3b^2 - a^2}.$$

Параметр c_1 найдём, используя метод неопределённых коэффициентов

$$\int_a^b x \cdot x^0 dx = c_1 \cdot 1, \Rightarrow c_1 = \frac{1}{2}(b^2 - a^2).$$

В результате получим:

$$\int_a^b x f(x) dx = c_1 f(x_1) = \frac{1}{2} \cdot (b^2 - a^2) f\left(\frac{2b^3 - a^3}{3b^2 - a^2}\right).$$

Если положить $a = 0$, а $b = 1$, то получим

$$\int_0^1 x f(x) dx \approx \frac{1}{2} f\left(\frac{2}{3}\right).$$

■

Пример 3.3.5 Построить квадратурную формулу Гаусса для вычисления интеграла вида

$$\int_a^b x f(x) dx \approx c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2).$$

Решение. Здесь весовая функция $\varrho(x) = x$, имеются два узла, $n = 2$, $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)$. Параметры x_1, x_2 найдём из равенств

$$\begin{cases} \int_a^b x(x - x_1)(x - x_2) \cdot 1 dx = 0, \\ \int_a^b x(x - x_1)(x - x_2) \cdot x dx = 0. \end{cases}$$

Выполняя интегрирование, получим равенства

$$\frac{b^4 - a^4}{4} - (x_1 + x_2) \frac{(b^3 - a^3)}{3} + x_1 x_2 \frac{(b^2 - a^2)}{2} = 0,$$

$$\frac{b^5 - a^5}{5} - (x_1 + x_2) \frac{(b^4 - a^4)}{4} + x_1 x_2 \frac{(b^3 - a^3)}{3} = 0.$$

Весовые коэффициенты c_1 и c_2 найдём, используя метод неопределённых коэффициентов:

$$\begin{cases} \int_a^b x \cdot x^0 dx = c_1 + c_2, \\ \int_a^b x \cdot x dx = c_1 x_1 + c_2 x_2. \end{cases}$$

Выполняя интегрирование, получим равенства

$$\frac{b^2 - a^2}{2} = c_1 + c_2, \quad \frac{b^3 - a^3}{3} = c_1 x_1 + c_2 x_2.$$

Положим $a = 0$, $b = 1$, тогда будем иметь

$$x_1 = \frac{6 - \sqrt{6}}{10}, \quad x_2 = \frac{6 + \sqrt{6}}{10}, \quad c_1 = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{6}}{36}, \quad c_2 = \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{6}}{36}.$$

Соответствующая квадратурная формула принимает вид:

$$\int_0^1 x f(x) dx \approx \left(\frac{9 - \sqrt{6}}{36} \right) f \left(\frac{6 - \sqrt{6}}{10} \right) + \left(\frac{9 + \sqrt{6}}{36} \right) f \left(\frac{6 + \sqrt{6}}{10} \right).$$

Положим $a = -h$, $b = h$, $h > 0$, тогда будем иметь

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}} h, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}} h, \quad c_1 = -\frac{\sqrt{15}}{9} h^2, \quad c_2 = \frac{\sqrt{15}}{9} h^2.$$

Соответствующая квадратурная формула принимает вид:

$$\int_{-h}^h x f(x) dx \approx -\frac{\sqrt{15}}{9} h^2 \left(f \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} h \right) - f \left(\sqrt{\frac{3}{5}} h \right) \right).$$

■

Пример 3.3.6 Построить квадратурную формулу Гаусса с двумя узлами для вычисления интегралов

$$\int_0^1 \varrho(x) f(x) dx$$

с весовой функцией $\varrho(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right)^2$.

Ответ.

$$\int_0^\pi \varrho(x) f(x) dx \approx \frac{1}{24} \left(f \left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{3}{20}} \right) + f \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{3}{20}} \right) \right).$$

■

Пример 3.3.7 Построить квадратурную формулу Гаусса с двумя узлами для вычисления интегралов

$$\int_0^\pi \varrho(x) f(x) dx$$

с весовой функцией $\varrho(x) = \sin x$.

Ответ.

$$\int_0^\pi \sin x \cdot f(x) \, dx \approx f\left(\frac{\pi - \sqrt{\pi^2 - 8}}{2}\right) + f\left(\frac{\pi + \sqrt{\pi^2 - 8}}{2}\right).$$

■

3.4 Составные квадратурные формулы

Если в интеграле (3.1) ширина интервала интегрирования $(b-a)$ относительно велика или интегрируемая функция имеет большие производные, то погрешность вычисления интеграла становится значительной и неприемлемой для практики. Тогда для получения требуемой точности вычисления интеграла применяют *составные квадратурные формулы*, основанные на разбиении интервала интегрирования на подинтервалы меньшей ширины.

Предположим для простоты, что r_i , $i = 0, 1, \dots, N-1$, — точки разбиения интервала $[a, b]$ — расположены на нём равномерно, так что все подинтервалы $[r_i, r_{i+1}]$ имеют одинаковую ширину $h = (b-a)/N$, $a = r_0$, $b = r_N$. Тогда в силу аддитивности интеграла

$$\int_a^b f(x) \, dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{r_i}^{r_{i+1}} f(x) \, dx.$$

Покажем, что погрешность такого способа вычисления интеграла существенно меньше, чем в результате применения квадратурной формулы ко всему интервалу $[a, b]$.

При интегрировании по каждому из подинтервалов $[r_i, r_{i+1}]$

$$|R(f)| \leq K_{[r_i, r_{i+1}]} \left(\frac{b-a}{N}\right)^p = K_{[r_i, r_{i+1}]} h^p,$$

а полную погрешность интегрирования $\tilde{R}(f)$ можно оценить сверху

суммой погрешностей отдельных слагаемых. Поэтому

$$\begin{aligned}
 |\tilde{R}(f)| &\leq \sum_{i=0}^{N-1} K_{[r_i, r_{i+1}]} \left(\frac{b-a}{N} \right)^p \leq \sum_{i=0}^{N-1} K_{[a, b]} \left(\frac{b-a}{N} \right)^p = \\
 &= N K_{[a, b]} \left(\frac{b-a}{N} \right)^p = \frac{K_{[a, b]} (b-a)^p}{N^{p-1}} = \\
 &= K_{[a, b]} (b-a) h^{p-1}.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Число $(p-1)$ является *порядком точности* составной квадратурной формулы, построенной на основе элементарной квадратуры порядка точности p с помощью равномерного разбиения интервала интегрирования.

Выпишем явный вид составных квадратурных формул для простейших квадратур Ньютона-Котеса при равномерном разбиении интервала интегрирования.

Составная формула средних прямоугольников

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{i=1}^N f(r_{i-1/2}),$$

где $r_{i-1/2} = r_i - h/2$. Её полная погрешность

$$|\tilde{R}(f)| \leq M_2 \frac{(b-a)h^2}{24},$$

т. е. она имеет второй порядок точности. Эта формула, как нетрудно видеть, совпадает с интегральной суммой Римана для интеграла от $f(x)$ по интервалу $[a, b]$.

Составная формула трапеций

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} f(r_i) + \frac{1}{2} f(b) \right).$$

Её полная погрешность

$$|\tilde{R}(f)| \leq M_2 \frac{(b-a)h^2}{12},$$

т. е. порядок точности тоже второй.

В квадратурной формуле Симпсона (формуле парабол) интервал интегрирования, фактически, делится средним узлом на два подинтервала равной ширины. Поэтому чтобы выписать составную формулу Симпсона, удобно предполагать, что на всём интервале интегрирования $[a, b]$ задана равномерная сетка с нечётным числом узлов:

$$x_0, x_1, \dots, x_{2N}, \quad \text{где } x_0 = a \text{ и } x_{2N} = b.$$

Тогда элементарные формулы Симпсона строятся на подинтервалах вида $[x_{2i-2}, x_{2i}]$, $i = 1, 2, \dots, N$, а соответствующая составная формула формально может быть выписана в следующем виде:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{6} \sum_{i=1}^N (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})).$$

Но правую часть лучше преобразовать для получения более экономного выражения, в котором подинтегральная функция не вычисляется дважды в стыковочных узлах. Имеем

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})) \\ &= (f(a) + 4f(x_1) + f(x_2) + f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4) + \dots) \\ &= (f(a) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots) + 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots) + f(b)). \end{aligned}$$

Итак, *составная формула Симпсона* (составная формула парабол) имеет следующий вид

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{6} & \left(f(a) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{2N-1})) \right. \\ & \left. + 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{2N-2})) + f(b) \right). \end{aligned}$$

Её полная погрешность

$$|\tilde{R}(f)| \leq M_4 \frac{(b-a)h^4}{2880},$$

т. е. формула имеет четвёртый порядок точности.

Пример 3.4.1 Оценить погрешность численного нахождения интеграла

$$\int_0^2 \frac{\sin t}{t} dt$$

по составной квадратурной формуле трапеций при равномерном разбиении интервала интегрирования на 10 частей.

Для справки. Если рассматривать выписанный интеграл с переменным верхним пределом x вместо 2, то он задаёт известную специальную функцию, которая называется *интегральный синус* и обозначается $\text{Si } x$. Она применяется в теории автоматического управления, теории информации и других научных дисциплинах.

Решение. Оценка погрешности $\tilde{R}(f)$ для составной квадратурной формулы трапеций, использующей равномерное разбиение интервала интегрирования $[a, b]$ на подинтервалы ширины h и применённой к дважды непрерывно дифференцируемой функции f , имеет, как известно, вид [4, 22]

$$\tilde{R}(f) \leq \frac{M_2(b-a)h^2}{12},$$

где $M_2 = \max_{\xi \in [a, b]} |f''(\xi)|$. Оценим этот максимум модуля второй производной для нашей подинтегральной функции.

Имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\sin t}{t}\right)' &= \frac{(\sin t)'t - \sin t \cdot t'}{t^2} = \frac{t \cos t - \sin t}{t^2}, \\ \left(\frac{\sin t}{t}\right)'' &= \left(\frac{t \cos t - \sin t}{t^2}\right)' = \frac{(t \cos t - \sin t)'t^2 - (t \cos t - \sin t)(t^2)'}{(t^2)^2} = \\ &= \frac{(\cos t - t \sin t - \cos t)t^2 - 2t(t \cos t - \sin t)}{t^4} = \\ &= \frac{-t^2 \sin t - 2t \cos t + 2 \sin t}{t^3}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

В нуле значение этого выражения имеет неопределённость вида $\frac{0}{0}$, для

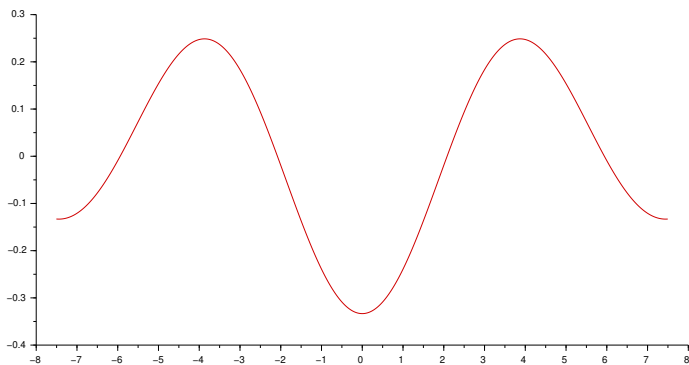


Рис. 3.1: График второй производной функции $f(t) = \frac{\sin t}{t}$.

разрешения которой можно применить, к примеру, правило Лопиталя:

$$\begin{aligned}
 \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{\sin t}{t} \right)'' &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{-t^2 \sin t - 2t \cos t + 2 \sin t}{t^3} \right) = \\
 &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{(-t^2 \sin t - 2t \cos t + 2 \sin t)'}{(t^3)'} = \\
 &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{-2t \sin t - t^2 \cos t - 2 \cos t + 2t \sin t + 2 \cos t}{3t^2} = \\
 &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{-t^2 \cos t}{3t^2} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{-\cos t}{3} = -\frac{1}{3}.
 \end{aligned}$$

График второй производной подынтегральной функции изображён на Рис. 3.1.

Оценивание области значений выражения (3.6) на интервале $[0, 2]$ можно выполнять разными способами. Можно основать это оценивание, к примеру, на предварительном преобразовании

$$\frac{-t^2 \sin t - 2t \cos t + 2 \sin t}{t^3} = -\frac{\sin t}{t} - 2 \frac{t \cos t - \sin t}{t^3},$$

и затем найти отдельно оценки областей значений слагаемых.

Воспользуемся неравенствами

$$t - \frac{t^3}{3!} \leq \sin t \leq t, \quad t \geq 0,$$

$$1 - \frac{t^2}{2!} \leq \cos t \leq 1.$$

Они вытекают, например, из известных разложений синуса и косинуса в знакопеременные абсолютно сходящиеся ряды, к которым применима теорема Лейбница. Мы эти разложения «обрубаем» на каких-то частичных суммах, но результат этой операции вполне предсказуем и позволяет дать двусторонние оценки для сумм рядов, т. е. для синуса и косинуса. Известно (см., к примеру учебник Фихтенгольца [19]), что остаток ряда такого типа имеет знак первого члена остатка и меньше его по абсолютной величине.

Тогда из неравенства для синуса вытекает, что

$$1 - \frac{t^2}{6} \leq \frac{\sin t}{t} \leq 1. \quad (3.7)$$

Кроме того, из неравенств для синуса и косинуса вытекает, что

$$\begin{aligned} t - \frac{t^3}{2} &\leq t \cos t \leq t, \\ -t &\leq -\sin t \leq -t + \frac{t^3}{6}, \quad t \geq 0. \end{aligned}$$

Складывая два выписанных неравенства, получим

$$-\frac{t^3}{2} \leq t \cos t - \sin t \leq \frac{t^3}{6}, \quad (3.8)$$

и, как следствие,

$$-\frac{1}{2} \leq \frac{t \cos t - \sin t}{t^3} \leq \frac{1}{6}. \quad (3.9)$$

Как побочное замечание, отметим существование первой производной у нашей подинтегральной функции. Из неравенства (3.8) следует

$$-\frac{t}{2} \leq \left(\frac{\sin t}{t} \right)' = \frac{t \cos t - \sin t}{t^2} \leq \frac{t}{6},$$

т. е. вблизи точки $t = 0$ первая производная функции $f(t) = \frac{\sin t}{t}$ ограничена и стремится к нулю при $t \rightarrow 0$. Собственно, она и равна нулю

при $t = 0$:

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (f(t) - f(0)) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(\frac{\sin t}{t} - 1 \right) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t^2} (\sin t - t) = \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t^2} \left(\left(t - \frac{t^3}{3!} + \frac{t^5}{5!} - \dots \right) - t \right) = \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(-\frac{t}{3!} + \frac{t^3}{5!} - \dots \right) = 0.\end{aligned}$$

Но перейдём к оцениванию различных членов в выражении (3.6). Для интервала $[0, 2]$ из неравенства (3.7) вытекает оценка

$$\left| \frac{\sin t}{t} \right| \leq 1,$$

а из неравенства (3.9) вытекает оценка

$$\left| \frac{t \cos t - \sin t}{t^3} \right| \leq \frac{1}{2}.$$

В целом получаем

$$\begin{aligned}\left| \frac{-t^2 \sin t - 2t \cos t + 2 \sin t}{t^3} \right| &= \left| -\frac{\sin t}{t} - 2 \frac{t \cos t - \sin t}{t^3} \right| = \\ &\leq \left| \frac{\sin t}{t} \right| + 2 \left| \frac{t \cos t - \sin t}{t^3} \right| = \\ &\leq 1 + 2 \cdot \frac{1}{2} = 2,\end{aligned}$$

так что можно взять $M_2 = 2$. Оценка не самая точная, как показывает график второй производной от $\frac{\sin t}{t}$ (см. Рис. 3.1), но и не слишком грубая. В принципе, неравенство (3.7) и удвоенное (3.9) можно было бы почленно сложить и получить более тонкую оценку, но и выведенная вполне пригодна.

Так или иначе, оценкой погрешности численного нахождения нашего интеграла можно взять

$$|\bar{R}(f)| \leq \frac{2 \cdot 2 \cdot 0.2^2}{12} = \frac{4}{300} \approx 0.0133.$$

■

Пример 3.4.2 Для вычисления значений функции

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

применяется численное интегрирование по составной формуле средних прямоугольников с равномерным разбиением интервала интегрирования. Оцените количество подинтервалов, на которые требуется разбить исходный интервал интегрирования, чтобы погрешность вычисления $\operatorname{erf} 3$ не превышала 10^{-4} .

Для справки. Функция erf — известная неэлементарная функция, имеющая также «функцией ошибок» (error function), описывает плотность нормального гауссовского распределения вероятностей, которое играет важнейшую роль в обработке наблюдений и измерений.

Решение. Оценка погрешности $\tilde{R}(f)$ для составной квадратурной формулы средних прямоугольников, использующей равномерное разбиение интервала интегрирования $[a, b]$ на подинтервалы ширины h и применённой к дважды непрерывно дифференцируемой функции f имеет, как известно, вид

$$\tilde{R}(f) \leq \frac{M_2(b-a)h^2}{24},$$

где $M_2 = \max_{\xi \in [a, b]} |f''(\xi)|$ (см. [2, 15, 22] и др.). Решение задачи будет получено, если мы оценим этот максимум модуля второй производной для нашей подинтегральной функции. Подинтегральная функция $f(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2}$ относительно просто дифференцируется:

$$f'(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2} \cdot (-2t) = -\frac{4t}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2},$$

$$f''(t) = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2} - \frac{4t}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2} \cdot (-2t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-2 + 4t^2) e^{-t^2},$$

$$f'''(t) = \frac{16t}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-2 + 4t^2) e^{-t^2} \cdot (-2t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (12t - 8t^3) e^{-t^2}.$$

И так далее.

Для нахождения экстремумов второй производной приравняем нулю третью производную функции. Равенство

$$f'''(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (12t - 8t^3) e^{-t^2} = 0$$

ЭКВИВАЛЕНТНО

$$12t - 8t^3 = 0,$$

так что $f'''(t)$ зануляется при $t = 0$ и $t = \pm\sqrt{3/2}$, где $\sqrt{3/2} \approx \pm 1.225$. Все эти стационарные точки доставляют экстремумы функции $f''(t)$ (см. Рис. 3.2).

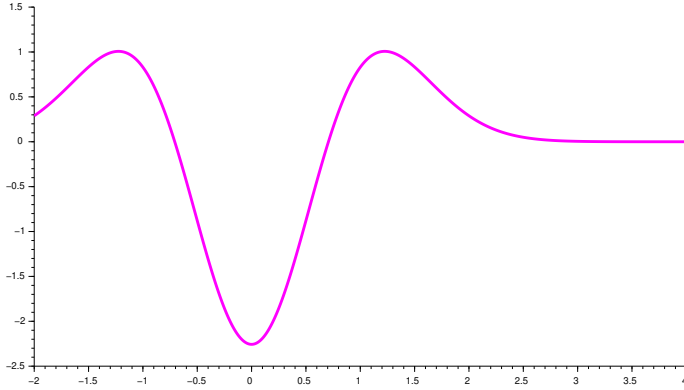


Рис. 3.2: График второй производной функции $f(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2}$.

Если аргумент t мал по абсолютной величине и находится, скажем, на интервале $[-1, 1]$, то значения множителя e^{-t^2} не слишком отличаются от 1. Тогда общее поведение функции $f''(t)$ близко к поведению квадратного двучлена

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} (-2 + 4t^2). \quad (3.10)$$

Поэтому при $t = 0$ имеется минимум $f''(t)$. Но за пределами интервала $[-1, 1]$ множитель e^{-t^2} начинает «придавливать» квадратный двучлен (3.10), и общий рост абсолютного значения функции $f''(t)$ сменяется на быстрое убывание. Как следствие, при $t = \pm\sqrt{3/2}$ функция $f''(t)$, будучи положительной, имеет максимумы.

Так как в пределах интервала $[0, 3]$, по которому вычисляется интеграл для нахождения значения $\operatorname{erf} 3$, лежат два из найденных экстремумов, то для отыскания $\max_{\xi \in [0, 3]} |f''(\xi)|$ нам необходимо вычислить значения функции в этих экстремумах и сравнить между собой по модулю.

Довольно грубо можно оценить

$$|f''(0)| = \frac{4}{\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{16}{\pi}} < \sqrt{\frac{18}{3}} = \sqrt{6} < 2.5.$$

Далее,

$$\begin{aligned} |f''(\sqrt{3/2})| &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left| -2 + 4 \cdot \frac{3}{2} \right| e^{-3/2} = \frac{8}{\sqrt{\pi}} e^{-3/2} = \\ &= \sqrt{\frac{64}{\pi e^3}} < \sqrt{\frac{64}{3 \cdot 2^3}} = \sqrt{\frac{8}{3}} < \sqrt{\frac{9}{3}} = \sqrt{3} < 1.8. \end{aligned}$$

Поэтому в целом

$$\max_{\xi \in [0,3]} |f''(\xi)| \leq 2.5.$$

На Рис. 3.2 можно увидеть, что эта оценка не столь уж плоха.

Как следствие, если мы возьмём h таким, что

$$\frac{2.5 \cdot 3 \cdot h^2}{24} \leq 10^{-4},$$

то из неравенства оценки погрешности квадратурной формулы будет следовать выполнение требования на точность результата. Для этого достаточно взять

$$h \leq \sqrt{\frac{24 \cdot 10^{-4}}{2.5 \cdot 3}} = 10^{-2} \sqrt{3.2} < 1.8 \cdot 10^{-2}.$$

Окончательно заключаем, что количество подинтервалов, на которые следует разбить интервал интегрирования $[0, 3]$, должно быть не меньшим, чем

$$3/h \leq \frac{3}{1.8 \cdot 10^{-2}} \approx 167.$$

■

Глава 4

Решение нелинейных уравнений

В этой главе рассматриваются численные методы для решения уравнений. Необходимость их развития и применения вызвана тем обстоятельством, что для большинства нелинейных уравнений, алгебраических или трансцендентных, точные конечные формулы для их решений дать нельзя.

Напомним, в частности, теорему Абеля-Руффини, которая утверждает, что общее алгебраическое уравнение степени больше четырёх неразрешимо в радикалах. Это означает, что для алгебраических уравнений степени выше четвёртой не существует конечных выражений для решений через коэффициенты уравнения, которые использовали бы четыре арифметических операции и операцию взятия корня. Как следствие, все достаточно общие методы нахождения решений алгебраических уравнений высоких степеней по необходимости являются численными, в которых искомое решение строится в виде последовательности приближений. Важную роль в подобных методах играют также оценки точности приближённых решений.

Пусть x^* является решением уравнения $f(x) = 0$, где функция $f(x)$ определена и непрерывна в некотором конечном или бесконечном интервале вещественной оси. Предполагая, что уравнение имеет лишь изолированные корни, будем искать приближенные решения уравнения $f(\tilde{x}) \approx 0$, т. е. такие значения переменной $x = \tilde{x}$, для которых при заданной точности $\varepsilon > 0$ выполняется $|f(\tilde{x})| < \varepsilon$.

Поиск приближенных решений уравнений часто разбивают на сле-

дующие этапы:

- 1) отделение (локализация) решений, т. е. нахождение интервалов, которые содержат только одно решение уравнения;
- 2) уточнение приближенных решений, т. е. доведение их до заданной степени точности.

Для выполнения первого этапа опираются на известные свойства функции, привлекая различные соображения из анализа и несложные численные расчёты. На втором этапе применяют специализированные численные методы. В последние десятилетия большое развитие получили интервальные методы для решения уравнений, основанные на идеях интервального анализа (см. [22]). Они обеспечивают комбинацию выписанных двух этапов, глобальность поиска решений уравнений, а также их гарантированные двусторонние оценки.

4.1 Локализация решений и оценка их погрешности

Рассмотрим несколько примеров на локализацию решений уравнений.

Теоретической основой многих популярных приёмов локализации решений уравнений является известная из математического анализа теорема Больцано-Коши: если непрерывная на интервале $[a, b]$ функция принимает на концах интервала значения разных знаков, то на этом интервале находится по меньшей мере одна точка, в которой функция зануляется.

Пример 4.1.1 Локализовать корни уравнения $x^3 - 6x + 2 = 0$ на вещественной оси.

Решение. Станем вычислять значения функции $f(x) = x^3 - 6x + 2 = 0$ в различных точках вещественной оси, составим таблицу знаков значений функции в этих точках

x	$-\infty$	-3	-1	0	1	3	$+\infty$
$f(x)$	$-$	$-$	$+$	$+$	$-$	$+$	$+$

Основываясь на полученной информации о перемене знаков у $f(x)$, можем заключить, что уравнение имеет три действительных решения,

лежащие в открытых интервалах $] - 3, -1[$, $]0, 1[$ и $]1, 3[$. Согласно основной теореме алгебры, других решений это алгебраическое уравнение третьей степени иметь не может.

Отделить корни уравнения можно, используя свойство сохранения знака производной $f'(x)$ внутри интервала. ■

Пример 4.1.2 Локализовать корни уравнения $x + e^x = 0$.

Решение. Обозначим $f(x) = x + e^x$. Так как $f'(x) = 1 + e^x > 0$, то функция в левой части уравнения возрастает на всей вещественной оси. Кроме того, $f(-\infty) = -\infty$, $f(\infty) = \infty$, и потому уравнение имеет только один вещественный корень.

Чтобы уточнить его, заметим, что значения функции $f(x)$ в точках -1 и 0 имеют разные знаки: $f(-1) < 0$, $f(0) > 0$. Следовательно, корень уравнения лежит на интервале $[-1, 0]$. ■

Для оценки того, насколько далеко приближённое решения уравнения отстоит от точного полезен следующий результат.

Предложение 4.1.1 [7, 22] Пусть для уравнения $f(x) = 0$ точное решение равно x^* , дано приближение к нему $\tilde{x}$, и они лежат на интервале $[a, b] \subset \mathbb{R}$. Если f — непрерывно дифференцируемая функция, то

$$|\tilde{x} - x^*| \leq \frac{|f(\tilde{x})|}{\min_{\xi \in [a, b]} |f'(\xi)|}. \quad (4.1)$$

На практике нахождение точного минимума $\min_{\xi \in [a, b]} |f'(\xi)|$ может быть затруднительным, и тогда вместо него в (4.1) можно взять какую-нибудь положительную оценку снизу для области значений производной на $[a, b]$.

Пример 4.1.3 Оценим погрешность приближения $\tilde{x} = -0.5$ к решению уравнения $x + e^x = 0$.

Решение. Как и прежде, обозначим $f(x) = x + e^x$. Исследуемое приближение к решению уравнения — довольно грубое, что следует из того, что

$$f(\tilde{x}) = f(-0.5) = 0.10653.$$

С другой стороны,

$$f(-1) = -0.63212,$$

и поэтому решение рассматриваемого уравнения лежит где-то на интервале $[-1, -0.5]$. Его можно взять за интервал локализации решения

и приближения к нему, который фигурирует в сформулированной выше теореме.

Производная функции из левой части уравнения равна

$$f'(x) = 1 + e^x,$$

и, как легко понять, она всюду положительна и возрастает, а минимум её модуля достигается на левом конце интервала рассмотрения, в данном случае при $x = -1$. Итак,

$$|-0.5 - x^*| \leq \frac{|f(-0.5)|}{|f'(-1)|} = \frac{0.10653}{1.3679} = 0.077880.$$

Точное решение этого уравнения, найденное, к примеру, с помощью метода простой итерации (см. следующий раздел), равно -0.56714 , так что в действительности

$$|-0.5 - x^*| = 0.06714.$$

Наша оценка погрешности приближённого решения получилась завышенной, но ненамного. Сузив интервал рассмотрения $[-1, -0.5]$, мы получили бы ещё более точную оценку погрешности. ■

4.2 Метод простой итерации

Метод простой итерации применяется к решению уравнений и систем уравнений в так называемом *рекуррентном виде*, когда неизвестная переменная выделена в одной из частей уравнения:

$$x = \varphi(x). \quad (4.2)$$

Он состоит в построении последовательности $\{x^{(k)}\}$ приближений к решению, начиная с некоторого заданного начального значения $x^{(0)}$, по правилу

$$x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots$$

Если $\varphi(x)$ — непрерывная функция, а $x^{(k)}$ — сходящаяся последовательность, то значение $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}$ является решением уравнения (4.2). Если отображение сжимающее, т.е. выполняется условие $|\varphi(x) - \varphi(y)| < q|x - y|$, $0 < q < 1$, (т.е. $|\varphi'(x)| < 1$) x, y принадлежат интервалу, то уравнение (4.2) имеет единственное решение.

Пример 4.2.1 Предложите сходящийся метод простой итерации для нахождения решения уравнения

$$x^3 - 2x^2 - 4x - 7 = 0,$$

которое локализовано на интервале $[3, 4]$.

Решение. Этим процессом может быть, например,

$$x^{(k+1)} \leftarrow \sqrt[3]{2(x^{(k)})^2 + 4x^{(k)} + 7}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

начинающийся из любой точки $x^{(0)} \in [3, 4]$. Его расчётная формула получается из решаемого уравнения после переноса всех членов со степенями неизвестной, меньшими 3, в правую часть и взятия кубического корня от обеих частей равенства.

Искомым решением уравнения является 3.6319808, и его нетрудно найти, запрограммировав выписанный выше итерационный процесс. ■

Пример 4.2.2 Предложите итерационный метод простой итерации для нахождения решений уравнения

$$(x - 1)^2 e^x - 7 = 0.$$

Решение. Таким итерационным методом может быть, к примеру,

$$x^{(k+1)} \leftarrow 1 + \sqrt{7 \exp(-x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

Он получается в результате преобразования исходного уравнения к следующему рекуррентному виду:

$$x = 1 + \sqrt{7e^{-x}}. \quad (4.4)$$

Найдём производную правой части полученного уравнения:

$$(1 + \sqrt{7e^{-x}})' = (1 + \sqrt{7}e^{-x/2})' = -\frac{\sqrt{7}}{2}e^{-x/2} = -\sqrt{\frac{7}{4e^x}}$$

Так как $7 < 7.29 = 2.7^2 < e^2$, то в силу монотонного возрастания экспоненты эта производная становится при $x \geq 1$ по модулю меньшей единицы:

$$\left| -\sqrt{\frac{7}{4e^x}} \right| = \sqrt{\frac{7}{4e^x}} < \sqrt{\frac{e^2}{4e}} = \sqrt{\frac{e}{4}} < 1.$$

Тогда же отображение

$$x \mapsto 1 + \sqrt{7e^{-x}}$$

является сжимающим. Как следствие, по теореме Банаха о неподвижной точке (см., к примеру, [10, 22]) оно имеет единственную неподвижную точку — решение уравнения (4.4).

Нетрудно понять из рекуррентного вида уравнения (4.4), что других решений оно иметь не может, так как функция $f(x) = x$ в левой части монотонно возрастает, а в правой части $g(x) = 1 + \sqrt{7e^{-x}}$ — монотонно убывает. Более одного пересечения графики этих функций иметь не могут.

В действительности, практические вычисления показывают (можно быстро проверить их в любой системе компьютерной математики), что построенный нами итерационный метод (4.3) сходится из любого начального приближения к единственному решению 1.9821. ■

4.3 Метод Ньютона

Предположим, что необходимо решить алгебраическое или трансцендентное уравнение

$$f(x) = 0$$

с непрерывно дифференцируемой функцией $f(x)$ на интервале $[a, b]$. Если уже известно какое-то приближение $\tilde{x}$ к решению уравнения, то, отправляясь от него, можно построить новое приближение, заменяя $f(x)$ многочленом Тейлора в точке $\tilde{x}$ и решая получившееся алгебраическое уравнение относительно неизвестной переменной.

В простейшем случае, когда используется разложение

$$f(x) \approx f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x}) \cdot (x - \tilde{x})$$

с точностью до членов первого порядка, получаем линейное уравнение

$$f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x}) \cdot (x - \tilde{x}) = 0.$$

Поэтому следующим приближением к решению исходного уравнения может быть взято

$$\tilde{\tilde{x}} = \tilde{x} - \frac{f(\tilde{x})}{f'(\tilde{x})}.$$

Далее это уточнение решения можно повторить ещё раз, и ещё — столько, сколько нужно для нахождения желаемого по точности приближения к решению. Построенный нами итерационный процесс,

$$x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

называется *методом Ньютона*. Геометрически метод Ньютона эквивалентен замене небольшой дуги кривой $y = f(x)$ на касательную, проведённую в точке $(\tilde{x}, f(\tilde{x}))$ очередного приближения к решению.

Чтобы исследовать сходимость метода Ньютона, перепишем его в обозначениях, принятых выше при описании метода простой итерации:

$$x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

где

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Достаточное условие сходимости тогда примет вид

$$|\varphi'(x)| = \frac{|f(x) f''(x)|}{(f'(x))^2} < 1, \quad x \in [a, b],$$

или

$$|f(x)| < \frac{(f'(x))^2}{|f''(x)|}, \quad x \in [a, b].$$

В случае $|\varphi'(x)| < 1$ на $[a, b]$ метод Ньютона сходится из любого начального приближения. Кроме того, если $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема, то метод Ньютона имеет второй порядок сходимости [7]:

$$x^{(k+1)} - x^* = \frac{f''(\xi^{(k)})}{2 f'(x^{(k)})} \cdot (x^{(k)} - x^*)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

где x^* — решение уравнения, а $\xi^{(k)}$ — какая-то точка, лежащая между x^* и $x^{(k)}$.

Пример 4.3.1 Предложите алгоритм вычисления корня p -й степени $\sqrt[p]{a}$ из неотрицательных чисел a , основанный на итерационном методе Ньютона.

Решение. Значение корня p -й степени $\sqrt[p]{a}$ является решением уравнения

$$x^p - a = 0.$$

Обозначим функцию в левой части уравнения через $\varphi(x)$. Тогда метод Ньютона для решения этого уравнения должен иметь вид

$$x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} - \frac{\varphi(x^{(k)})}{\varphi'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

При этом $\varphi'(x) = px^{p-1}$, так что

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^p - a}{p(x^{(k)})^{p-1}} = \frac{p-1}{p} x^{(k)} + \frac{a}{p(x^{(k)})^{p-1}}.$$

Окончательно,

$$x^{(k+1)} \leftarrow \frac{p-1}{p} x^{(k)} + \frac{a}{p(x^{(k)})^{p-1}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Этот итерационный процесс сходится из любого положительного начального приближения. ■

Пример 4.3.2 Используя в качестве основы метод Ньютона для решения уравнений, предложите алгоритм вычисления значений

$$\frac{1}{\sqrt{a}}$$

для положительных a , который не задействует операцию деления.

Решение. Если x — искомое значение $1/\sqrt{a}$, то оно удовлетворяет уравнению

$$x^{-2} - a = 0. \quad (4.5)$$

Обозначим

$$\psi(x) = x^{-2} - a,$$

тогда

$$\psi'(x) = -2x^{-3}.$$

По определению итерационного метода Ньютона в случае решения уравнения (4.5) имеем

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} - \frac{\psi(x^{(k)})}{\psi'(x^{(k)})} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^{-2} - a}{-2(x^{(k)})^{-3}} \\ &= x^{(k)} + \frac{(x^{(k)})^{-2}}{2(x^{(k)})^{-3}} - \frac{a}{2(x^{(k)})^{-3}} \\ &= x^{(k)} + \frac{1}{2} x^{(k)} - \frac{1}{2} a (x^{(k)})^3 \\ &= \frac{3}{2} x^{(k)} - \frac{1}{2} a (x^{(k)})^3. \end{aligned}$$

Деления в дробях $\frac{3}{2}$ и $\frac{1}{2}$ можно не считать «настоящими делениями», так как в действительности их нужно выполнить всего один раз, а можно даже вообще заменить умножением на числа 0.5 и 1.5 соответственно. Поэтому полученная формула для итераций метода Ньютона, т. е.

$$x^{(k+1)} \leftarrow 1.5x^{(k)} - 0.5a \left(x^{(k)}\right)^3,$$

удовлетворяет всем требованиям задачи. Но вот сходимость у построенного итерационного процесса весьма капризна. Он сходится не при всех $a > 0$ и не из любых начальных приближений. ■

Литература

- [1] БАРАХНИН В.Б., ШАПЕЕВ В.П. *Введение в численный анализ*. – Санкт-Петербург –Москва– Краснодар: Лань, 2005.
- [2] БАХВАЛОВ Н.С., ЖИДКОВ Н.П., КОБЕЛЬКОВ Г.М. *Численные методы*. – Москва: Бином, 2003, а также другие издания этой книги.
- [3] БАХВАЛОВ Н.С., КОРНЕВ А.А., ЧИЖОНКОВ Е.В. *Численные методы. Решения задач и упражнения*. – Москва: Бином-Лаборатория знаний, 2016.
- [4] БЕРЕЗИН И.С., ЖИДКОВ Н.П. *Методы вычислений. Т. 1 и 2*. – Москва: Наука, 1966, а также более ранние издания.
- [5] ВЕРЖБИЦКИЙ В.М. *Численные методы. Части 1–2*. – Москва: «Оникс 21 век», 2005.
- [6] ВОЛКОВ Е.А. *Численные методы*. – Москва: Наука, 1987.
- [7] ДЕМИДОВИЧ Б.П., МАРОН А.А. *Основы вычислительной математики*. – Москва: Наука, 1970.
- [8] ДЕМИДОВИЧ Б.П., МАРОН А.А., ШУВАЛОВА Э.З. *Численные методы анализа. Приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения*. – СПб: изд. Лань, 2008.
- [9] ДЕММЕЛЬ ДЖ. *Вычислительная линейная алгебра*. – Москва: Мир, 2001.
- [10] ЗОРИЧ В.А. *Математический анализ. Т. 1*. – Москва: Наука, 1981. Т. 2. - Москва: Наука, 1984, а также более поздние издания.
- [11] КОНОВАЛОВ А.Н. *Введение в вычислительные методы линейной алгебры*. – Новосибирск: Наука, 1993.

- [12] КРЫЛОВ А.Н. *Лекции о приближённых вычислениях*. – Москва: ГИТТЛ, 1954, а также более ранние издания.
- [13] КРЫЛОВ В.И., БОБКОВ В.В., МОНАСТЫРНЫЙ П.И. *Вычислительные методы. Т. 1–2*. – Москва: Наука, 1976.
- [14] ЛОВЕЦКИЙ К.П., СЕВАСТЬЯНОВ Л.А., ЛАНЕЕВ Е.Б. *Учебно-методическое пособие по курсу «Вычислительный эксперимент и методы вычислений»*. – Москва: Изд-во Российского университета дружбы народов, 2007.
- [15] САМАРСКИЙ А.А., ГУЛИН А.В. *Численные методы*. – Москва: Наука, 1989.
- [16] *Сборник задач по методам вычислений* под ред. П.И. Монастырного. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1983.
- [17] ТЫРТЫШНИКОВ Е.Е. *Методы численного анализа*. – Москва: Академия, 2007.
- [18] ФАДДЕЕВ Д.К., ФАДДЕЕВА В.Н. *Вычислительные методы линейной алгебры*. – Москва–Ленинград: Физматлит, 1963.
- [19] ФИХТЕНГОЛЬЦ Г.М. *Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 1, 2*. – Москва: Наука, 1966; Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2001; Санкт-Петербург: Лань, 2017.
- [20] ХОРН Р., ДЖОНСОН Ч. *Матричный анализ*. – Москва: Мир, 1989.
- [21] БАХВАЛОВ Н.С., ЛАПИН А.В., ЧИЖОНКОВ Е.В. *Численные методы в задачах и упражнениях*. – Москва: Высшая школа, 2000.
- [22] ШАРЫЙ С.П. *Курс вычислительных методов*. – Новосибирск: НГУ, 2022. – Электронный учебник, доступный на http://www.ict.nsc.ru/matmod/index.php?file=u_posobiya

Оглавление

Предисловие	3
1 Интерполирование и приближение функций	4
1.1 Алгебраическое интерполирование	6
1.2 Интерполяционный полином Лагранжа	8
1.3 Погрешность алгебраической интерполяции	12
1.4 Разделённые разности и их свойства	16
1.5 Интерполяционный полином Ньютона	20
1.6 Алгебраическая интерполяция с кратными узлами	24
1.7 Полиномы Чебышёва	27
1.8 Сплайны	31
1.9 Псевдорешения систем линейных уравнений	35
1.10 Приближение функций	40
2 Численное дифференцирование	46
2.1 Интерполяционный подход	46
2.2 Метод неопределённых коэффициентов	47
3 Численное интегрирование	53
3.1 Основные понятия	53
3.2 Интерполяционные квадратурные формулы	56
3.3 Квадратурные формулы Гаусса	59
3.4 Составные квадратурные формулы	65
4 Решение нелинейных уравнений	75
4.1 Локализация решений и оценка их погрешности	76
4.2 Метод простой итерации	78
4.3 Метод Ньютона	80
Список литературы	84

Учебное издание

**Бельхеева Румия Катдусовна,
Шарый Сергей Петрович**

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ПРИМЕРАХ

Учебное пособие

Редактор В. И. Варламова
Оригинал-макет С. П. Шарого, Р. К. Бельхеевой
Обложка Е. В. Неклюдовой
Подготовка к печати С. В. Исаковой

Подписано в печать 10.10.2022 г.
Формат 60 × 84 1/16. Уч.-изд. л. 5,6. Усл. печ. л. 5,2.
Тираж 160 экз. Заказ № 25
Издательско-полиграфический центр НГУ
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2