

Численные методы.

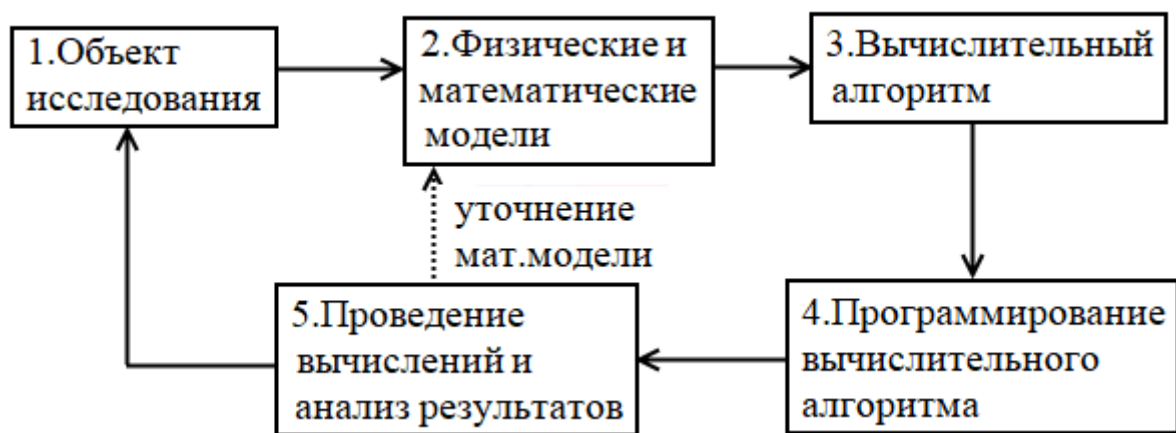
Лектор – Чигирёва Ольга Юрьевна.

Введение в численные методы.

Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.

Вычислительный эксперимент представляет собой метод исследования естественно-научных проблем, допускающий математическое описание средствами вычислительной математики.

Основные этапы вычислительного эксперимента.



Первоначально прикладная задача может быть сформулирована в общем виде: исследовать некоторое явление, дать прогноз поведению некоторого объекта в определённых условиях и т.д.

На первом этапе осуществляется конкретизация постановки задачи и формулируется цель исследования.

На втором этапе выбирают физическую модель процесса, пренебрегая теми факторами, влияние которых в данном случае предполагают несущественным. Физической модели ставится в соответствие математическая модель, т.е. математическое описание физического процесса с помощью алгебраических, дифференциальных, интегральных уравнений. Эти уравнения обычно выражают законы сохранения основных физических величин. После того как задача сформулирована в математической форме, необходимо найти её решение.

На третьем этапе осуществляется выбор вычислительного алгоритма. Под вычислительным алгоритмом понимают последовательность арифметических и логических операций, при помощи которых находятся приближённые численные решения математической задачи.

На четвёртом этапе осуществляется написание программы и её отладка.

На пятом этапе проводятся вычисления. Полученные результаты изучаются с точки зрения их соответствия исследуемому явлению, и при необходимости уточняется математическая модель.

Классификация вычислительных задач.

Все величины, входящие в математическую модель, разделим на 3 группы:

- 1). Исходные данные: $x = (x_1, \dots, x_m)$
- 2). Параметры модели: $a = (a_1, \dots, a_k)$
- 3). Искомое решение: $y = (y_1, \dots, y_n)$

Вычислительные задачи:

1). Прямая задача: по данному значению x при фиксированных значениях a найти y .

2). Обратная задача: по данному значению y при фиксированных значениях a найти x .

3). Задача идентификации – состоит в выборе из заданного параметрического семейства моделей конкретной математической модели (с помощью выбора её параметров), с тем чтобы оптимальным в смысле некоторого критерия образом согласовать значения y с результатами наблюдения.

Классификация погрешностей решения вычислительных задач.

1). Неустраняемая погрешность – является следствием неточности задания числовых данных, входящих в математическое описание задачи, и следствием несоответствия математического описания задачи реальности.

2). Погрешность метода

3). Вычислительная погрешность – обусловлена тем, что при выполнении арифметических операций на компьютере и при выводе результатов на печать осуществляется округление.

4). Полная погрешность – разность между реально полученным и точным решением задачи.

Приближённые числа. Относительная и абсолютная погрешность.

Точное значение числа будем обозначать без звёздочки, приближённое – со звёздочкой.

Погрешностью приближённого числа a^* называют разность между точным значением a и приближённым значением a^* , т.е. $a - a^*$.

Абсолютной погрешностью приближённого числа a^* называют величину, равную модулю разности между точным и приближённым значением: $\Delta(a^*) = |a - a^*|$.

Относительной погрешностью приближённого числа a^* называют величину, равную отношению абсолютной погрешности к точному значению числа.

$$\delta(a^*) = \frac{\Delta(a^*)}{|a|}$$

Замечание: так как точное значение a неизвестно, то непосредственное вычисление величин абсолютной и относительной погрешностей по записанным выше формулам невозможно. Поэтому на практике находят оценку погрешности.

$|a - a^*| \leq \bar{\Delta}(a^*)$ – граница абсолютной погрешности

$\frac{|a - a^*|}{|a|} \leq \bar{\delta}(a^*)$ – граница относительной погрешности

На практике вместо неизвестного значения a используют приближённое значение a^* . Тогда границы относительной и абсолютной погрешностей связаны формулой

$$\frac{\bar{\Delta}(a^*)}{|a|} \approx \bar{\delta}(a^*)$$

Значащими цифрами числа a^* называются все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева.

$$a^* = \alpha_n \alpha_{n-1} \dots \alpha_0 \cdot \beta_1 \beta_2 \dots \beta_n$$

$a^* = 0,03045000$ – 7 значащих цифр.

Значащую цифру числа a^* называют верной, если абсолютная погрешность числа не превосходит единицы разряда, соответствующего этой цифре.

Количество верных значащих цифр отсчитываем от первой значащей цифры числа до первой значащей цифры его абсолютной погрешности.

Пример:

$$a^* = 0,03045000$$

$$\Delta(a^*) = 0,0000007$$

5 верных значащих цифр.

Погрешность округления.

Погрешностью округления называют погрешность, возникающую при замене числа a другим числом a^* с меньшим количеством значащих цифр.

Способы округления:

1). Усечение до заданного числа значащих цифр. Абсолютная погрешность не превышает единицы разряда, соответствующего последней оставленной цифре.

2). Дополнение. Если первая слева из отбрасываемых цифр β_k такая, что β_k меньше пяти, то β_{k-1} оставляем без изменений, если β_k больше или равна пяти, то β_{k-1} увеличиваем на единицу.

При этом абсолютная погрешность не превосходит половины единицы разряда, соответствующего последней оставленной цифре.

Замечание: границы абсолютной и относительной погрешностей всегда округляют в сторону увеличения.

Пример:

$$a = 1,237$$

1). Усечение: $a^* = 1,23$

$$\Delta(a^*) = |a - a^*| = 0,007 < 0,01$$

2). Дополнение: $a^* = 1,24$

$$\Delta(a^*) = |a - a^*| = 0,003 \leq \frac{0,01}{2}$$

Погрешности арифметических операций над приближёнными числами.

Теорема 1. Об абсолютной погрешности алгебраической суммы.

$$\Delta(a^* \pm b^*) \leq \Delta(a^*) + \Delta(b^*)$$

Доказательство:

$$\begin{aligned}\Delta(a^* \pm b^*) &= |(a \pm b) - (a^* \pm b^*)| = |(a \pm b) - (a^* \pm b^*)| = \\ &= |(a - a^*) - (b - b^*)| \leq \Delta(a^*) + \Delta(b^*)\end{aligned}$$

(модуль суммы не превосходит суммы модулей, а модуль разности – тем более)

Следствие для границ абсолютной погрешности: граница суммы/разности равна сумме границ приближённых чисел.

Теорема 2. Об относительной погрешности суммы и разности.

Пусть a и b – ненулевые числа одного знака: $ab > 0$, тогда

$$\delta(a^* + b^*) \leq \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\}$$

$$\delta(a^* - b^*) \leq \frac{|a + b|}{|a - b|} \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\}$$

Докажем вторую формулу, для этого применим теорему 1.

$$\Delta(a^* \pm b^*) \leq \Delta(a^*) + \Delta(b^*)$$

$$\Delta(c^*) = |c| \delta(c^*)$$

Полагая $c = a - b$, получим $|a - b| \delta(a^* - b^*) \leq |a| \delta(a^*) + |b| \delta(b^*)$.

Оценим сверху выражение, стоящее в правой части этого неравенства.

$$|a| \delta(a^*) + |b| \delta(b^*) \leq (|a| + |b|) \cdot \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\} =$$

$$= |a + b| \cdot \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\}, \Rightarrow$$

$$|a - b| \delta(a^* - b^*) \leq |a + b| \cdot \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\}.$$

Разделив обе части на $|a - b|$, получим

$$\delta(a^* - b^*) \leq \frac{|a + b|}{|a - b|} \max\{\delta(a^*), \delta(b^*)\}$$

Следствие для границ относительной погрешности:

$$\bar{\delta}(a^* + b^*) \leq \max\{\bar{\delta}(a^*), \bar{\delta}(b^*)\}$$

$$\bar{\delta}(a^* - b^*) \leq \frac{|a + b|}{|a - b|} \max\{\bar{\delta}(a^*), \bar{\delta}(b^*)\}$$

При вычитании близких чисел одного знака возможна потеря точности в несколько раз, поскольку при этом $|a - b| \rightarrow 0$ и $|a + b| \gg |a - b|$.

Теорема 3. Об относительной погрешности произведения.

$$\delta(a^* b^*) \leq \delta(a^*) + \delta(b^*) + \delta(a^*)\delta(b^*)$$

Доказательство:

$$\begin{aligned} \Delta(a^* b^*) &= |ab - a^* b^*| = |ab - [(a - a^*) - a] \cdot [(b - b^*) - b]| = \\ &= |ab - (a - a^*) \cdot (b - b^*) + a(b - b^*) + b(a - a^*) - ab| \leq \Delta(a^*)\Delta(b^*) + \\ &+ |a|\Delta(b^*) + |b|\Delta(a^*), \rightarrow \Delta(a^* b^*) \leq \Delta(a^*)\Delta(b^*) + |a|\Delta(b^*) + |b|\Delta(a^*) \end{aligned}$$

$$\Delta(c^*) = |c|\delta(c^*)$$

$$|ab|\delta(a^* b^*) \leq |a|\delta(a^*)|b|\delta(b^*) + |a||b|\delta(b^*) + |b||a|\delta(a^*)$$

Разделив обе части на $|ab|$, получим $\delta(a^* b^*) \leq \delta(a^*) + \delta(b^*) + \delta(a^*)\delta(b^*)$.

Следствие для границ относительной погрешности:

при $\bar{\delta}(a^*) \ll 1, \bar{\delta}(b^*) \ll 1$: $\bar{\delta}(a^* b^*) \approx \bar{\delta}(a^*) + \bar{\delta}(b^*)$.

Теорема 4. Об относительной погрешности частного.

$$\delta\left(\frac{a^*}{b^*}\right) \leq \frac{\delta(a^*) + \delta(b^*)}{1 - \delta(b^*)} \text{ при } \delta(b^*) < 1.$$

Доказательство:

$$\delta\left(\frac{a^*}{b^*}\right) = \frac{\left|\frac{a}{b} - \frac{a^*}{b^*}\right|}{\left|\frac{a}{b}\right|} = \frac{|ab^* - ba^*|}{|a||b^*|}$$

Оценим сверху выражение, стоящее в числителе:

$$|ab^* - ba^*| = |ab^* + b(a - a^*) - ab| = |b(a - a^*) - a(b - b^*)| \leq |b|\Delta(a^*) + |a|\Delta(b^*)$$

Выражение в знаменателе оценим снизу:

$$|b^*| = |b - (b - b^*)| \geq ||b| - \Delta(b^*)| = ||b| - |b|\delta(b^*)| = |b|(1 - \delta(b^*))$$

при $\delta(b^*) < 1$

Таким образом,

$$\delta\left(\frac{a^*}{b^*}\right) \leq \frac{|b|\Delta(a^*) + |a|\Delta(b^*)}{|a||b|(1 - \delta(b^*))} = \frac{\frac{\Delta(a^*)}{|a|} + \frac{\Delta(b^*)}{|b|}}{(1 - \delta(b^*))} = \frac{\delta(a^*) + \delta(b^*)}{1 - \delta(b^*)}$$

Следствие для границ относительной погрешности:

$$\bar{\delta}\left(\frac{a^*}{b^*}\right) \approx \bar{\delta}(a^*) + \bar{\delta}(b^*) \text{ при } \bar{\delta}(a^*) \ll 1, \bar{\delta}(b^*) \ll 1.$$

Пример: оценить точность приближения числа $a^* = 1.41$ к числу Пифагора $a = \sqrt{2} = 1.414213 \dots$ (многоточие означает, что это число точное, но следующие разряды не выписаны)

1). Вычислим погрешность: $a - a^* = 0,004213 \dots$

2). Всегда округляем полученное значение погрешности в сторону увеличения: $\bar{\Delta}(a^*) = 0,004214$

Значение округлено, поэтому многоточие ставить не нужно.

3). Найдём границу для относительной погрешности:

$$\bar{\delta}(a^*) = \frac{\bar{\Delta}(a^*)}{|a^*|} = \frac{0,004214}{1,14} \approx 0,003 \text{ (0,3\%)}$$

Погрешность вычисления функций многих переменных.

Пусть задана функция n переменных $f(x_1, \dots, x_n)$, непрерывная и дифференцируемая в области своего определения. На практике используют линейную оценку погрешности.

$$\bar{\Delta}(y^*) = \sum_{i=1}^n |f'_{x_i}(x_1^*, \dots, x_n^*)| \cdot \Delta(x_i^*) \quad (|x - x_i| < \bar{\Delta}(x_i^*))$$

Пример. Получить линейную оценку погрешности вычислений элементарных функций:

1). $f(x) = a^x (a > 0)$

$$f'(x) = a^x \ln a \Rightarrow \bar{\Delta}(y^*) = |a^{x^*} \ln a| \cdot \bar{\Delta}(x^*)$$

2). $f(x) = x^\alpha$

$$f'(x) = \alpha x^{\alpha-1} \Rightarrow \bar{\Delta}(y^*) = |\alpha(x^*)^{\alpha-1}| \cdot \bar{\Delta}(x^*)$$

$$3). f(x) = \ln x$$

$$f'(x) = \frac{1}{x} \Rightarrow \bar{\Delta}(y^*) = \frac{1}{|x^*|} \cdot \bar{\Delta}(x^*) = \bar{\delta}(x^*)$$

$$4). f(x) = \sin x$$

$$f'(x) = \cos x \Rightarrow \bar{\Delta}(y^*) = |\cos(x^*)| \cdot \bar{\Delta}(x^*) \leq \bar{\Delta}(x^*)$$

Для функции $f(x) = \cos x$ аналогично.

$$5). f(x) = \operatorname{tg} x$$

$$f'(x) = \frac{1}{\cos^2 x} \Rightarrow \bar{\Delta}(y^*) = \left| \frac{1}{\cos^2(x^*)} \right| \cdot \bar{\Delta}(x^*) = (1 + \operatorname{tg}^2(x^*)) \cdot \bar{\Delta}(x^*) \geq \bar{\Delta}(x^*)$$

Для функции $f(x) = \operatorname{ctg} x$ аналогично.

Представление вещественных чисел в вычислительной машине.

Для вещественных чисел принята форма представления с плавающей точкой.

$$x = Mr^p$$

При этом $r^{-1} \leq |M| < 1$.

Выполнение этого условия обеспечивает единственность представления числа в такой форме.

r – основание систем исчисления

p – целое число – порядок числа x

M – мантисса числа x

$$M = \pm(\gamma_1 r^{-1} + \gamma_2 r^{-2} + \dots + \gamma_t r^{-t})$$

Здесь γ_i – целые числа, причём

$$0 \leq \gamma_i \leq r - 1, \quad i = \overline{1, t}$$

$\gamma_1 \neq 0$, так как в памяти машины хранятся только верные значащие цифры.

t – разрядность мантиссы, то есть количество цифр, которое отводится для её записи.

Пример:

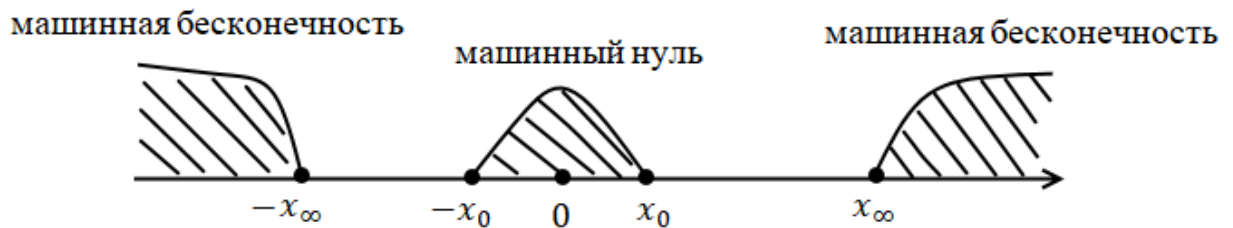
$$x = +0,0013507$$

$$r = 10$$

$$M = +(1 \cdot 10^{-1} + 3 \cdot 10^{-2} + 5 \cdot 10^{-3} + 7 \cdot 10^{-5})$$

$$x = M \cdot 10^{-2}$$

Вычислительная машина оперирует с числами, имеющими конечное число значащих цифр и принадлежащих не всей числовой оси, а некоторому интервалу $0 < x_0 \leq |x| < x_\infty$, и не оперирует с числами, входящими в области машинного нуля и машинной бесконечности.



Если в процессе вычислений нарушается условие $|x| < x_\infty$, то происходит аварийный останов вычислительной машины вследствие переполнения разрядной сетки.

Если в результате вычислений получается число x такое, что $|x| < x_0$, то происходит исчезновение порядка.

Выполнение арифметических операций над числами, мантиксы которых содержат t разрядов, как правило, приводит к результатам, содержащим более t разрядов. Округление результата до t разрядов приводит к возникновению погрешности.

$$\Delta(a \circledast b) \approx |a * b| \cdot \varepsilon_M$$

$*$ – точное выполнение операций сложения, вычитания, умножения, деления;

\circledast – приближенное (машинное) выполнение тех же операций;

ε_M – относительная точность вычислительной машины, или машинный эпсилон. Определяется разрядностью мантиксы и способом округления.

Машинный эпсилон – минимальное из представляемых в вычислительной машине чисел, для которого ещё выполняется неравенство $1 \oplus \varepsilon > 1$.

Вычислительные задачи.

Пусть X – множество допустимых входных данных, Y – множество возможных решений.

Цель вычислительной задачи – нахождение решения $y \in Y$ по заданному значению $x \in X$.

Решение y в вычислительной задаче называют устойчивым по входным данным x , если оно зависит от входных данных непрерывным образом.

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta = \delta(\varepsilon) > 0 (\forall x^*: \Delta(x^*) < \delta) \rightarrow (\exists y^*: \Delta(y^*) < \varepsilon)$$

Неустойчивость решения y означает, что существует такое ε_0 , что какое бы малое $\delta > 0$ не было задано, найдутся такие исходные данные x^* , что $\Delta(x^*) < \delta$, но $\Delta(y^*) > \varepsilon_0$.

Вычислительная задача называется корректной по Адамару, если выполнены следующие три условия:

- 1). Решение задачи $y \in Y$ существует при любых исходных данных $x \in X$
- 2). Это решение единственное
- 3). Решение устойчиво по отношению к малым возмущениям исходных данных.

При нарушении хотя бы одного из заданных условий, задача считается некорректной.

Замечание: многие прикладные задачи являются некорректными. Для решения такого класса задач используются методы регуляризации, разработанные школой академика Тихонова.

Задачу называют хорошо обусловленной, если малым погрешностям исходных данных отвечают малые погрешности решения, и плохо обусловленной, если возможны сильные изменения решения.

Методы численного решения систем линейных алгебраических уравнений СЛАУ.

I. Основные сведения из линейной алгебры.

1). Матричная форма записи СЛАУ:

$$Ax = b$$

A – матричные коэффициенты

b – вектор правых частей

x – искомый вектор

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad a_{ij} \in R$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$$

2). Нормы векторов и матриц

1. l_1 – норма: $\|x\|_1 = \sum_{k=1}^n |x_k|$

2. l_2 – (евклидова) норма: $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2}$

3. l_∞ – инфинити норма: $\|x\|_\infty = \max |x_k|$

Нормы одного и того же вектора являются эквивалентными. Они связаны следующей цепочкой неравенств:

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq \alpha \|x\|_\infty, \quad \alpha > 0$$

Нормой матрицы A , подчинённой норме векторов, введённых в евклидовом пространстве R^n , называется число, определяемое следующим образом:

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

Каждой из векторной норм соответствует своя подчинённая норма матрицы A .

1).

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

$\sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ – сумма модулей элементов j-того столбца

2).

$$\|A\|_2 = \sqrt{\max_{1 \leq j \leq n} \lambda_{A^T A}^{(j)}}$$

3).

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

На практике используют оценку для этой нормы:

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_E = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2}$$

Функции в Matlab.

$$\begin{cases} n = \text{norm}\{x, 1\} \leftarrow \|x\|_1 \\ n = \text{norm}(x) \leftarrow \|x\|_2 \\ n = \text{norm}(x, \text{inf}) \leftarrow \|x\|_\infty \end{cases}$$

Для матриц:

$$\begin{cases} n = \text{norm}\{A, 1\} \leftarrow \|A\|_1 \\ n = \text{norm}(A) \leftarrow \|A\|_2 \\ n = \text{norm}(A, \text{inf}) \leftarrow \|A\|_\infty \end{cases}$$

Оценка:

$$n = \text{normest}(A)$$

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_E$$

Пример.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

1).

$$\|A\|_1 = \max\{1 + 3, |-2| + 4\} = 6$$

2).

$$\|A\|_\infty = \max\{1 + |-2|, 3 + 4\} = 7$$

Оценка:

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_E = \sqrt{1^2 + (-2)^2 + 3^2 + 4^2} = \sqrt{30}$$

II. Метод Гаусса

Рассмотрим СЛАУ $Ax = b$.

Предположим, что матрица невырожденная, то есть $\det A \neq 0$, это значит, что СЛАУ имеет единственное решение.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases} \quad (1)$$

Прямой ход метода Гаусса заключается в преобразовании исходной системы $Ax = b$ в эквивалентную систему $Cx = y$, где C – верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & * & * \\ 0 & 1 & * \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Шаг 1. Предположим, что элемент a_{11} отличен от нуля: $a_{11} \neq 0$. Этот элемент называют главным элементом первого шага.

Исключим неизвестную x_1 из уравнений с номерами $i = 2, 3$. Для этого разделим первое уравнение системы (1) на a_{11} и вычтем из i -ого уравнения ($i = 2, 3$) первое уравнение, умноженное на a_{i1} :

$$\begin{cases} x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 = \frac{b_1}{a_{11}} \\ (a_{21} - \frac{a_{12}}{a_{11}}a_{21})x_2 + (a_{23} - \frac{a_{13}}{a_{11}}a_{21})x_3 = b_2 - \frac{b_1}{a_{11}}a_{21} \\ (a_{32} - \frac{a_{12}}{a_{11}}a_{31})x_2 + (a_{33} - \frac{a_{13}}{a_{11}}a_{31})x_3 = b_3 - \frac{b_1}{a_{11}}a_{31} \end{cases} \quad (2)$$

Матрица системы (2) принимает вид:

$$C_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & C_{12} & C_{13} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{pmatrix} \quad y_{(1)} = \begin{pmatrix} y_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \end{pmatrix}$$

Замечание: исключение неизвестного x_1 эквивалентно умножению матричного уравнения $Ax = b$ слева на матрицу L_1 .

$$L_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

После первого шага мы получили систему $(L_1 A)x = L_1 b$.

$$L_1 A = C_1, \quad L_1 b = y_{(1)}$$

Шаг 2. Предположим что элемент $a_{22}^{(1)} \neq 0$. Этот элемент называют главным элементом второго шага.

Исключим неизвестную x_2 из третьего уравнения. Для этого разделим второе уравнение системы (2) на $a_{22}^{(1)}$ и вычтем из третьего уравнения второе уравнение, умноженное на $a_{32}^{(1)}$

$$\begin{cases} x_1 + C_{12}x_2 + C_{13}x_3 = y_1 \\ x_2 + \frac{a_{23}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}x_3 = \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \\ \left(a_{33}^{(1)} - \frac{a_{23}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}a_{32}^{(1)} \right)x_3 = b_3^{(1)} - \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}a_{32}^{(1)} \end{cases} \quad (3)$$

$$C_{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & C_{12} & C_{13} \\ 0 & 1 & C_{23} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \quad y_{(2)} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix}$$

Исключение неизвестного x_2 эквивалентно умножению матричного уравнения $L_1 Ax = L_1 b$ слева на матрицу L_2 : $(L_2 L_1 A)x = L_2 L_1 b$, где матрица L_2 имеет вид:

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{22}^{(1)}} & 0 \\ 0 & -\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_2 L_1 A = C_{(2)}, \quad L_2 L_1 b = y_{(2)}$$

Шаг 3. Разделим обе части третьего уравнения на элемент $a_{33}^{(2)} \neq 0$.

$$C_{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & C_{12} & C_{13} \\ 0 & 1 & C_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Это преобразование эквивалентно умножению матричного уравнения $(L_2 L_1 A)x = L_2 L_1 b$ слева на матрицу L_3 , которая имеет вид

$$L_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_{33}^{(2)}} \end{pmatrix}$$

В результате получаем систему $Cx = y$ с верхней треугольной матрицей C с единицами на главной диагонали $C = L_3 L_2 L_1 A$ и вектором правых частей $y = L_3 L_2 L_1 b$.

Обратный ход метода Гаусса. Состоит в последовательном нахождении неизвестных x_3 , x_2 и x_1 из системы $Cx = y$.

$$\begin{cases} x_3 = y_3 \\ x_2 = y_2 - C_{23}x_3 \\ x_1 = y_1 - C_{12}x_2 - C_{13}x_3 \end{cases}$$

Расчётные формулы для системы n -ого порядка.

Прямой ход метода Гаусса.

$$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}, \quad i, j = \overline{1, n}$$

$$b_{ij}^{(0)} = b_{ij}, \quad i = \overline{1, n}$$

$$k = \overline{1, n}: \quad C_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad j = \overline{(k+1), n}$$

$$y_k = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

$$k = \overline{1, (n-1)}:$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - C_{kj} a_{ik}^{(k-1)}, \quad i, j = \overline{(k+1), n}$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - y_k a_{ik}^{(k-1)}, \quad i = \overline{(k+1), n}$$

Обратный ход.

$$x_n = y_n$$
$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^n C_{ij} x_j, \quad i = (n-2), (n-3), \dots, 2, 1$$

Ограничение метода: если $a_{kk}^{(k-1)} \approx 0$, то в процессе вычислений возможен неконтролируемый рост погрешности.

Метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу – эквивалентен применению метода Гаусса к системе, в которой на каждом шаге исключения неизвестного осуществляется перестановка уравнений.

На k -ом шаге исключения найдём наибольший по модулю коэффициент при неизвестном x_k :

$$a_{i^*,k}^{(k-1)} = \max_{k \leq i \leq n} \{a_{ik}^{(k-1)}\}$$

и поменяем местами уравнения с номерами k и i^* .

III. LU-разложение матрицы.

Теорема о LU-разложении: пусть все угловые миноры матрицы A отличны от нуля: $\Delta_j \neq 0, j = \overline{1, n}$. Тогда матрицу A можно представить единственным образом в виде произведения $A = LU$, где L – нижняя треугольная матрица с ненулевыми элементами на главной диагонали; U – верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали.

Следствие: метод Гаусса можно применить тогда и только тогда, когда все угловые миноры матрицы A отличны от нуля.

Замечание: данный критерий проверить на практике достаточно трудно.

Если в матрице A преобладают диагональные элементы

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1(j \neq i)}^n |a_{ij}|, \forall i = \overline{1, n},$$

то все угловые миноры этой матрицы отличны от нуля. Матрица A – матрица с диагональным преобладанием.

После n -ого шага метода Гаусса система $Ax = b$ преобразуется к следующему виду:

$$(L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 A)x = L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 b$$

$$L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = C$$

$$L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 = y$$

$U = C = L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 A$ – верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали.

$$A = EA = (L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} L_n^{-1})(L_n L_{n-1} \dots L_2 L_1 A) = LU,$$

$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} L_n^{-1}$ – нижняя треугольная матрица.

Решение системы $Ax = b$, т.е. $LUX = b$, сводится к последовательному решению двух систем $Ly = b$ и $UX = y$.

Нахождение обратной матрицы.

Пусть матрица A – квадратная матрица, невырожденная ($\det A \neq 0$), тогда нахождение обратной матрицы эквивалентно решению матричного уравнения $AX = E$, где E – единичная матрица.

Введём следующие обозначения:

$$x^{(j)} = \begin{pmatrix} x_{1j} \\ \dots \\ x_{nj} \end{pmatrix} - j\text{-тый столбец матрицы } X.$$

Обозначим через $\delta^{(j)}$ j -тый столбец матрицы E . Это столбец, у которого j -тая компонента равна единице, а все остальные нули.

Найдём j -тый столбец матрицы X , решив следующую СЛАУ: $Ax^{(j)} = \delta^{(j)}$. Для решения этой СЛАУ применим метод Гаусса без выбора главного элемента. Тогда прямой ход – это получение разложения $A = LU$, обратный ход – это последовательное решение двух систем:

$$Ly^{(j)} = \delta^{(j)} \text{ и } Ux^{(j)} = y^{(j)}, j = \overline{1, n}.$$

Обусловленность СЛАУ.

Рассмотрим систему $Ax = b$ (1).

Пусть элементы матрицы A заданы точно, а вектор правых частей приближённо, то есть решается система $Ax^* = b^*$ (2), где x^* – точное решение системы (2).

Получим оценки абсолютной и относительной погрешности. Вычтем (1)-(2):

$$\begin{aligned} A(x - x^*) &= b - b^* \\ x - x^* &= A^{-1}(b - b^*) \end{aligned}$$

Применим свойство норм матриц: $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$, тогда

$$\Delta(x^*) = \|x - x^*\| = \|A^{-1}(b - b^*)\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|b - b^*\| = \|A^{-1}\| \cdot \Delta(b^*)$$

Разделим обе части неравенства на норму $\|x\|$:

$$\delta(x^*) = \frac{\Delta(x^*)}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \cdot \Delta(b^*)}{\|x\|} = \frac{\|A^{-1}\| \cdot \|b\|}{\|x\|} \delta(b^*)$$

Величину $\nu(x) = \frac{\|A^{-1}\| \cdot \|b\|}{\|x\|}$ называют естественным числом обусловленности.

Вычислим максимальное значение $\nu(x)$:

$$\max \nu(x) = \max \frac{\|A^{-1}\| \cdot \|Ax\|}{\|x\|} = \|A^{-1}\| \cdot \|A\|.$$

Величину $\nu(A) \equiv \text{cond}(A) = \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$ называют числом обусловленности матрицы A .

$$\delta(x^*) \leq \text{cond}(A) \delta(b^*).$$

Свойства числа обусловленности:

1). Число обусловленности единичной матрицы равно 1.

$$\text{cond}(E) = \|E^{-1}\| \cdot \|E\| = \|E\| \cdot \|E\| = 1 \cdot 1 = 1.$$

2). $\text{cond}(A) \geq 1$

$1 = \|E\| = \|A^{-1}A\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|A\| = \text{cond}(A)$. Прочитав неравенство в обратную сторону, получим $\text{cond}(A) \geq 1$.

$$3). \text{cond}(\alpha A) = v(A), \alpha \in R$$

$$(\alpha A)^{-1} = \frac{1}{\alpha} A^{-1}$$

$$\text{cond}(\alpha A) = \|(\alpha A)^{-1}\| \cdot \|(\alpha A)\| = \frac{1}{\alpha} \|A^{-1}\| \cdot |\alpha| \cdot \|A\| = \text{cond}(A).$$

Величина $\text{cond}(A)$ является количественной мерой обусловленности СЛАУ $Ax = b$.

Матрицы с большим числом обусловленности называют плохо обусловленными.

Замечание: величина $\text{cond}(A)$ выбора нормы, который осуществляется исходя из требований, предъявляемых к точности решения:

- 1). L_1 – малая суммарная ошибка в компонентах решения
- 2). L_2 – малая среднеквадратичная ошибка
- 3). L_∞ – наибольшая из абсолютных ошибок в компонентах решения должна быть малой.

Пример. Вычислить число обусловленности матрицы:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq 2} \sum_{i=1}^2 |a_{ij}| = \max\{1 + 3, 2 + 4\} = 6.$$

$$A^{-1} = \frac{1}{-2} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ -3/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$\|A^{-1}\|_1 = \max\left\{|-2| + \frac{3}{2}, 1 + \left(-\frac{1}{2}\right)\right\} = \frac{7}{2}.$$

$$\text{cond}_1(A) = 6 \cdot \frac{7}{2} = 21.$$

Метод Холецкого (метод квадратных корней).

Рассмотрим СЛАУ $Ax = b$ с невырожденной квадратной матрицей A , причём A – симметрическая положительно определённая матрица.

Представим матрицу A в виде $A = LL^T$, где L – нижняя треугольная матрица, все ненулевые элементы которой положительны.

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \dots & l_{22} & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \dots & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Тогда решение системы сводится к последовательному решению систем с нижней и верхней треугольными матрицами.

$$Ax = b$$

$$Ly = b$$

$$L^T x = y$$

$$j = 1: \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad l_{i1} = \frac{1}{l_{11}} a_{i1}, \quad i = \overline{2, n}$$

$$j = 2: \quad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}, \quad l_{i2} = \frac{1}{l_{22}} (a_{i2} - l_{i1} l_{21}), \quad i = \overline{3, n}$$

$$j = k: \quad l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - l_{k2}^2 - \dots - l_{k(k-1)}^2},$$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik} - l_{i1} l_{k1} - \dots - l_{i(k-1)} l_{k(k-1)}}{l_{kk}}, \quad i = \overline{(k+1), n}$$

$$j = n: \quad l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - l_{n1}^2 - l_{n2}^2 - \dots - l_{n(n-1)}^2}$$

Преимущества метода:

- 1). Меньшее число арифметических операций по сравнению с методом Гаусса.
- 2). Гарантированная устойчивость.

Метод прогонки.

Данный метод применяется для решения СЛАУ в трёхдиагональной матрице.

$$\begin{pmatrix} b_1 & C_1 & \emptyset & \emptyset & \emptyset & \emptyset \\ a_2 & b_2 & C_2 & \emptyset & \emptyset & \emptyset \\ \emptyset & \ddots & \ddots & \ddots & \emptyset & \emptyset \\ \emptyset & \emptyset & \ddots & \ddots & \ddots & \emptyset \\ \emptyset & \emptyset & \emptyset & a_{n-1} & b_{n-1} & C_{n-1} \\ \emptyset & \emptyset & \emptyset & \emptyset & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

Выразим из первого уравнения x_1 :

$$x_1 = \alpha_1 x_2 + \beta_1$$

$$\alpha_1 = -\frac{C_1}{b_1}, \quad \beta_1 = \frac{d_1}{b_1}$$

Подставим x_1 во второе уравнение и выразим x_2 :

$$x_2 = \alpha_2 x_3 + \beta_2$$

$$\alpha_2 = -\frac{C_2}{b_2 + \alpha_1 a_2}, \quad \beta_2 = \frac{d_2 - a_2 \beta_1}{b_2 + \alpha_1 a_2}$$

$$x_n = \beta_n = \frac{d_n - a_n \beta_{n-1}}{b_n + a_n \alpha_{n-1}}$$

Алгоритм метода.

I. Прямая прогонка – вычисление прогоночных коэффициентов α_k и β_k по следующим формулам:

$$k = 1: \quad \gamma_1 = b_1, \quad \alpha_1 = -\frac{C_1}{\gamma_1}, \quad \beta_1 = \frac{d_1}{\gamma_1}$$

$$k = \overline{2, (n-1)}: \quad \gamma_k = b_k + a_k \alpha_{k-1}, \quad \alpha_k = -\frac{C_k}{\gamma_k}, \quad \beta_k = \frac{d_k - a_k \beta_{k-1}}{\gamma_k}$$

$$k = n: \quad \gamma_n = b_n + a_n \alpha_{n-1}, \quad \beta_n = \frac{d_n - a_n \beta_{n-1}}{\gamma_n}$$

II. Обратная прогонка – вычисление неизвестных $x_n, x_{n-1} \dots$ по следующим формулам:

$$x_n = \beta_n$$

$$x_k = \beta_k + \alpha_k x_{k+1}, \quad k = (n-1), (n-2), \dots, 1$$

Теорема (достаточное условие применимости метода прогонки):

Пусть коэффициенты СЛАУ удовлетворяют условию диагонального преобладания (модуль элемента, стоящего на главной диагонали, больше или равен сумме модулей элементов в этой строке: $|b_k| \geq |a_k| + |C_k|$, $k = \overline{1, n}$), причём хотя бы для одного значения k выполняется строгое неравенство, тогда алгоритм метода прогонки корректен, $\gamma_k \neq 0, \forall k = \overline{1, n}$, и устойчив, $|\alpha_k| \leq 1, \forall k = \overline{1, n}$.

Пример. Проверить выполнение достаточных условий и решить систему методом прогонки.

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = -1 \\ 2x_1 - 4x_2 + x_3 = -8 \\ 2x_2 - 3x_3 = -14 \end{cases}$$

Проверка достаточных условий:

$$\begin{cases} k = 1: 2 > |-1| + 0 \\ k = 2: |-4| > 2 + 1 \\ k = 3: |-3| > 2 + 0 \end{cases}$$

Решение системы:

1). Прямая прогонка.

$$\gamma_1 = b_1 = 2, \quad \alpha_1 = -\frac{C_1}{\gamma_1} = -\frac{-1}{2} = \frac{1}{2}, \quad \beta_1 = \frac{d_1}{\gamma_1} = \frac{-1}{2} = -\frac{1}{2}$$

$$\gamma_2 = b_2 + a_2\alpha_1 = -4 + 2 \cdot \frac{1}{2} = -3$$

$$\alpha_2 = -\frac{C_2}{b_2 + \alpha_1 a_2} = -\frac{C_2}{\gamma_2} = -\frac{1}{-3} = \frac{1}{3}$$

$$\beta_2 = \frac{d_2 - a_2\beta_1}{\gamma_2} = \frac{-8 - 2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)}{-3} = \frac{7}{3}$$

$$\gamma_3 = b_3 + a_3\gamma_2 = -3 + 2 \cdot \frac{1}{3} = -\frac{7}{3}$$

$$\beta_3 = \frac{d_3 - a_3\beta_2}{\gamma_3} = \frac{-14 - 2 \cdot \frac{7}{3}}{-\frac{7}{3}} = 8$$

2). Обратная прогонка.

$$x_3 = \beta_3 = 8$$

$$x_2 = \beta_2 + \alpha_2 x_3 = \frac{7}{3} + \frac{1}{3} \cdot 8 = 5$$

$$x_1 = \beta_1 + \alpha_1 x_2 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot 5 = 2$$

Итерационные методы решения СЛАУ.

I. Метод Якоби.

Рассмотрим СЛАУ $Ax = b$ с невырожденной квадратной матрицей. Приведём систему к виду, удобному для итерации. Для этого выразим неизвестное x_i из i -го уравнения.

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left| b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} a_{ij} x_j \right|, \quad a_{ii} \neq 0$$

В результате получим следующую систему:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \beta_{12} & \beta_{13} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & 0 & \beta_{23} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & 0 & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & 0 & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \end{pmatrix}$$
$$\beta_{ij} = \begin{cases} -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, & j \neq i; \\ 0, & j = i, \quad i, j = \overline{1, n} \end{cases}$$

Обозначим через B матрицу с элементами β_{ij} :

$B = (\beta_{ij})$ – матрица $n \times n$, тогда в матричной форме система примет вид $x = Bx + C$.

Выберем начальное приближение $x^{(0)}$ и подставим его в правую часть системы $x = Bx + C$.

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \dots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

Вычисляя полученное выражение, находим первое приближение:

$$x^{(1)} = Bx^{(0)} + C, \text{ и т.д.}$$

В результате получим приближённую формулу:

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

Теорема (достаточное условие сходимости):

Пусть норма матрицы B меньше единицы: $\|B\| < 1$. Тогда

- 1). Решение \bar{x} системы $x = Bx + C$ существует и единственно;
- 2). При любом начальном приближении $x^{(0)}$ метод Якоби сходится, и справедлива следующая оценка погрешности:

$$\|x^{(n)} - \bar{x}\| \leq \|B\|^n \|x^{(0)} - \bar{x}\|$$

Замечание 1: в качестве нормы можно применить любую из норм 1 или inf.

Замечание 2: условие $\|B\| < 1$ означает, что матрица A системы $Ax = b$ удовлетворяет условию диагонального преобладания.

При условии $\|B\| < 1$ метод Якоби сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q = \|B\|$

Апостериорная оценка погрешности: если норма $\|B\| < 1$, то справедлива следующая апостериорная оценка погрешности:

$$\|x^{(n)} - \bar{x}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|B\|} \|x^{(n)} - x^{(n-1)}\|$$

Критерий окончания итерационного процесса.

Пусть требуется найти решение системы $x = Bx + C$ с точностью ε , тогда из апостериорной оценки погрешности получаем, что вычисления следует вести до выполнения следующего неравенства:

$$\|x^{(n)} - x^{(n-1)}\| < \varepsilon_1, \text{ где } \varepsilon_1 = \frac{1 - \|B\|}{\|B\|} \varepsilon.$$

1).

$$\|B\| \leq \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{1 - \|B\|}{\|B\|} \geq 1 \Rightarrow \varepsilon_1 \geq \varepsilon$$

В этом случае можно применить критерий $\|x^{(n)} - x^{(n-1)}\| < \varepsilon$.

2).

$$\|B\| \approx 1 \Rightarrow \frac{1 - \|B\|}{\|B\|} \ll 1 \Rightarrow \varepsilon_1 \ll \varepsilon$$

В этом случае применение критерия $\|x^{(n)} - x^{(n-1)}\| < \varepsilon$ приведёт к преждевременному окончанию итерационного процесса, т.е. заменять ε_1 на ε .

Величина $\|x^{(n)} - x^{(n-1)}\|$ оказывается малой вследствие медленной сходимости метода, а не вследствие хорошего приближения $x^{(n-1)}$ и $x^{(n)}$ к решению.

II. Метод Зейделя.

Этот метод представляет собой модификацию метода Якоби.

Представим матрицу B в виде суммы нижней и верхней треугольных матриц: $B = B_1 + B_2$, тогда расчётная формула метода Зейделя примет следующий вид:

$$x^{(k+1)} = B_1 x^{(k+1)} + B_2 x^{(k)} + C, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

На $(k + 1)$ -ой итерации компоненты вектора $x^{(k+1)}$ находятся по следующим формулам:

$$x_1^{(k+1)} = \beta_{12}x_2^{(k)} + \beta_{13}x_3^{(k)} + \beta_{14}x_4^{(k)} + \dots + \beta_{1n}x_n^{(k)} + C_1$$

$$x_2^{(k+1)} = \beta_{21}x_1^{(k+1)} + \beta_{23}x_3^{(k)} + \beta_{24}x_4^{(k)} + \dots + \beta_{2n}x_n^{(k)} + C_2$$

$$x_3^{(k+1)} = \beta_{31}x_1^{(k+1)} + \beta_{32}x_2^{(k+1)} + \beta_{34}x_4^{(k)} \dots + \beta_{3n}x_n^{(k)} + C_3$$

Теорема. Достаточное условие сходимости метода Зейделя:

Пусть $\|B\| < 1$, тогда при любом выборе начального приближения $x^{(0)}$ метод Зейделя сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q \leq \|B\|$.

Теорема об оценке погрешности: пусть сумма норм матриц B_1 и B_2 меньше единицы: $\|B_1\| + \|B_2\| < 1$, тогда при любом выборе начального приближения метод Зейделя сходится и справедлива следующая оценка погрешности: $\|x^{(n)} - \bar{x}\| \leq q^n \|x^{(0)} - \bar{x}\|$,

$$q = \frac{\|B_2\|}{1 - \|B_1\|} < 1$$

Теорема: пусть A – симметрическая положительно определённая матрица системы $Ax = b$, тогда при любом выборе начального приближения $x^{(0)}$ метод Зейделя сходится со скоростью геометрической прогрессии.

Если матрица исходной системы симметрическая положительно определённая, рекомендуется использовать метод Зейделя, для систем с диагональным преобладанием – метод Якоби.

Апостериорная оценка погрешности.

Если $\|B\| < 1$, тогда

$$\|x^{(n)} - \bar{x}\| \leq \frac{\|B_2\|}{1 - \|B\|}.$$

Критерий окончания итерационного процесса:

$$\|x^{(n)} - x^{(n-1)}\| < \varepsilon_2, \text{ где}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1 - \|B\|}{\|B_2\|} \varepsilon.$$

Геометрическая интерпретация метода Зейделя.

Система $Ax = b$ в координатной форме для случая $n = 2$:

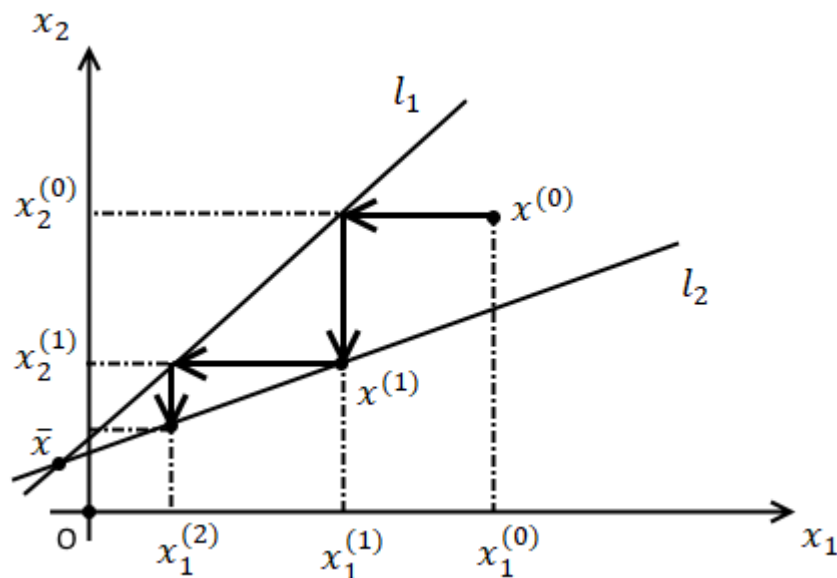
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$

Эти два уравнения задают на плоскости две прямые. Приведём систему к виду, удобному для итерации.

$$\begin{cases} x_1 = -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2 = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 + \frac{b_2}{a_{22}} \end{cases}$$

Зададим начальное приближение $x^{(0)}$:

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \end{pmatrix}$$



$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \beta_{12}x_2^{(k)} + C_1 \\ x_2^{(k+1)} = \beta_{21}x_1^{(k+1)} + C_2 \end{cases}$$

$$x_1^{(1)} = \beta_{12}x_2^{(0)} + C_1 = -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2^{(0)} + \frac{b_1}{a_{11}}$$

$x_1^{(1)}$ – абсцисса точки пересечения двух прямых: l_1 и прямой $x_2 = x_2^{(0)}$

$$x_2^{(1)} = \beta_{21}x_1^{(1)} + C_2 = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1^{(1)} + \frac{b_2}{a_{22}}$$

$x_2^{(1)}$ – ордината точки пересечения двух прямых: l_2 и прямой $x_1 = x_1^{(1)}$

Пример. Привести систему к виду, удобному для проведения итераций по методу Зейделя. Проверить достаточное условие сходимости метода и дать геометрическую интерпретацию, построив первое и второе приближения.

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 5 \\ -x_1 + 5x_2 = 5 \end{cases}$$

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 2,5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 0,5x_2^{(k)} + 2,5 \\ x_2^{(k+1)} = 0,2x_1^{(k+1)} + 1 \end{cases}$$

$$\|B\| < 1$$

1).

$$\|B\|_1 = \max\{0,2; 0,5\} = 0,5 < 1$$

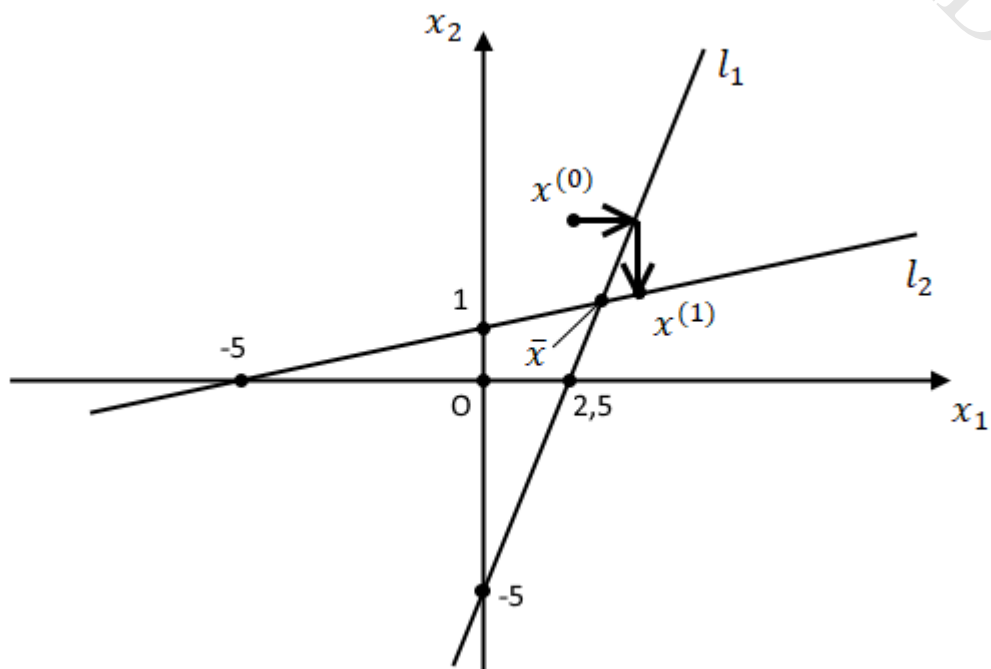
2).

$$\|B\|_\infty = \max\{0,5; 0,2\} = 0,5 < 1$$

$$\begin{cases} x_1^{(1)} = 0,5x_2^{(0)} + 2,5 = 3,5 \\ x_2^{(1)} = 0,2x_1^{(1)} + 1 = 1,7 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(2)} = 0,5x_2^{(1)} + 2,5 = 3,35 \\ x_2^{(2)} = 0,2x_1^{(2)} + 1 = 1,67 \end{cases}$$

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} 10/3 \\ 5/3 \end{pmatrix}$$



Замечание: существует устойчивое заблуждение, связанное с представлением о том, что метод Зейделя сходится быстрее, чем метод Якоби. Это действительно так, если матрица A симметрична и положительно определена. Однако в общем случае возможны ситуации, когда метод Якоби сходится, а метод Зейделя сходится медленнее или вообще расходится. Возможна и противоположная ситуация.

Эти методы ориентированы на решение разных классов систем: метод Якоби – для системы с матрицами, близкими к диагональным, а метод Зейделя – для системы с матрицами, близкими к нижним треугольным.

Методы отыскания решений нелинейных уравнений.

Решением уравнения $f(x) = 0$ называют значение \bar{x} , при котором $f(\bar{x}) = 0$.

Корень \bar{x} уравнения $f(\bar{x}) = 0$ называют простым корнем, если значение производной $f'(\bar{x}) \neq 0$.

Если $f'(\bar{x}) = 0$, то корень \bar{x} называют кратным.

Целое число m называют кратностью корня \bar{x} , если все производные до $(m - 1)$ -го порядка обращаются в ноль: $f^{(k)}(\bar{x}) = 0$, $k = \overline{1, m - 1}$, а $f^{(m)}(\bar{x}) \neq 0$.

Отрезком локализации называют отрезок, содержащий только один корень уравнения $f(x) = 0$.

Теорема: пусть функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ и принимает на концах этого отрезка значения разных знаков: $f(a)f(b) < 0$, тогда этот отрезок содержит, по крайней мере, один корень уравнения $f(x) = 0$.

Эту теорему нельзя применить в случае корня чётной кратности.

Способы локализации корней.

1). Табулирование функции, т.е. составление таблицы.

x_i	x_1	x_2	...	x_n
$y_i = f(x_i)$	y_1	y_2	...	y_n

Если $y_{i-1} \cdot y_i < 0 \Rightarrow [x_{i-1}, x_i]$, тогда отрезок $[x_{i-1}, x_i]$ содержит, по крайней мере, один корень уравнения $f(x) = 0$.

2). Графический метод.

Преобразуем уравнение $f(x) = 0$ к виду $f_1(x) = f_2(x)$ и построим графики этих функций, тогда абсциссы точек пересечения этих графиков являются корнями уравнения $f(x) = 0$.

Сходимость итерационного метода.

Пусть $\{x^{(n)}\}_{n \geq 0}$ – это итерационная последовательность приближений к корню \bar{x} .

Итерационный метод называют одношаговым, если для вычисления приближения $x^{(n+1)}$ используется только одно предыдущее приближение $x^{(n)}$.

Итерационный метод называют k -шаговым, если для вычисления приближения $x^{(n+1)}$ используют k предыдущих приближений $x^{(n)}, x^{(n-1)}, \dots, x^{(n-(k-1))}$.

Метод сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q < 1$, если оценка $\{x^{(n)} - \bar{x}\} \leq c \cdot q^n$ для $\forall n$.

Пусть одношаговый итерационный метод обладает следующим свойством: $\exists \delta$ – окрестность корня \bar{x} такая, что если $x^{(n)} \in U_\delta$, то $|x^{(n+1)} - \bar{x}| \leq C|x^{(n)} - \bar{x}|^p$, где $C > 0$ и $p \geq 1$. При этом число p называется порядком сходимости метода. В частности, если $p = 1$, то $C < 1$, метод обладает линейной скоростью сходимости.

Теорема: пусть одношаговый итерационный метод обладает линейной скоростью сходимости в некоторой δ окрестности U_δ корня \bar{x} , тогда при любом выборе начального приближения $\forall x^{(0)} \in U_\delta$ итерационная последовательность $\{x^{(n)}\}_{n \geq 1}$ не выходит за пределы этой окрестности и, кроме того, метод сходится со скоростью геометрической прогрессии и имеет место следующая оценка погрешности:

$$|x^{(n)} - \bar{x}| \leq q^n |x^{(0)} - \bar{x}|, \quad n \geq 0.$$

Метод простой итерации.

Постановка задачи: с заданной точностью $\varepsilon > 0$ найти корень \bar{x} уравнения $f(x) = 0$.

Преобразуем это уравнение к виду, удобному для итерации: $x = \varphi(x)$, где φ – итерационная функция. Пусть $x^{(0)}$ – начальное приближение. Примем за первое приближение $x^{(1)} = \varphi(x^{(0)})$, и т.д. Тогда $x^{(n+1)} = \varphi(x^{(n)})$, $n \geq 0$.

Этот метод является одношаговым (для нахождения последующего приближения необходимо знать только одно предыдущее приближение)

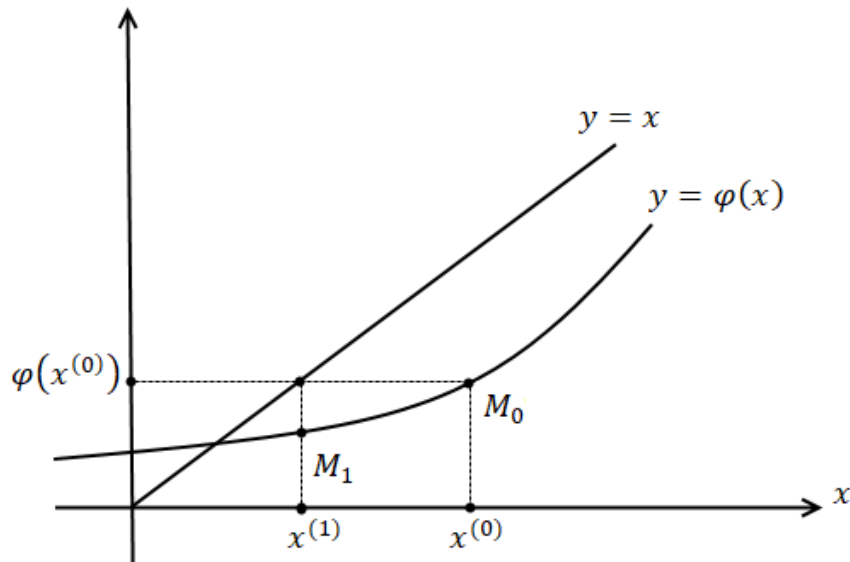
Если φ – непрерывная функция и $\exists \lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)} = \bar{x}$, то, переходя к пределу, получаем $\bar{x} = \varphi(\bar{x})$, т.е. \bar{x} – корень уравнения $x = \varphi(x)$.

Геометрическая интерпретация.

Пусть $x^{(0)}$ – начальное приближение. Вычислим значение $\varphi(x^{(0)})$. $x^{(1)}$ – абсцисса точки пересечения $y = x$ и $y = \varphi(x^{(0)})$. Вычислим значение $\varphi(x^{(1)})$.

$x^{(2)}$ – абсцисса точки пересечения $y = x$ и $y = \varphi(x^{(1)})$, и т.д.

Абсциссы точек $M_n(x^{(n)}, \varphi(x^{(n)}))$ представляют собой последовательные приближения $x^{(n)}$ к корню \bar{x} .



Теорема о сходимости: пусть в некоторой δ окрестности корня \bar{x} функция $\varphi(x)$ дифференцируема и удовлетворяет следующему условию: $|\varphi'(x)| \leq q$, $0 \leq q < 1$, тогда при выборе любого начального приближения из указанной окрестности корня $\forall x^{(0)} \in U_\delta$:

- 1). Итерационная последовательность $\{x^{(n)}\}_{n \geq 1}$ не выходит из этой окрестности;
- 2). Метод сходится со скоростью геометрической прогрессии, и справедлива следующая оценка: $|x^{(n)} - \bar{x}| \leq q^n |x^{(0)} - \bar{x}|$.

Теорема об апостериорной оценке погрешности: пусть выполнены все условия предыдущей теоремы, тогда справедлива следующая оценка:

$$|x^{(n)} - \bar{x}| \leq \frac{q}{1-q} |x^{(n)} - x^{(n-1)}|, \quad n \geq 1.$$

Критерий окончания итерационного процесса: пусть требуется найти решение уравнения $f(x) = 0$ с точностью $|x^{(n)} - \bar{x}| < \varepsilon$, тогда вычисления следует проводить до выполнения следующего неравенства:

$$|x^{(n)} - x^{(n-1)}| < \frac{q}{1-q} \varepsilon, \text{ и затем положить } \bar{x} \approx x^{(n)}.$$

Процедура приведения уравнения $f(x) = 0$ к виду, удобному для итерации:

Пусть производная $f' > 0$ и непрерывна на $[a, b]$, тогда существуют положительные постоянные $\exists m > 0, M > 0$ такие, что $0 < m \leq f'(x) \leq M$ при $x \in [a, b]$.

Приведём уравнение $f(x) = 0$ к виду $x = x - \alpha f(x)$, где $\alpha > 0$.

Итерационная функция φ в этом случае имеет вид $\varphi(x) = x - \alpha f(x)$.

$$|\varphi'(x)| \leq q, \quad 0 \leq q < 1$$

$$\varphi'(x) = 1 - \alpha f(x)$$

$$\alpha m \leq 1 - \varphi'(x) \leq \alpha M$$

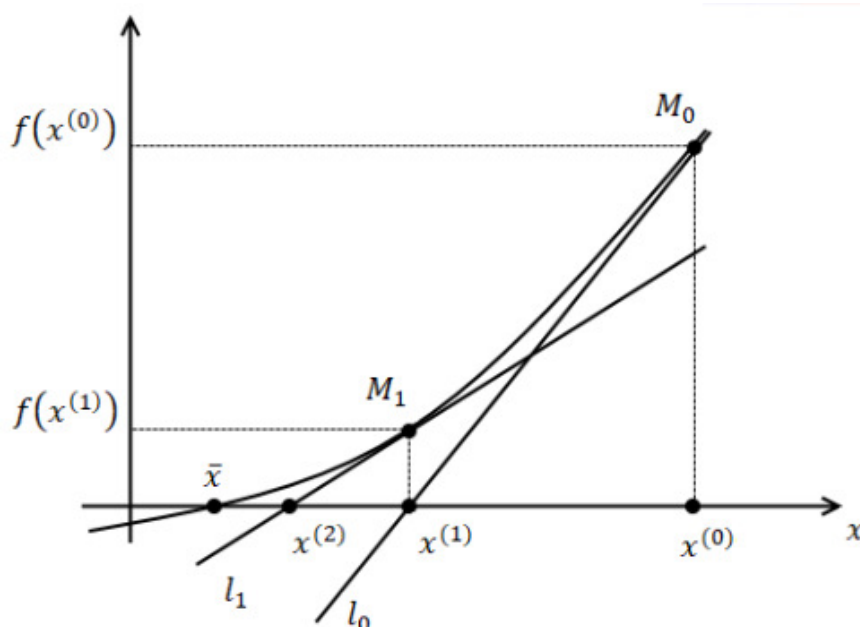
$$1 - \alpha m \geq \varphi'(x) \geq 1 - \alpha M$$

$$|\varphi'(x)| \leq \max\{|1 - \alpha m|, |1 - \alpha M|\} \equiv q(\alpha)$$

$$q(\alpha) < 1, \Rightarrow \alpha \in \left(0, \frac{2}{M}\right)$$

Метод Ньютона (метод касательных).

Пусть $x^{(0)}$ – начальное приближение корня \bar{x} . Вычислим значение функции f в точке $x^{(0)}$, в результате получим точку $M_0(x^{(0)}, f(x^{(0)}))$. Обозначим через l_0 касательную, проведённую к графику функции $y = f(x)$ в точке M_0 . Найдём $x^{(1)}$ – абсциссу точки пересечения касательной l_0 с осью Ох, и вычислим значение f в точке $x^{(1)}$. Получим точку $M_1(x^{(1)}, f(x^{(1)}))$. Проведём касательную l_1 к графику функции $y = f(x)$ в точке M_1 . Найдём $x^{(2)}$ – абсциссу точки пересечения касательной l_1 с осью Ох. Получим точку M_2 с координатами $M_2(x^{(2)}, f(x^{(2)}))$. И так далее.



Вывод расчётной формулы. Уравнение касательной l_n , проведённой к графику функции $y = f(x)$ в точке $M_n(x^{(n)}, f(x^{(n)}))$, имеет вид $y = f(x^{(n)}) + (x - x^{(n)})f'(x^{(n)})$.

Координаты точки пересечения касательной l_n с осью Ox : $x = x^{(n+1)}, y = 0$. Подставляя их в уравнение касательной, получаем расчётную формулу метода:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(n)})}, \quad n \geq 0$$

Теорема о сходимости: пусть \bar{x} – простой корень уравнения $f(x) = 0$, в некоторой окрестности которого функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема. Тогда $\exists U_\delta = (\bar{x} - \delta, \bar{x} + \delta)$, такая, что при любом выборе начального приближения $\forall x^{(0)} \in U_\delta$ итерационная последовательность $\{x^{(n)}\}_{n \geq 1}$ метода Ньютона не выходит за пределы этой окрестности, и справедлива следующая оценка:

$$|x^{(n+1)} - \bar{x}| \leq C |x^{(n)} - \bar{x}|^2, \quad n \geq 0, \text{ где } C = \frac{1}{\delta}.$$

Теорема об апостериорной оценке погрешности: пусть выполнены все условия предыдущей теоремы, тогда справедлива следующая оценка:

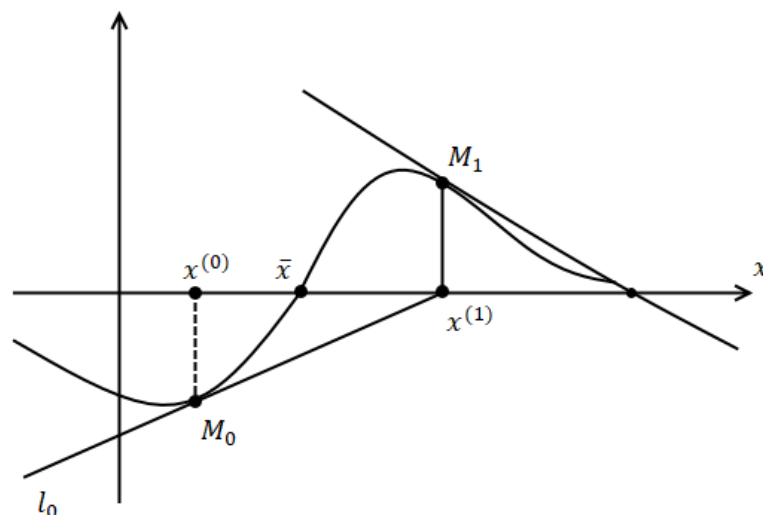
$$|x^{(n)} - \bar{x}| \leq |x^{(n)} - x^{(n-1)}|, \quad \forall n \geq 1.$$

Критерий окончания итерационного процесса: при требуемой точности решения ε вычисления проводят до выполнения следующего неравенства: $|x^{(n)} - x^{(n-1)}| < \varepsilon$, и при этом полагают $\bar{x} \approx x^{(n)}$.

Замечания:

1). Сложность применения метода Ньютона состоит в необходимости вычисления производной.

2). При использовании метода Ньютона необходимо помнить, что метод обладает локальной сходимостью. Неудачный выбор начального приближения $x^{(0)}$ может привести к расходимости последовательности.



Замечание: модификацией метода Ньютона является упрощённый метод Ньютона.

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(0)})}, \quad n \geq 0$$

Отличие от метода Ньютона: в точке M_0 проводим касательную l_0 к графику функции $y = f(x)$, а в точках M_n проводим прямые, параллельные касательной l_0 .

Метод имеет линейную скорость сходимости.

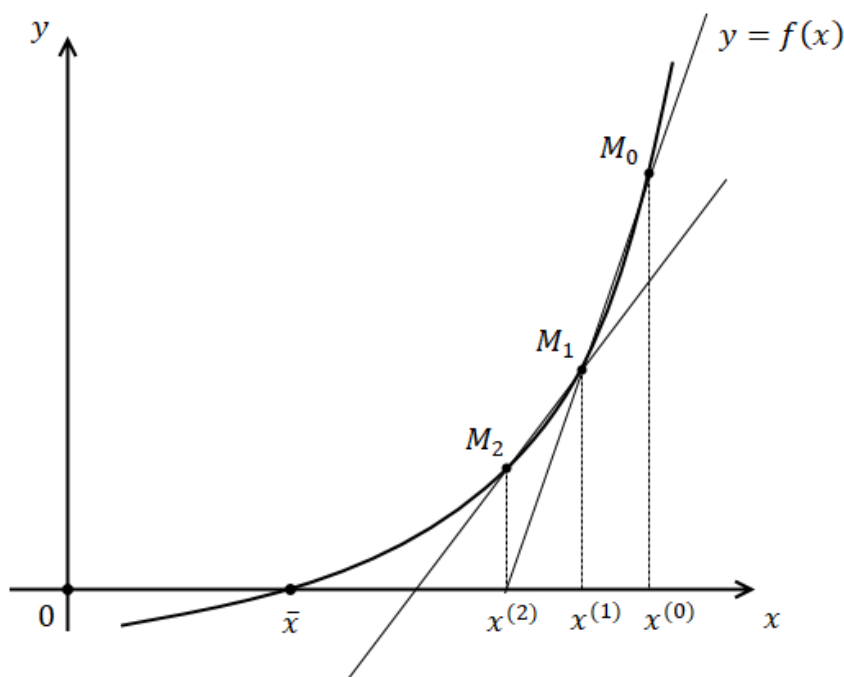
Метод секущих.

Этот метод является двухшаговым. Запишем расчётную формулу метода Ньютона и заменим производную следующим выражением:

$$f'(x^{(n)}) = \frac{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})}{x^{(n)} - x^{(n-1)}}$$

В результате получим расчётную формулу метода секущих:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{f(x^{(n)}) - f(x^{(n-1)})} \cdot f(x^{(n)}), \quad n \geq 1$$



Теорема о сходимости: пусть \bar{x} – простой корень уравнения $f(x) = 0$, в некоторой окрестности которого функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема, причём значение второй производной в этой точке отлично от нуля: $f''(\bar{x}) \neq 0$, тогда $\exists \delta$ – окрестность U_δ корня \bar{x} , такая, что при произвольном выборе начальных приближений из этой окрестности $\forall x^{(0)}, x^{(1)} \in U_\delta$ метод секущих сходится с порядком $p = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$.

Имеет место следующая оценка погрешности:

$$|x^{(n+1)} - \bar{x}| \leq C |x^{(n)} - \bar{x}|^{\frac{\sqrt{5}+1}{2}}, \quad \forall n \geq 1$$

Замечание: метод обладает локальной сходимостью, т.е. при неудачном выборе начальных приближений $x^{(0)}$ и $x^{(1)}$ может расходиться.

Метод половинного деления (метод бисекции).

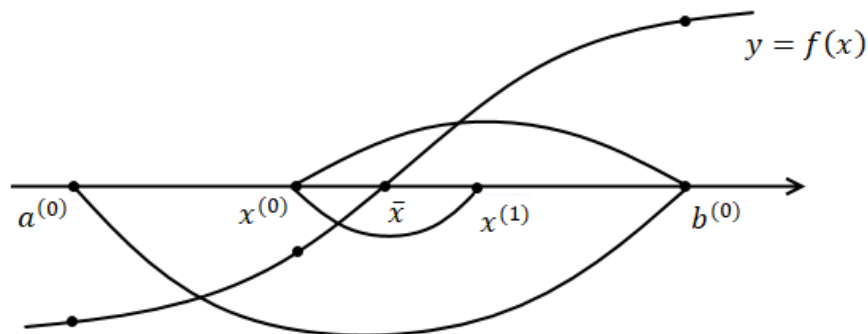
Пусть найдены такие точки a и b , что функция $f(x)$ в этих точках принимает значения разных знаков: $f(a)f(b) < 0$. Это означает, что отрезок $[a, b]$ содержит, по крайней мере, один корень уравнения $f(x) = 0$.

Обозначим через $a^{(0)} = a, b^{(0)} = b$ и примем за приближённое значение корня середину этого отрезка:

$$x^{(0)} = \frac{a^{(0)} + b^{(0)}}{2}$$

Затем вычислим значение функции в этой точке $f(x^{(0)})$.

Из двух половин отрезка $[a^{(0)}, x^{(0)}]$ и $[x^{(0)}, b^{(0)}]$ выбираем ту половину, на концах которой функция $f(x)$ имеет разные знаки. Новый отрезок обозначаем через $[a^{(1)}, b^{(1)}]$.



Алгоритм метода.

Пусть на n -ом шаге найден отрезок локализации $[a^{(n)}, b^{(n)}]$ и вычислены значения функции в этих точках $f(a^{(n)}), f(b^{(n)})$.

Примем за приближённое значение корня середину отрезка $[a^{(n)}, b^{(n)}]$:
 $x^{(n)} = \frac{a^{(n)} + b^{(n)}}{2}$ и вычислим значение функции в этой точке $f(x^{(n)})$.

Если $f(a^{(n)}) \cdot f(x^{(n)}) \leq 0$, выбираем левую половину отрезка, тогда $a^{(n+1)} = a^{(n)}, b^{(n+1)} = x^{(n)}$.

Иначе выбираем правую половину отрезка, тогда $a^{(n+1)} = x^{(n)}, b^{(n+1)} = b^{(n)}$.

Затем вычисляем приближённое значение корня как середину этого отрезка:

$$x^{(n+1)} = \frac{a^{(n+1)} + b^{(n+1)}}{2}$$

Погрешность приближения $x^{(n)}$ к корню \bar{x} не превышает половины длины отрезка $[a^{(n)}, b^{(n)}]$:

$$|x^{(n)} - \bar{x}| \leq \frac{b^{(n)} - a^{(n)}}{2} = \frac{b - a}{2^{n+1}}$$

Это означает, что метод сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q = \frac{1}{2}$.

Критерий окончания итерационного процесса. Если требуется найти корень с точностью ε : $|x^{(n)} - \bar{x}| \leq \varepsilon$, то итерации следует продолжать до тех пор, пока не будет выполнено следующее неравенство: $b^{(n)} - a^{(n)} \leq 2\varepsilon$.

Замечание: метод неприменим в случае корня чётной кратности.

Интерполяция функции.

1). Постановка задачи.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана сетка: $w = \{a \equiv x_0 < x_1 < \dots < x_n \equiv b\}$, и в узлах x_i этой сетки заданы значения y_i функции $f(x)$:

$$y_i = f(x_i), \quad i = \overline{0, n}$$

Требуется построить интерполянту – функцию $g(x)$, совпадающую с функцией $f(x)$ в узлах сетки:

$$g(x_i) = y_i, \quad i = \overline{0, n}$$

Интерполирующую функцию $g(x)$ строят в виде линейной комбинации некоторых элементарных функций:

$$g(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x),$$

где

a_k – неизвестные коэффициенты, $\varphi_k(x)$ – линейно независимые функции.

Из условий $g(x_i) = y_i$ получаем систему из $(n + 1)$ уравнения относительно коэффициентов a_k :

$$\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) = y_i, \quad i = \overline{0, n} \quad (1)$$

Метод решения задачи, при котором коэффициенты a_k определяются непосредственным решением системы (1), называется методом неопределённых коэффициентов. Запишем определитель системы (1):

$$\Delta(\varphi) = \begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \dots & \varphi_n(x_0) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(x_n) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix}$$

Предположим, что система функций $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ такова, что при любом выборе узлов x_i (лишь бы среди них не было совпадающих) определитель системы отличен от нуля: $\Delta\varphi \neq 0$, тогда по заданным значениям $y_i, i = \overline{0, n}$ однозначно определяются коэффициенты $a_k, k = \overline{0, n}$.

2). Полиномиальная интерполяция. Многочлен Лагранжа.

Будем искать функцию $g(x)$ в виде многочлена степени n : $g(x) = P_n(x)$.

Многочлен $P_n(x)$ степени n называют интерполяционным многочленом, если он удовлетворяет следующему условию: $P(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}$. В результате получим систему относительно коэффициентов a_k :

$$a_0 + a_1 x_i + \dots + a_n x_i^n = y_i, \quad i = \overline{0, n} \quad (2)$$

Определитель Вандерморта:

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j) \neq 0$$

Определитель отличен от нуля, если узлы интерполяции x_i попарно различны. Следовательно, система (2) всегда имеет решение и притом единственное. Это доказывает существование и единственность интерполяционного многочлена.

Теорема: существует единственный интерполяционный многочлен степени n , удовлетворяющий условию: $P_n(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}$.

Одной из форм записи интерполяционного многочлена является многочлен Лагранжа. Пусть система функций $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ удовлетворяет следующему условию:

$$\varphi_k(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{при } i = k \\ 0 & \text{при } i \neq k \end{cases}$$

Тогда многочлен вида $g(x)$ будет являться искомым интерполяционным многочленом. Покажем, что

$$g(x_i) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \varphi_k(x_i)$$

Все слагаемые в этой сумме обращаются в ноль, кроме слагаемого $k = i$. Тогда $g(x_i) = f(x_i) \varphi_i(x_i) = f(x_i) = y_i$.

Заметим, что $\varphi_k(x) = 0$ при $i \neq k$, поэтому $\varphi_k(x)$ делится на $(x - x_i)$ при $i \neq k$.

$$\begin{aligned} \varphi_k(x) &= \text{const}(x - x_0) \dots (x - x_{k-1}) \dots (x - x_{k+1}) \dots (x - x_n) = \\ &= \text{const} \prod_{i \neq k} (x - x_i) \end{aligned}$$

Из условия $\varphi_k(x_k) = 1$ находим значение константы:

$$\text{const} = \frac{1}{\prod_{i \neq k} (x_k - x_i)}$$

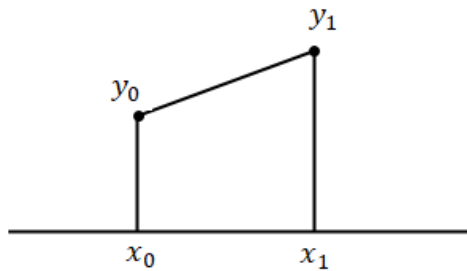
$$\varphi_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

$$g(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Полученный многочлен называется интерполяционным многочленом Лагранжа и обозначается $L_n(x)$.

Частные случаи:

1). Линейная интерполяция.



$$L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

2). Квадратичная интерполяция.

$$L_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

Теорема (о погрешности интерполяции):

Пусть функция $f(x)$ дифференцируема $(n + 1)$ раз на отрезке $[a, b]$, причём $x_i \in [a, b]$, $i = \overline{0, n}$. Тогда для погрешности интерполяции в любой точке $\forall x \in [a, b]$ справедливо равенство

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j), \quad \xi \in (a, b)$$

Замечание: так как ξ неизвестно, то на практике применяют следствие из этой теоремы. В условиях предыдущей теоремы

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n |x - x_j|,$$

где M_{n+1} – наибольшее значение модуля $(n+1)$ -ой производной на этом отрезке.

$$M_{n+1} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|$$

Замечание: если интерполяция используется для вычисления значения функции $f(x)$ в точке x , не принадлежащей отрезку $[a, b]$, то в этом случае говорят об экстраполяции.

Пример.

Функция $y = \ln x$ задана таблицей значений:

x_i	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4
$y_i = \ln x_i$	0	0,095310	0,182322	0,262364	0,336472

Вычислить значение функции в точке $x = 1,23$, используя линейную и квадратичную интерполяцию, оценить погрешность вычисления.

1). Линейная интерполяция.

Многочлен Лагранжа первой степени:

$$L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

Выбираем узлы сетки, ближайшие к точке $x = 1,23$:

$$x_0 = 1, \quad x_1 = 1,3$$

$$L_1(1,23) = 0,182322 \cdot \frac{1,23 - 1,3}{1,2 - 1,3} + 0,262364 \cdot \frac{1,23 - 1,2}{1,3 - 1,2} = 0,206335$$

Оценим погрешность, используя следствие из теоремы о погрешности интерполяции:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= |\ln(1,23) - L_1(1,23)| \leq \frac{M_2}{2!} \prod_{j=0}^1 |1,23 - x_j| = \\ &= \frac{0,69}{2} |(1,23 - 1,2)(1,23 - 1,3)| \approx 7,3 \cdot 10^{-4} \\ (M_2 &= \max_{x \in [1,2;1,3]} |\ln''(x)| = \max_{x \in [1,2;1,3]} \frac{1}{x^2} = \frac{1}{(1,2)^2} \approx 0,69) \end{aligned}$$

2). Квадратичная интерполяция.

$$L_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

Узлы сетки, ближайшие к точке $x = 1,23$:

$$x_0 = 1,1, \quad x_1 = 1,2, \quad x_2 = 1,3.$$

$$\begin{aligned} L_2(1,23) &= 0,095310 \cdot \frac{(1,23 - 1,2)(1,23 - 1,3)}{(1,1 - 1,2)(1,1 - 1,3)} + 0,182322 \cdot \frac{(1,23 - 1,1)(1,23 - 1,3)}{(1,2 - 1,1)(1,2 - 1,3)} + \\ &+ 0,262364 \cdot \frac{(1,23 - 1,1)(1,23 - 1,2)}{(1,3 - 1,1)(1,3 - 1,2)} \approx 0,207066. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_2 &= |\ln(1,23) - L_2(1,23)| \leq \frac{M_3}{3!} \prod_{j=0}^2 |1,23 - x_j| = \\ &= \frac{1,5}{3!} |(1,23 - 1,1)(1,23 - 1,2)(1,23 - 1,3)| \approx 6,9 \cdot 10^{-5} \\ (M_3 &= \max_{x \in [1,1;1,3]} |\ln'''(x)| = \max_{x \in [1,1;1,3]} \frac{2}{x^3} = \frac{2}{(1,1)^3} \approx 1,5)\end{aligned}$$

Интерполяционный многочлен Ньютона с разделёнными разностями.

Пусть функция $f(x)$ задана таблицей своих значений:

x_i
$y_i = f(x_i)$

Разделённая разность первого порядка определяется следующим образом:

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

Разделённая разность второго порядка определяется через разделённую разность первого порядка:

$$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}$$

Разделённая разность k -ого порядка определяется через разделённую разность $(k - 1)$ -ого порядка:

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

Свойства разделённой разности:

1). Она является симметричной функцией своих аргументов, то есть не меняется при любой их перестановке.

Таблицу разделённых разностей записывают следующим образом:

x_0	$f(x_0)$					
		$f(x_0, x_1)$				
x_1	$f(x_1)$		$f(x_0, x_1, x_2)$			
		$f(x_1, x_2)$...		
x_2	$f(x_2)$		
			$f(x_0, \dots, x_n)$
...	
			
x_{n-1}	$f(x_{n-1})$		$f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n)$			
		$f(x_{n-1}, x_n)$				
x_n	$f(x_n)$					

Примечание: нумерация узлов x_i в таблице разделённых разностей произвольная. Необязательно $x_i < x_{i+1}$.

$$P_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \dots +$$

$$+ f(x_0, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) = \sum_{k=0}^n f(x_0, \dots, x_k) w_k(x),$$

$$w_k(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1}).$$

Многочлен вида $P_n(x)$ называют интерполяционным многочленом Ньютона с разделёнными разностями.

Оценка погрешности определяется следующим образом:

$$\varepsilon_n = |f(x) - P_n(x)| = |P_{n+1}(x) - P_n(x)|$$

Пусть вычислен интерполяционный многочлен $P_n(x)$. Для того, чтобы увеличить степень многочлена на единицу, необходимо добавить один узел x_{n+1} .

$$P_{n+1}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} f(x_0, \dots, x_k) w_k(x) = \sum_{k=0}^n f(x_0, \dots, x_n) w_k(x) +$$

$$+ f(x_0, \dots, x_{n+1}) w_{n+1}(x) = P_n(x) + f(x_0, \dots, x_{n+1}) w_{n+1}(x)$$

Пример. Для функции $y = \ln x$ с заданной таблицей (см. предыдущий пример) вычислить разделённые разности до 4-ого порядка включительно, и найти значение логарифма в точке 1,23.

Узлы сетки нумеруем в порядке возрастания расстояния от точки $x = 1,23$.

$$x_0 = 1,2, \quad f(x_0) = 0,182322$$

$$x_1 = 1,3, \quad f(x_1) = 0,262364$$

$$x_2 = 1,1, \quad f(x_2) = 0,095310$$

$$x_3 = 1,4, \quad f(x_3) = 0,336472$$

$$x_4 = 1,0, \quad f(x_4) = 0$$

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = 0,80042$$

$$f(x_1, x_2) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = 0,835270$$

$$f(x_2, x_3) = \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} = 0,803873$$

$$f(x_3, x_4) = \frac{f(x_4) - f(x_3)}{x_4 - x_3} = 0,841180$$

$$f(x_0, x_1, x_2) = \frac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0} = -0,3485$$

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{f(x_2, x_3) - f(x_1, x_2)}{x_3 - x_1} = -0,313970$$

$$f(x_2, x_3, x_4) = \frac{f(x_3, x_4) - f(x_2, x_3)}{x_4 - x_2} = -0,37307$$

$$f(x_0, x_1, x_2, x_3) = \frac{f(x_1, x_2, x_3) - f(x_0, x_1, x_2)}{x_3 - x_0} = 0,17265$$

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{f(x_2, x_3, x_4) - f(x_1, x_2, x_3)}{x_4 - x_1} = 0,197$$

$$f(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{f(x_1, x_2, x_3, x_4) - f(x_0, x_1, x_2, x_3)}{x_4 - x_0} = -0,12175$$

1,2	0,182322				
		0,80042			
1,3	0,262364		-0,3485		
		0,835270		0,17265	
1,1	0,095310		-0,313970		-0,12175
		0,803873		0,197	
1,4	0,336472		-0,37307		
		0,841180			
1,0	0				

Вычисление погрешности.

$$1). P_0(x) = f(x_0) = 0,182322$$

$$2). w_1(x) = x - x_0$$

$$w_1(1,23) = 1,23 - 1,2 = 0,03$$

$$P_1(x) = P_0(x) + f(x_0, x_1)w_1(x)$$

$$P_1(1,23) = 0,182322 + 0,80042(1,23 - 1,2) \approx 0,206335$$

$$\varepsilon_0 = |P_1(1,23) - P_0(x)| = |0,206335 - 0,182322| \approx 2,4 \cdot 10^{-2}$$

$$3). w_2(x) = (x - x_1)w_1(x)$$

$$w_2(1,23) = (x - x_1)w_1(1,23) = (1,23 - 1,3) \cdot 0,03 = -21 \cdot 10^{-4}$$

$$P_2(x) = P_1(x) + f(x_0, x_1, x_2)w_2(x)$$

$$P_2(1,23) = P_1(1,23) + f(x_0, x_1, x_2)w_2(1,23) =$$

$$= 0,206335 - 0,3485 \cdot (-21 \cdot 10^{-4}) \approx -0,205603$$

$$\varepsilon_1 = |P_2(1,23) - P_1(1,23)| \approx -0,205603$$

$$4). w_3(x) = (x - x_2)w_2(x)$$

$$w_3(1,23) = (1,23 - 1,1) \cdot (-21 \cdot 10^{-4}) = -2,73 \cdot 10^{-4}$$

$$P_3(x) = P_2(x) + f(x_0, x_1, x_2, x_3)w_3(x)$$

$$P_3(1,23) = -0,205603 + 0,17265 \cdot (-2,73 \cdot 10^{-4}) \approx -0,20565$$

$$\varepsilon_2 = |P_3(1,23) - P_2(1,23)| = |-0,20565 - (-0,205603)| \approx 0,47 \cdot 10^{-4}$$

$$5). w_4(x) = (x - x_3)w_3(x)$$

$$w_4(1,23) = (1,23 - 1,4) \cdot (-2,73 \cdot 10^{-4}) \approx 0,46 \cdot 10^{-4}$$

$$P_4(x) = P_3(x) + f(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4)w_4(x)$$

$$P_4(1,23) = -0,20565 - 0,12175 \cdot 0,46 \cdot 10^{-4} \approx -0,205644$$

$$\varepsilon_3 = |P_4(1,23) - P_3(1,23)| = |-0,205644 - (-0,20565)| \approx 6 \cdot 10^{-6}$$

Кубическая сплайн-интерполяция.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана сетка: $w = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$

Сплайном степени m называют функцию $S_m(x)$, удовлетворяющую следующим условиям:

- 1). Функция $S_m(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ вместе со всеми своими производными до некоторого порядка p включительно.
- 2). $S_m(x) = P_{m,i}(x)$, $x \in [x_{i-1}, x_i]$

Дефектом сплайна называют разность $(m - p)$ между степенью сплайна и наивысшим порядком непрерывной на отрезке $[a, b]$ производной.

Пусть на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, $i = \overline{1, n}$, функция $f(x)$ интерполируется многочленом третьей степени

$$P_{3,i}(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3, \quad x \in [x_{i-1}, x_i]$$

Коэффициенты этого многочлена a_i, b_i, c_i, d_i , на каждом интервале $[x_{i-1}, x_i]$ определяются из условия сопряжения в узлах сетки x_i .

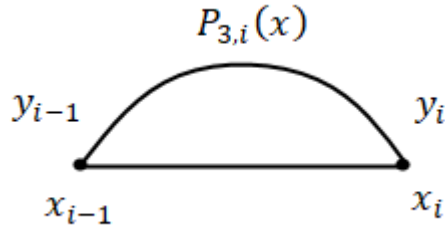
$$S_3(x_i) = y_i$$

$$\begin{aligned} S'_3(x_i - 0) &= S'_3(x_i + 0), \\ S''_3(x_i - 0) &= S''_3(x_i + 0), \end{aligned} \quad i = \overline{1, (n-1)}$$

Кроме того, будем считать, что в граничных точках $x = a \equiv x_0$ и $x = b \equiv x_n$ поставлены следующие условия: $S''_3(x_0) = 0$, $S''_3(x_n) = 0$, вне зависимости от того, выполнены эти условия для функции $f(x)$ или нет.

I.

$$S_3(x_i) = y_i$$



$$P_{3,i}(x_{i-1}) = a_i = y_{i-1}$$

$$a_i = y_{i-1}, \quad i = \overline{1, n} \quad (1)$$

$$P_{3,i}(x_i) = a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i,$$

$$\text{где } h_i = x_i - x_{i-1}$$

$$a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i, \quad i = \overline{1, n} \quad (2)$$

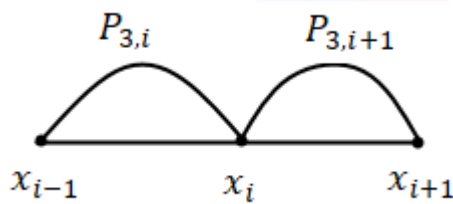
II. Вычислим производные:

$$P'_{3,i}(x_i) = b_i + 2c_i(x_i - x_{i-1}) + 3d_i(x_i - x_{i-1})^2$$

$$P''_{3,i}(x_i) = 2c_i + 6d_i(x_i - x_{i-1})$$

A).

$$S'_3(x_i - 0) = S'_3(x_i + 0)$$



$$P'_{3,i}(x_i) = P'_{3,i+1}(x_i)$$

$$b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1}, \quad i = \overline{1, (n-1)} \quad (3)$$

Б).

$$S''_3(x_i - 0) = S''_3(x_i + 0)$$

$$P''_{3,i}(x_i) = P''_{3,i+1}(x_i)$$

$$2c_i + 6d_i h_i = 2c_{i+1}$$

$$c_i + 3d_i h_i = c_{i+1}, \quad i = \overline{1, (n-1)} \quad (4)$$

III. Для узлов $x = a$, $x = b$:

$$S_3''(x_0) = 0$$

$$P_{3,1}''(x_0) = 2c_1 = 0$$

$$c_1 = 0 \quad (5)$$

$$S_3''(x_n) = 0$$

$$P_{3,n}''(x_n) = 2c_n + 6d_n(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$c_n + 3d_nh_n = 0 \quad (6)$$

Таким образом:

$$(5) \Rightarrow c_1 = 0$$

$$(4) \Rightarrow d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i), \quad i = \overline{1, (n-1)}$$

$$(1) \Rightarrow a_i = y_{i-1}, \quad i = \overline{1, n}$$

Уравнения (2) с учётом (1) и (4) для индексов $i = \overline{1, (n-1)}$, и (1) и (6) для индекса $i = n$ примут вид:

$$y_{i-1} + b_i h_i + c_i h_i^2 + \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)h_i^3 = y_i, \quad i = \overline{1, (n-1)}$$

$$y_{n-1} + b_n h_n + c_n h_n^2 - \frac{c_n}{3h_n} h_n^3 = y_n, \quad i = n.$$

Отсюда выразим:

$$\left[\begin{array}{l} b_i = \frac{1}{h_i}(y_i - y_{i-1}) - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} + 2c_i), \\ b_n = \frac{1}{h_n}(y_n - y_{n-1}) - \frac{2}{3}h_n c_n, \end{array} \quad i = \overline{1, (n-1)} \right.$$

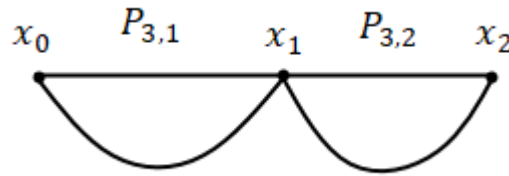
Подставив выражения для коэффициентов b_i и d_i в уравнение (3), получим СЛАУ с трёхдиагональной матрицей:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_i c_i + 2(h_i + h_{i+1})c_{i+1} + h_{i+1}c_{i+2} = \frac{3}{h_{i+1}}(y_{i+1} - y_i) - \frac{3}{h_i}(y_i - y_{i-1}), i = \overline{1, (n-1)} \\ c_1 = 0, \\ c_{n+1} = 0 \end{array} \right.$$

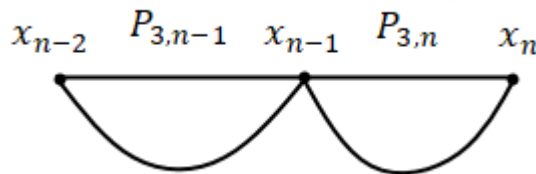
Для решения этой СЛАУ можно применить метод прогонки.

Замечание: условие равенства вторых производных $S_3''(x_0) = 0$, $S_3''(x_n) = 0$ определяет естественный кубический сплайн.

При решении практических задач возможны ситуации, когда нет информации о значениях производных на концах отрезка, тогда используют условие отсутствия узла. В точках x_1 и x_{n-1} требуют совпадения третьих производных.



$$P_{3,1}'''(x_1) = P_{3,2}'''(x_1)$$



$$P_{3,n-1}'''(x_{n-1}) = P_{3,n}'''(x_{n-1})$$

Численное дифференцирование.

Пусть известны значения функции $f(x)$ в узлах сетки x_i , $i = \overline{1, n}$. Требуется вычислить значение $f^{(k)}(x_*)$ в некоторой точке x_* .

Применим метод неопределённых коэффициентов. Значение k -той производной в точке x_* будем искать в виде суммы

$$f^{(k)}(x_*) \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad (1)$$

Коэффициенты c_i определим из следующего условия: формула дифференцирования должна быть точна для многочленов максимально высокой степени. Для этого потребуем, чтобы для многочлена $f(x) \approx \sum_{j=0}^m a_j x^j$ соотношение (1) обращалось в равенство.

$$\sum_{j=0}^m a_j (x^j)^{(k)}|_{x_*} = \sum_{i=1}^n c_i \left(\sum_{j=0}^m a_j x_i^j \right)$$

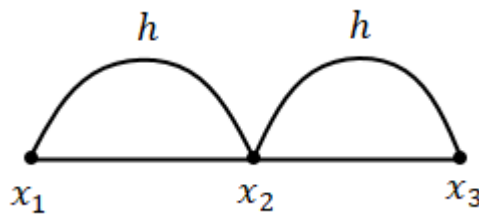
Для того чтобы это равенство выполнялось для многочлена степени m , необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при a_j в левой и правой частях были равны.

Так как $(x^j)^{(k)} = j(j-1) \dots (j-(k-1))x^{j-k}$, то получим СЛАУ относительно коэффициентов c_i , т.е.

$$j(j-1) \dots (j-k+1)x_*^{j-k} = \sum_{i=1}^n c_i x_i^j, \quad j = \overline{0, m}$$

Если $m = n - 1$, то число уравнений равно числу неизвестных. Определитель этой системы отличен от нуля (является определителем Вандерморта). Таким образом, всегда можно построить формулу численного дифференцирования с n узлами, точную для многочленов степени $(n - 1)$.

Пример. Построить формулу вычисления первой производной, точную для многочлена второй степени.



$$x_2 = x_*$$

$$x_1 = x_* - h$$

$$x_3 = x_* + h$$

$$f'(x_*) \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + C_3 f(x_3)$$

$$f(x) = \sum_{j=0}^2 a_j x^j = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

$$f'(x) = a_1 + 2a_2 x$$

$$\begin{cases} f'(x_*) = a_1 + 2a_2 x_* \\ f'(x_*) = C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + C_3 f(x_3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} f'(x_*) = a_1 + 2a_2 x_* \\ f'(x_*) = C_1 [a_0 + a_1(x_* - h) + a_2(x_* - h)^2] + C_2 [a_0 + a_1 x_* + a_2 x_*^2] + \\ + C_3 [a_0 + a_1(x_* + h) + a_2(x_* + h)^2] \end{cases}$$

$$\begin{aligned} a_0: & \quad 0 = C_1 + C_2 + C_3 \\ a_1: & \quad 1 = C_1(x_* - h) + C_2x_* + C_3(x_* + h) \\ a_2: & \quad 2x_* = C_1(x_* - h)^2 + C_2x_*^2 + C_3(x_* + h)^2 \end{aligned}$$

$$1 = x_*(C_1 + C_2 + C_3) + h(C_3 - C_1)$$

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0, \Rightarrow h(C_3 - C_1) = 1, \Rightarrow C_3 - C_1 = \frac{1}{h}$$

$$2x_* = x_*^2(C_1 + C_2 + C_3) + 2hx_*(C_3 - C_1) + h^2(C_1 + C_3)$$

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0, \quad C_3 - C_1 = \frac{1}{h}, \Rightarrow 2x_* = 2x_* + h^2(C_1 + C_3), \Rightarrow C_1 = -C_3$$

$$C_3 = \frac{1}{2h}$$

$$C_1 = -C_3 = -\frac{1}{2h}$$

$$C_2 = -(C_1 + C_3) = 0$$

Центральная разностная производная:

$$f'(x_*) \approx -\frac{1}{2h}f(x_* - h) + \frac{1}{2h}f(x_* + h) = \frac{f(x_* + h) - f(x_* - h)}{2h}$$

Оценим погрешность.

$$R_1 = f'(x_*) - \frac{f(x_* + h) - f(x_* - h)}{2h}$$

Формула Тейлора:

$$f(x_* \pm h) = f(x_*) \pm \frac{h}{1!}f'(x_*) + \frac{h^2}{2!}f''(x_*) \pm \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_{\pm}),$$

где $\xi_+ \in (x; x + h)$, $\xi_- \in (x; x - h; x)$.

$$\begin{aligned} R_1 = f'(x_*) - \frac{1}{2h} [f(x_*) + hf'(x_*) + \frac{h^2}{2}f''(x_*) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_+) - \\ - f(x_*) + hf'(x_*) - \frac{h^2}{2}f''(x_*) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_-)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_1 = f'(x_*) - \frac{1}{2h} \cdot 2hf'(x_*) - \frac{h^2}{6} \cdot \frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} = \\ = -\frac{h^2}{6} \cdot \frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2} \end{aligned}$$

$$M_3 = \max_{\xi \in [x_* - h; x_* + h]} |f'''(\xi)|$$

$$|R_1| \leq \frac{h^2}{6} M_3$$

Формула имеет второй порядок точности относительно h .

Пример. Построить формулу вычисления второй производной.

$$f''(x_*) \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + C_3 f(x_3)$$

$$x_1 = x_* - h$$

$$x_2 = x_*$$

$$x_3 = x_* + h$$

$$f(x) = \sum_{j=0}^2 a_j x^j = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

$$f'(x) = a_1 + 2a_2 x$$

$$f''(x) = 2a_2$$

$$\begin{cases} f''(x_*) = 2a_2 \\ f''(x_*) = C_1[a_0 + a_1(x_* - h) + a_2(x_* - h)^2] + C_2[a_0 + a_1 x_* + a_2 x_*^2] + \\ + C_3[a_0 + a_1(x_* + h) + a_2(x_* + h)^2] \end{cases}$$

$$\begin{aligned} a_0: & \quad 0 = C_1 + C_2 + C_3 \\ a_1: & \quad 0 = C_1(x_* - h) + C_2 x_* + C_3(x_* + h) \\ a_2: & \quad 2 = C_1(x_* - h)^2 + C_2 x_*^2 + C_3(x_* + h)^2 \end{aligned}$$

$$0 = (C_1 + C_2 + C_3)x_* + h(C_3 - C_1)$$

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0, \Rightarrow h(C_3 - C_1) = 0, \Rightarrow C_1 = C_3$$

$$2 = (C_1 + C_2 + C_3)x_*^2 + 2x_* h(C_3 - C_1) + h^2(C_1 + C_3)$$

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0, \quad C_3 - C_1 = 0, \Rightarrow h^2(C_1 + C_3) = 2, \Rightarrow C_1 = \frac{1}{h^2}$$

$$C_1 = C_3 = \frac{1}{h^2}$$

$$C_2 = -(C_1 + C_3) = -\frac{2}{h^2}$$

Вторая разностная производная:

$$f''(x_*) \approx \frac{f(x_* - h) + f(x_* + h)}{h^2} - \frac{2f(x_*)}{h^2}$$

$$|R_2| \leq \frac{h^2}{12} M_4$$

Формула имеет второй порядок точности.

$$M_4 = \max_{\xi \in [x_* - h; x_* + h]} |f^{(4)}(\xi)|$$

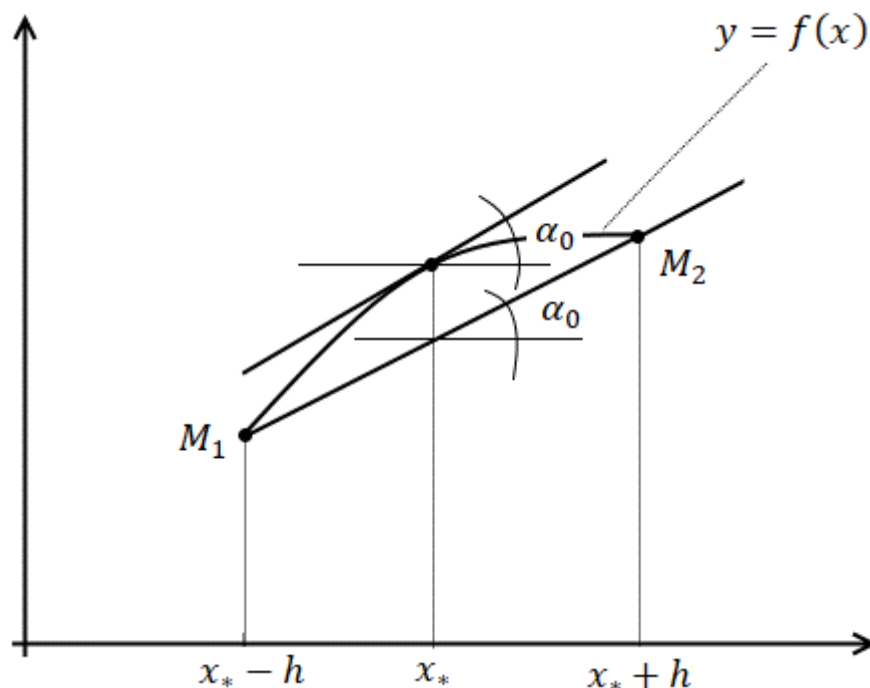
Правая и левая разностные производные:

$$f'(x_*) \approx \frac{f(x_* + h) - f(x_*)}{h}$$

$$f'(x_*) \approx \frac{f(x_*) - f(x_* - h)}{h}$$

Эти формулы имеют первый порядок точности.

Геометрический смысл центральной разностной производной.



Прямая, проводимая через точку x_* , параллельна секущей M_1M_2 , а не касательная к графику $y = f(x)$.

α_0 – угол наклона секущей M_1M_2 к графику функции $y = f(x)$.

$$f'(x_*) \approx \operatorname{tg} \alpha_0$$

Пример формул, имеющих четвёртый порядок точности, для первой и второй производной:

$$f'(x_*) \approx \frac{f(x_* - 2h) - 8f(x_* - h) + 8f(x_* + h) - f(x_* + 2h)}{12h}$$

$$f''(x_*) \approx \frac{-f(x_* - 2h) + 16f(x_* - h) - 30f(x_*) + 16f(x_* + h) - f(x_* + 2h)}{12h^2}$$

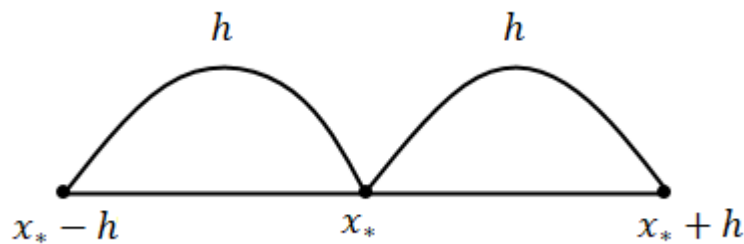
Правило Рунге.

Это правило позволяет повысить точность формулы дифференцирования. Выведем формулу высокой точности из формулы низкой точности.

$$f'(x_*) \approx \frac{f(x_* + h) - f(x_* - h)}{2h}$$

Обозначим

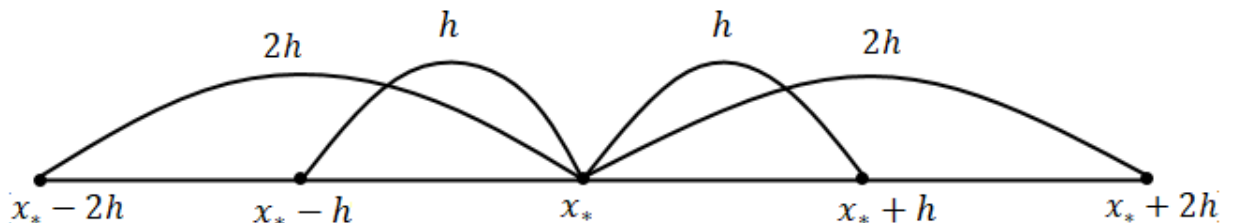
$$\frac{f(x_* + h) - f(x_* - h)}{2h} = \xi(x_*, h)$$



$$(1) \quad f'(x_*) - \xi(x_*, h) = \varphi(x_*)h^p + O(h^{p+1})$$

$\varphi(x_*)h^p$ – главный член последовательности, в нашем случае $p = 2$.

Увеличим шаг в r раз ($r = 2$).



$$(2) \quad f'(x_*) - \xi(x_*, rh) = \varphi(x_*)(rh)^p + O((rh)^{p+1}) = \varphi(x_*)(rh)^p + O(h^{p+1})$$

$$(2) - (1) \Rightarrow -\xi(x_*, rh) + \xi(x_*, h) = \varphi(x_*)h^p(r^p - 1)$$

Первая формула Рунге:

$$\varphi(x_*)h^p = \frac{\xi(x_*, h) - \xi(x_*, rh)}{r^p - 1}$$

Подставив первую формулу Рунге в выражение (1), получим вторую формулу Рунге:

$$f'(x_*) = \xi(x_*, h) + \frac{\xi(x_*, h) - \xi(x_*, rh)}{r^p - 1} + O(h^{p+1})$$

Пример. Функция $y = \lg x$ представлена таблицей своих значений:

x	1	2	3	4	5
y	0,0	0,301	0,478	0,602	0,699

Вычислить значение производной этой функции в точке $x = 3$.

1). Вычислим производную по ближайшим точкам $x = 2$ и $x = 4$, при этом шаг $h_1 = 1$.

$$f'_{h_1}(3) \approx \frac{f(4) - f(2)}{2h_1} = \frac{0,602 - 0,301}{2} \approx 0,151$$

2). Увеличим шаг в 2 раза ($r = 2$) и вычислим производную по точкам $x = 1$, $x = 5$, при этом $h_2 = 2$.

$$f'_{h_2}(3) \approx \frac{f(5) - f(1)}{2h_2} \approx 0,175$$

3). Уточнение по второй формуле Рунге:

$$f'(3) \approx f'_{h_1}(3) + \frac{f'_{h_1}(3) - f'_{h_2}(3)}{2^2 - 1} = 0,151 + \frac{0,151 - 0,175}{3} \approx 0,143$$

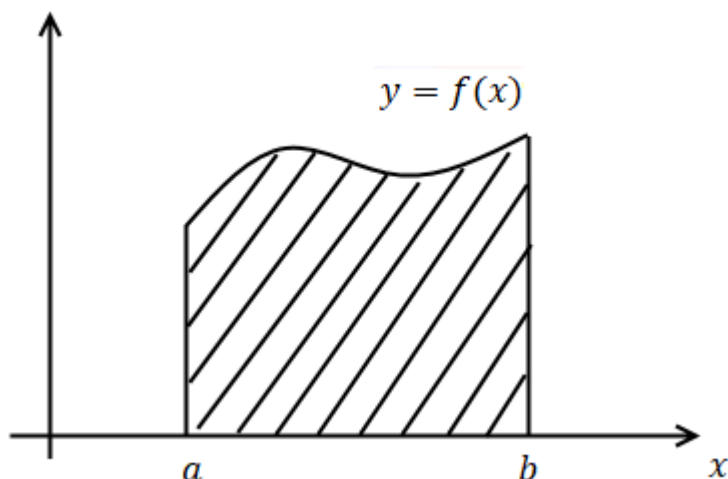
Численное интегрирование.

Постановка задачи.

Пусть функция $f(x) \geq 0$ и задана на отрезке $x \in [a, b]$. Требуется вычислить значение определённого интеграла

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Интеграл – это площадь криволинейной трапеции.



Квадратурные формулы.

Соотношение

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^N C_k f(\bar{x}_k)$$

называется квадратурной формулой. Сумма, стоящая в правой части формулы, называется квадратурной суммой.

C_k – коэффициенты квадратурной формулы,

\bar{x}_k – узлы квадратурной формулы.

$$\bar{x}_k \in [a, b], \quad k = \overline{0, N}$$

Погрешность R квадратурной формулы – разность между точным значением интеграла и квадратурной суммой:

$$R = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^N C_k f(\bar{x}_k)$$

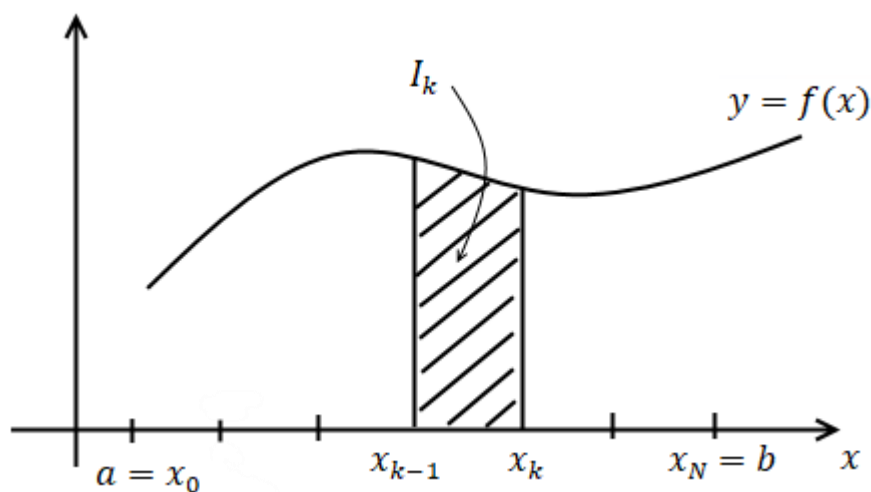
Квадратурная формула точна для многочлена степени m , если для любого многочлена степени не выше m эта формула даёт точное значение интеграла.

$$\int_a^b P_m(x)dx = \sum_{k=0}^N C_k P_m(\bar{x}_k)$$

Рассмотрим равномерную сетку. Пусть $x_k = a + kh$, $k = \overline{0, N}$,

$$h = \frac{b - a}{N}.$$

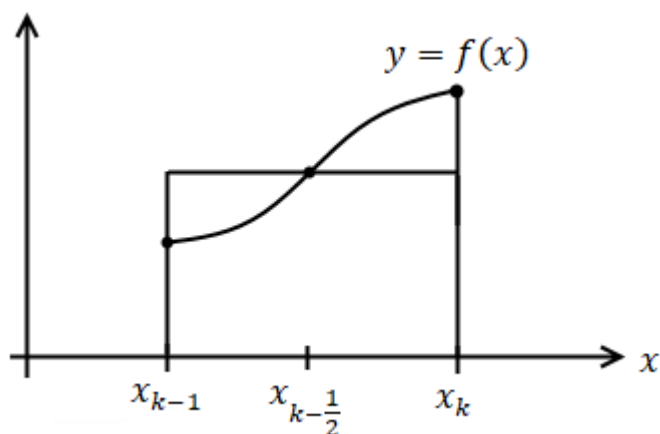
Разобьём интеграл I на сумму элементарных интегралов.



$$I = \sum_{k=1}^N I_k$$

$$I_k = \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx$$

1). Формула прямоугольников.



$x_{k-\frac{1}{2}}$ – середина отрезка $[x_{k-1}, x_k]$

Заменим площадь криволинейной трапеции площадью прямоугольника, у которого основание – это длина отрезка $x_{k-1}x_k$, а высота – значение функции f в точке $x_{k-\frac{1}{2}}$. Тогда приближённо

$$I_k \approx (x_k - x_{k-1}) \cdot f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) = hf\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right)$$

$$I = \sum_{k=1}^N I_k \approx h \sum_{k=1}^N f(x_{k-\frac{1}{2}})$$

Таким образом, составная квадратурная формула центральных прямоугольников:

$$I \approx h \sum_{k=1}^N f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right)$$

Теорема об оценке погрешности.

Пусть функция $f(x) \in C^2[a, b]$ дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a, b]$. Тогда для квадратурной формулы центральных прямоугольников справедлива следующая оценка погрешности:

$$|R_{\text{пр}}| \leq \frac{M_2(b-a)}{24} h^2$$

Формула имеет второй порядок точности.

M_2 – наибольшее значение модуля второй производной на отрезке $[a, b]$:

$$M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|.$$

$$R_{\text{пр}} = \int_a^b f(x) dx - h \sum_{k=1}^N f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right)$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx, \quad h = x_k - x_{k-1} = \int_{x_{k-1}}^{x_k} dx, \quad \Rightarrow$$

$$R_{\text{пр}} = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx - \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) dx = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} \left[f(x) - f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) \right] dx$$

Применим формулу Тейлора:

$$f(x) = f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) + \frac{f'\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right)}{1!} \cdot \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right) + \frac{1}{2} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f''(\xi(x)) (x - x_{k-1})^2 dx$$

$$R_k = \int_{x_{k-1}}^{x_k} \left[f(x) - f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) \right] dx = f'\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) \int_{x_{k-1}}^{x_k} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right) dx +$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f''(\xi(x)) \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 dx.$$

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right) dx = \frac{1}{2} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 \Big|_{x_{k-1}}^{x_k} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \left(-\frac{h}{2}\right)^2\right] = 0$$

$$R_k = \frac{1}{2} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f''(\xi(x)) \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 dx$$

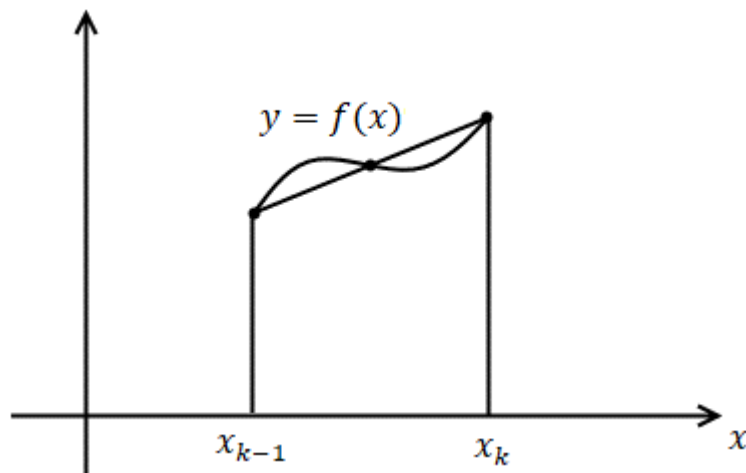
$$|R_k| = \frac{1}{2} \left| \int_{x_{k-1}}^{x_k} f''(\xi(x)) \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 dx \right| \leq \frac{1}{2} \int_{x_{k-1}}^{x_k} |f''(\xi(x))| \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 dx =$$

$$= \frac{1}{2} M_2 \int_{x_{k-1}}^{x_k} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2 dx = \frac{M_2}{6} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^3 \Big|_{x_{k-1}}^{x_k} = \frac{M_2}{6} \left[\left(\frac{h}{2}\right)^3 - \left(-\frac{h}{2}\right)^3\right] =$$

$$= \frac{M_2}{24} h^3.$$

$$|R_{\text{np}}| = \left| \sum_{k=1}^N R_k \right| \leq \sum_{k=1}^N |R_k| = \frac{M_2}{24} h^3 N = \frac{M_2}{24} h^2 (hN) = \frac{M_2}{24} (b-a) h^2$$

2). Формула трапеций.



$$I_k \approx \frac{f(x_{k-1}) + f(x_k)}{2} (x_k - x_{k-1}) = \frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)]$$

$$\begin{aligned}
 I &= \sum_{k=1}^N I_k \approx h \sum_{k=1}^N \frac{f(x_{k-1}) + f(x_k)}{2} = \\
 &= h \left[\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \dots + \frac{f(x_{N-1}) + f(x_N)}{2} \right] \\
 I &\approx h \left[\frac{f(x_0) + f(x_N)}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) \right]
 \end{aligned}$$

Полученная формула называется квадратурной формулой трапеций.

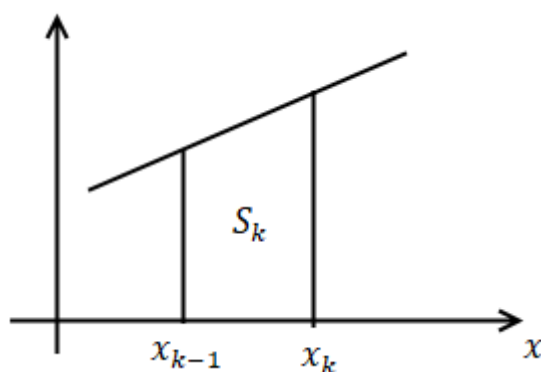
Теорема об оценке погрешности.

Пусть функция $f(x) \in C^2[a, b]$ дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a, b]$. Тогда для квадратурной формулы трапеций справедлива следующая оценка погрешности:

$$|R_{\text{тр}}| \leq \frac{M_2(b-a)}{12} h^2$$

Формула имеет второй порядок точности.

$$R_{\text{тр}} = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx - \frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)] = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} (f(x) - P_1(x)) dx$$



$$S_k = \frac{f(x_{k-1}) + f(x_k)}{2} h$$

$$S_k = \int_{x_{k-1}}^{x_k} L_1(x) dx$$

$L_1(x)$ – многочлен Лагранжа 1-ой степени:

$$L_1(x) = \frac{f(x_k)}{h}(x - x_{k-1}) - \frac{f(x_{k-1})}{h}(x - x_k)$$

Согласно следствию из теоремы о погрешности интерполяции:

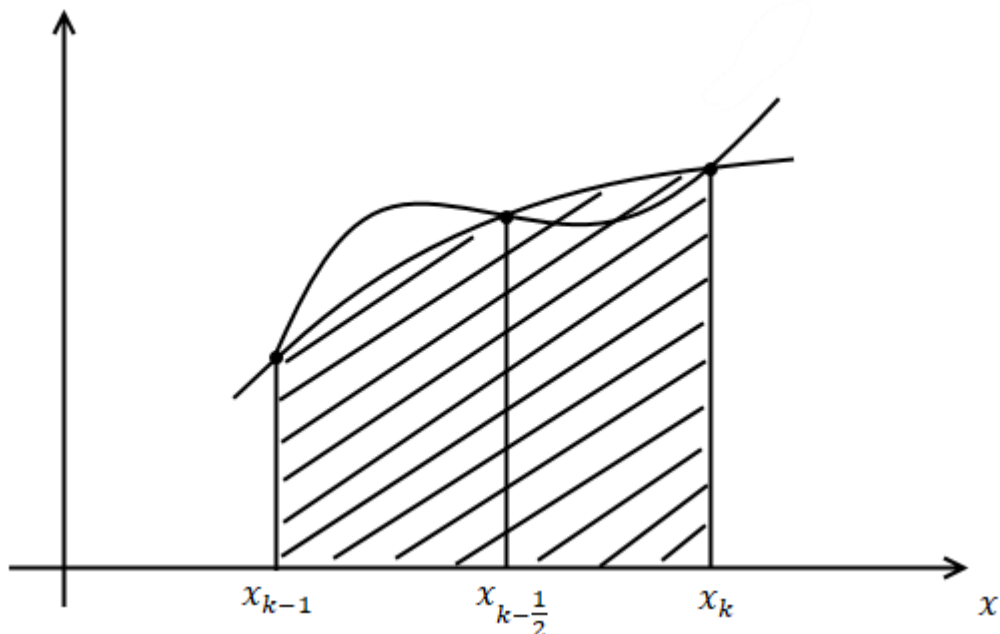
$$|f(x) - P_1(x)| \leq \frac{M_2}{2!} |x - x_{k-1}| \cdot |x - x_k|$$

$$\begin{aligned} |R_k| &= \left| \int_{x_{k-1}}^{x_k} [f(x) - L_1(x)] dx \right| \leq \int_{x_{k-1}}^{x_k} |f(x) - L_1(x)| dx \leq \\ &\leq \frac{M_2}{2!} \int_{x_{k-1}}^{x_k} |x - x_{k-1}| \cdot |x - x_k| dx \end{aligned}$$

$$R_{\text{тр}} \leq \frac{M_2}{2!} \sum_{k=1}^N \frac{1}{6} h^3 = \frac{M_2}{2!} \cdot \frac{1}{6} h^2 (hN) = \frac{M_2}{12} (b - a) h^2$$

Замечание: формулы центральных прямоугольников и трапеций имеют второй порядок точности относительно h . Таким образом, эти формулы точны для многочленов первой степени.

3). Формула Симпсона (формула парабол).



$$I_k \approx \int_{x_{k-1}}^{x_k} P_2(x) dx$$

$$P_2(x) = f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1}))}{h} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right) + \\ + \frac{f(x_k) - 2f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k-1}))}{\frac{h^2}{2}} \left(x - x_{k-\frac{1}{2}}\right)^2$$

Интегрируя по отрезку $[x_{k-1}, x_k]$, получаем:

$$I_k \approx \frac{h}{6} \left[f(x_{k-1}) + 4f\left(x_{k-\frac{1}{2}}\right) + f(x_k) \right] \\ I = \sum_{k=1}^N I_k \approx \frac{h}{6} [f(x_0) + f(x_N) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + 4 \sum_{k=1}^N f(x_{k-1/2})]$$

Эту формулу называют формулой Симпсона, или формулой парабол.

Теорема об оценке погрешности.

Пусть функция f имеет четвёртую производную, непрерывную на отрезке $[a, b]$: $f^{(4)} \in C[a, b]$. Тогда для формулы Симпсона справедлива следующая оценка погрешности:

$$|R_c| \leq \frac{M_4(b-a)}{2880} h^4$$

M_4 – наибольшее значение модуля четвёртой производной на отрезке $[a, b]$:

$$M_4 = \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|$$

Формула Симпсона имеет четвёртый порядок точности. Это означает, что она точна для многочленов третьей степени.

Квадратурные формулы интерполяционного типа.

На отрезке $[x_{k-1}, x_k]$ аппроксимируем функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом степени m и заменим интеграл $\int_a^b f(x)dx$ суммой

$$\sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} P_{m,k}(x) dx.$$

Зададим значения $\{t_j\}_{j=0}^m \in [-1,1]$ и построим интерполяционный многочлен в форме Лагранжа, совпадающий с функцией $f(x)$ в точках

$$\xi_j^{(k)} = x_{k-\frac{1}{2}} + t_j \frac{h_k}{2}, \quad j = \overline{0, m}.$$

$$P_{m,k}(x) = \sum_{j=0}^m f(\xi_j^{(k)}) l_{m,j}^{(k)}(x),$$

где

$$l_{m,j}^{(k)}(x) = \prod_{\substack{q=0, \\ q \neq j}}^m \frac{x - \xi_q^{(k)}}{\xi_j^{(k)} - \xi_q^{(k)}}$$

Таким образом, квадратурная формула интерполяционного типа имеет следующий вид:

$$I \approx \sum_{k=1}^N h_k \sum_{j=0}^m a_j f(\xi_j^{(k)}),$$

где

$$a_j = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \prod_{\substack{q=0, \\ q \neq j}}^m \frac{t - t_q}{t_j - t_q} dt$$

Замечание: квадратурные формулы интерполяционного типа, построенные на основе равноотстоящих значений t_j , называют формулами Ньютона-Котеса. Простейшие квадратурные формулы (треугольников, трапеций, парабол) являются формулами Ньютона-Котеса.

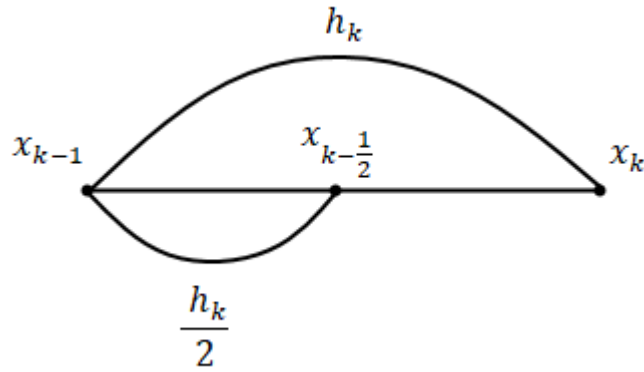
Пример. Формула трапеции в случае переменного шага.

$$h_k = x_k - x_{k-1}$$

$$t_0 = -1, \quad t_1 = 1$$

$$\xi_0^{(k)} = x_{k-\frac{1}{2}} - \frac{h_k}{2} \equiv x_{k-1}$$

$$\xi_1^{(k)} = x_{k-\frac{1}{2}} + \frac{h_k}{2} \equiv x_k$$



Вычислим коэффициенты a_j :

$$a_0 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{t - t_1}{t_0 - t_1} dt = \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \int_{-1}^1 (t - 1) dt = \frac{1}{2}$$

$$a_1 = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{t - t_0}{t_1 - t_0} dt = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (t + 1) dt = \frac{1}{2}$$

$$I \approx \sum_{k=1}^N h_k \left(\frac{1}{2} f(x_{k-1}) + \frac{1}{2} f(x_k) \right)$$

Теорема об оценке погрешности квадратурной формулы интерполяционного типа: пусть $(m+1)$ -ая производная функции $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$: $f^{(m+1)}(x) \in C[a, b]$, тогда справедлива следующая формула:

$$|I - I_h| \leq C_m M_{m+1} (b - a) h_{\max}^{m+1},$$

где

$$C_m = \frac{1}{2^{m+2} (m+1)!} \int_{-1}^1 \left| \prod_{k=0}^m (t - t_k) \right| dt$$

Квадратурная формула интерполяционного типа точна для многочлена степени m .

Квадратурные формулы Гаусса.

Постановка задачи. Пусть требуется вычислить определённый интеграл

$$I = \int_a^b \rho(x)f(x)dx, \quad f(x) \in C[a, b], \quad \rho(x) > 0, \rho(x) \in C[a, b]$$

($\rho(x)$ – весовая функция).

При заданном числе узлов N построим квадратурную формулу, точную для многочленов наиболее высокой степени. Формулы, удовлетворяющие этому условию, называют квадратурными формулами Гаусса.

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^N C_k f(x_k)$$

Квадратурная формула точна для многочленов степени m тогда и только тогда, когда она точна для функции x^α , $\alpha = \overline{0, m}$, следовательно, должны выполняться следующие соотношения:

$$\int_a^b \rho(x)x^\alpha dx = \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^N C_k x_k^\alpha, \quad \alpha = \overline{0, m}$$

Получили $(m+1)$ уравнений, так как $\alpha = \overline{0, m}$, и $(2N+2)$ неизвестных (так как $(N+1)$ узлов сетки $x_0 \dots x_N$ и $(N+1)$ коэффициентов $C_0 \dots C_n$).

$$m+1 = 2N+2 \Rightarrow m = 2N+1$$

Пример. Формула центральных прямоугольников.

$$\rho(x) \equiv 1$$

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

$$m = 1, \quad N = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_a^b dx = \frac{b-a}{2} C_0 x_0^0, \quad (\alpha = 0) \\ \int_a^b x dx = \frac{b-a}{2} C_0 x_0^1 \quad (\alpha = 1) \end{array} \right.$$

$$\begin{cases} b-a = \frac{b-a}{2} C_0, \\ \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{b-a}{2} C_0 x_0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} C_0 = 2, \\ x_0 = \frac{a+b}{2} \end{cases}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [C_0 f(x_0)] = \frac{b-a}{2} \cdot 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

Это квадратурная формула Гаусса, она точна для многочлена первой степени.

Пример. Построить квадратурную формулу Гаусса, точную для многочлена третьей степени.

$$\rho(x) = 1$$

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

$$m = 3, \quad N = 1$$

$$\begin{cases} \int_{-1}^1 dx = C_0 x_0^0 + C_1 x_1^0 & (\alpha = 0) \\ \int_{-1}^1 x dx = C_0 x_0^1 + C_1 x_1^1 & (\alpha = 1) \\ \int_{-1}^1 x^2 dx = C_0 x_0^2 + C_1 x_1^2 & (\alpha = 2) \\ \int_{-1}^1 x^3 dx = C_0 x_0^3 + C_1 x_1^3 & (\alpha = 3) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 2 = C_0 + C_1 \\ 0 = C_0 x_0 + C_1 x_1 \\ \frac{2}{3} = C_0 x_0^2 + C_1 x_1^2 \\ 0 = C_0 x_0^3 + C_1 x_1^3 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \\ C_0 = 1 \\ C_1 = 1 \end{cases}$$

Таким образом, квадратурная формула Гаусса, точная для многочленов третьей степени, примет следующий вид:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Оценка погрешности для квадратурной формулы Гаусса.

$$|R| \leq \alpha_N M_{2N+2} (b-a)^{2N+3},$$

где

$$\alpha_N = \frac{[(N+1)!]^4}{(2N+3)[(2N+2)!]^3}$$

Этот коэффициент быстро убывает с ростом N , например, уже при $N = 3$ $\alpha_3 \approx 6 \cdot 10^{-10}$.

Теорема.

Квадратурная формула

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^N C_k f(x_k)$$

точна для многочлена степени m ($m = 2N + 1$) тогда и только тогда, когда:

1). Функция $w(x)$ ортогональна любому многочлену степени N с весом $\rho(x)$:

$$w(x) = \prod_{k=0}^N (x - x_k)$$

$$\int_a^b \rho(x) w(x) P_N(x) dx = 0$$

2). Коэффициенты C_k вычисляются по формуле

$$C_k = \int_a^b \rho(x) \prod_{\substack{j=0, \\ j \neq k}}^N \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx.$$

Формулу Гаусса называют квадратурной формулой наивысшей алгебраической точности, поскольку для произвольного многочлена степени выше $m = 2N + 1$ формула с N узлами уже не может больше.

Правило Рунге.

Пусть h – шаг разбиения отрезка $[a, b]$, I^h – приближённое значение интеграла, вычисленное по квадратурной формуле.

$$I - I^h = Ch^k + o(h^k), \quad C \neq 0, \quad k > 0$$

Ch^k – главный член погрешности квадратурной формулы, k – порядок точности квадратурной формулы.

$$\text{Пусть } I - I^h \approx Ch^k \quad (1)$$

Уменьшим шаг в 2 раза.

$$I - I^{\frac{h}{2}} \approx C \left(\frac{h}{2}\right)^k = \frac{Ch^k}{2^k} \quad (2)$$

При уменьшении шага в 2 раза погрешность уменьшилась в 2^k раз.

Вычтем (2) из (1):

$$\begin{aligned} -I^h + I^{\frac{h}{2}} &\approx Ch^k \left(1 - \frac{1}{2^k}\right) \\ Ch^k &\approx \frac{I^{\frac{h}{2}} - I^h}{1 - \frac{1}{2^k}} \\ I - I^{\frac{h}{2}} &\approx \frac{1}{2^k} \cdot \frac{I^{\frac{h}{2}} - I^h}{1 - \frac{1}{2^k}} = \frac{I^{\frac{h}{2}} - I^h}{2^k - 1} \end{aligned}$$

Эта формула называется правилом Рунге.

Для формул прямоугольников и трапеций $k = 2$ и формула принимает следующий вид:

$$I - I^{\frac{h}{2}} \approx \frac{1}{3} \left(I^{\frac{h}{2}} - I^h \right)$$

Для формулы парабол $k = 4$:

$$I - I^{\frac{h}{2}} \approx \frac{1}{15} \left(I^{\frac{h}{2}} - I^h \right)$$

Весовые функции.

1). Формула Якоби:

$$\rho(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta, \quad \alpha, \beta > -1, \quad x \in (-1,1)$$

2). Формула Лагерра:

$$\rho(x) = x^\alpha e^{-x}, \quad x > 0$$

3). Формула Эрмита:

$$\rho(x) = e^{-x^2}, \quad x \in R$$

4). Формула Чебышёва 1-го рода:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad x \in (-1,1)$$

5). Формула Чебышева 2-го рода:

$$\rho(x) = \sqrt{1-x^2}, \quad x \in (-1,1)$$

Интегрирование осциллирующих функций.

Требуется вычислить интеграл

$$\int_a^b f(x) e^{iwx} dx$$

Функция e^{iwx} рассматривается как весовая функция $f(x)$. Тогда на отрезке $[x_{k-1}, x_k]$ функция $f(x)$ аппроксимируется многочленом первой степени:

$$f(x) = P_{1,k}(x) = f(x_{k-1}) + [f(x_k) - f(x_{k-1})] \cdot \frac{x - x_{k-1}}{h_k}$$

Тогда

$$I_k \approx \int_{x_{k-1}}^{x_k} P_{1,k}(x) e^{iwx} dx = \frac{h_k}{2} [A_k f(x_{k-1}) + B_k f(x_k)] e^{iwx_{k-\frac{1}{2}}},$$

где

$$A_k = \alpha_k + i\beta_k, \quad B_k = \alpha_k - i\beta_k,$$

$$\alpha_k = \frac{\sin \mu_k}{\mu_k}, \quad \beta_k = \frac{\mu_k \cos \mu_k - \sin \mu_k}{\mu_k^2}, \quad \mu_k = \frac{wh_k}{2}$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) e^{iwx} dx \approx \sum_{k=1}^N \frac{h_k}{2} [A_k f(x_{k-1}) + B_k f(x_k)] e^{iwx_{k-\frac{1}{2}}}$$

Полученная формула называется формулой Филона.

Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

I. Постановка задачи.

Требуется найти непрерывную функцию при $t \in [t_0, T]$ функцию $U(t)$, удовлетворяющую нелинейному дифференциальному уравнению (1) и начальному условию (2):

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = f(t, U(t)), & t \in (t_0, T] \\ U(t_0) = U_0 \end{cases} \quad (1)$$

$$(2)$$

Если функция $f(t, U(t))$ определена в области $D = \{t_0 \leq t \leq T; |U(t) - U_0| \leq U\}$ и удовлетворяет в этой области условию Липшица по второй переменной:

$$|f(t, U_1(t)) - f(t, U_2(t))| \leq L|U_1(t) - U_2(t)|, \text{ где}$$

$$f(t, U_1(t)), f(t, U_2(t)) \in D, \quad L > 0 - \text{константа Липшица,}$$

то задача Коши имеет единственное решение при достаточно малых значениях T .

Метод Эйлера (метод ломаных).

На отрезке $[t_0, T]$ введём сетку: $\Omega = \{t_n = t_0 + \tau n, n = 0, 1, \dots, N\}$.

Шаг постоянный:

$$\tau = \frac{T - t_0}{N}$$

Обозначим через y_n сеточную функцию: $y_n = y(t_n)$ и заменим задачу Коши дискретным аналогом.

$$\begin{cases} \frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_n, y_n), & n = 0, 1, \dots \\ y_0 = U_0 \end{cases}$$

Вместо функции $U(t)$ мы находим приближённое решение задачи Коши, т.е. сеточную функцию $y_n = y(t_n)$. Её значение вычисляется последовательно по явной формуле:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \tau f(t_n, y_n), & n \geq 0 \\ y_0 = U_0 \end{cases}$$

Это расчётная формула метода Эйлера. Данный метод является одношаговым (для нахождения y_{n+1} необходимо только одно предыдущее значение y_n) и явным (выражение для y_{n+1} имеет вид некой аналитической формулы).

Погрешность метода.

$$z_n = y_n - U(t_n) \equiv y_n - U_n - \text{погрешность.}$$

$$y_n = z_n + U_n$$

$$y_{n+1} - y_n = z_{n+1} + z_n + U_{n+1} - U_n$$

$$\begin{aligned} f(t_n, y_n) &= f(t_n, z_n + U_n) = |\pm f(t_n, z_n + U_n)| = \\ &= f(t_n, U_n) + \{f(t_n, z_n + U_n) - f(t_n, U_n)\} = \\ &= f(t_n, U_n) + f'_u(t_n, U_n + \theta z_n) z_n, \quad \theta \in (0,1) \end{aligned}$$

Уравнение для z_{n+1} :

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} + \frac{U_{n+1} - U_n}{\tau} = f(t_n, U_n) + f'_u(t_n, U_n + \theta z_n)$$

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)}, \quad n = 0, 1$$

$$z_0 = 0, \text{ т.к. } y_0 - U_0 = 0$$

$$\psi_n^{(1)} = f(t_n, U_n) - \frac{U_{n+1} - U_n}{\tau},$$

$$\psi_n^{(2)} = f'_u(t_n, U_n + \theta z_n) \approx Z_n$$

$\psi_n^{(1)}$ – невязка, или погрешность аппроксимации разностной схемы метода Эйлера;

$\psi_n^{(2)}$ – погрешность аппроксимации правой части.

Определение: дискретное уравнение аппроксимирует дифференциальное уравнение, если

$$\max_{t_0 \leq t_n \leq T} |\psi_n^{(1)}| \rightarrow 0$$

при $\tau \rightarrow 0$.

Если

$$\max_{t_0 \leq t_n \leq T} |\psi_n^{(1)}| = O(\tau_p),$$

то разностная схема имеет порядок точности (порядок аппроксимации), равный p .

Покажем, что метод Эйлера имеет первый порядок аппроксимации.

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)} &= f(t_n, U_n) - \frac{U_{n+1} - U_n}{\tau} = \\ &= \frac{\partial U}{\partial t}(t_n) - \frac{1}{\tau} \left[U(t_n) + \tau \frac{\partial U(t_n)}{\partial t} + O(\tau^2) - U(t_n) \right] = O(\tau) \end{aligned}$$

Таким образом, $p = 1$.

Повышение порядка точности схемы Эйлера (метод Рунге).

Пусть решение $U = U(t)$ является достаточно гладким, и имеет место разложение погрешности $z_n = y_n - U_n$ по степеням τ :

$$z_n = \alpha(t)\tau + \beta(t)\tau^2 + \dots$$

Коэффициенты $\alpha(t), \beta(t)$ не зависят от τ .

$$y_n = U_n + \alpha(t)\tau + \beta(t)\tau^2 + \dots$$

Зададим две сетки с общими узлами и шагами $\tau_1 = \tau$ и $\tau_2 = \frac{\tau}{2}$.

$$\Omega_{t_1} = \{t_n = n\tau_1, n = 0, 1, \dots\}$$

$$\Omega_{t_2} = \{t_k = k\tau_2, k = 0, 1, \dots\}$$

Затем на каждой сетке решаем дискретный (разностный) аналог задачи Коши. Пусть t_* – какой-либо общий узел для сеток $y^{(1)}(t_n)$ и $y^{(2)}(t_k)$.

$$y^{(1)}(t_*) = U(t_*) + \alpha(t_*)\tau_1 + \beta(t_*)\tau_1^2 + O(\tau_1^2)$$

$$y^{(2)}(t_*) = U(t_*) + \alpha(t_*)\tau_2 + \beta(t_*)\tau_2^2 + O(\tau_2^2)$$

Запишем линейную комбинацию этих двух решений с параметром σ .

$$\begin{aligned}\tilde{y}(t_*) &= \sigma y^{(1)}(t_*) + (1 - \sigma)y^{(2)}(t_*) = \\ &= U(t_*) + [\sigma\tau_1 + (1 - \sigma)\tau_2]\alpha(t_*) + O(\tau_1^2 + \tau_2^2)\end{aligned}$$

Определим σ из условия:

$$\sigma\tau_1 + (1 - \sigma)\tau_2 = 0$$

$$\sigma = \frac{\tau_2}{\tau_2 - \tau_1} \Rightarrow \tilde{y}(t_*) = U(t_*) + O(\tau^2),$$

где $\tau = \max[\tau_1, \tau_2]$.

Получен второй порядок точности по τ .

Пример.

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = t^2 + U^2, & t \in (0,1] \\ U(0) = 0 \end{cases}$$

Разностная схема:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \tau f(t_n, y_n) \\ y_0 = U_0 \end{cases}$$

$$\tau = 0,5$$

$$n = \overline{0,2}$$

$$t_n = n\tau = \{0; 0,5; 1\}$$

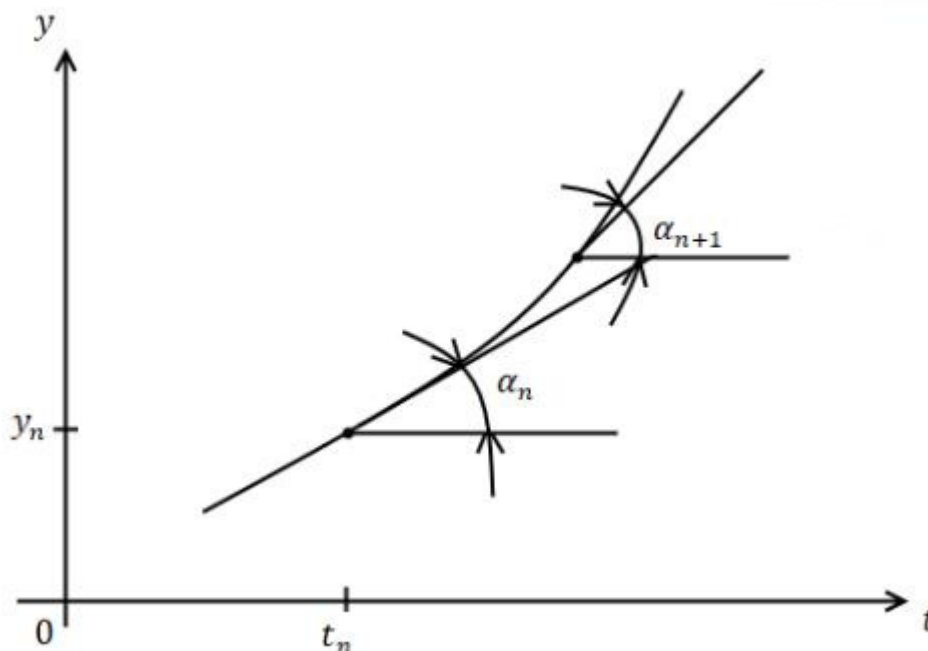
$$y_0 = 0$$

$$y_1 = y_0 + \tau(\tau_0^2 + y_0^2) = 0$$

$$y_2 = y_1 + \tau(\tau_1^2 + y_1^2) = 0 + 0,5(0,5^2 + 0) = 0,125$$

Геометрическая интерпретация метода Эйлера.

На n -ом шаге строим касательную к интегральной кривой в точке (t_n, y_n) .



После n -ого шага интегральная кривая заменяется ломаной Эйлера.

$$\operatorname{tg} \alpha_n = \frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_n, y_n)$$

Метод Рунге-Кутты второго порядка точности.

Найдём промежуточные значения \bar{y}_n по схеме Эйлера с шагом $\alpha\tau$ ($\alpha > 0$ – параметр)

$$\bar{y}_n = y_n + \alpha\tau f(t_n, y_n)$$

Найдём y_{n+1} по следующей формуле:

$$y_{n+1} = y_n + \tau(1 - \sigma)f(t_n, y_n) + \sigma\tau f(t_n + \alpha\tau, \bar{y}_n)$$

($\sigma > 0$ – параметр)

При выполнении условия $\alpha\sigma = 0,5$ схема имеет второй порядок точности.

Рассмотрим два случая:

$$I. \quad \sigma = 1, \quad \alpha = 0,5$$

Сначала делаем половинный шаг $\frac{\tau}{2}$ по схеме Эйлера:

$$\frac{\bar{y}_n - y_n}{\frac{\tau}{2}} = f(t_n, y_n)$$

$$\bar{y}_n = y_n + \frac{\tau}{2} f(t_n, y_n)$$

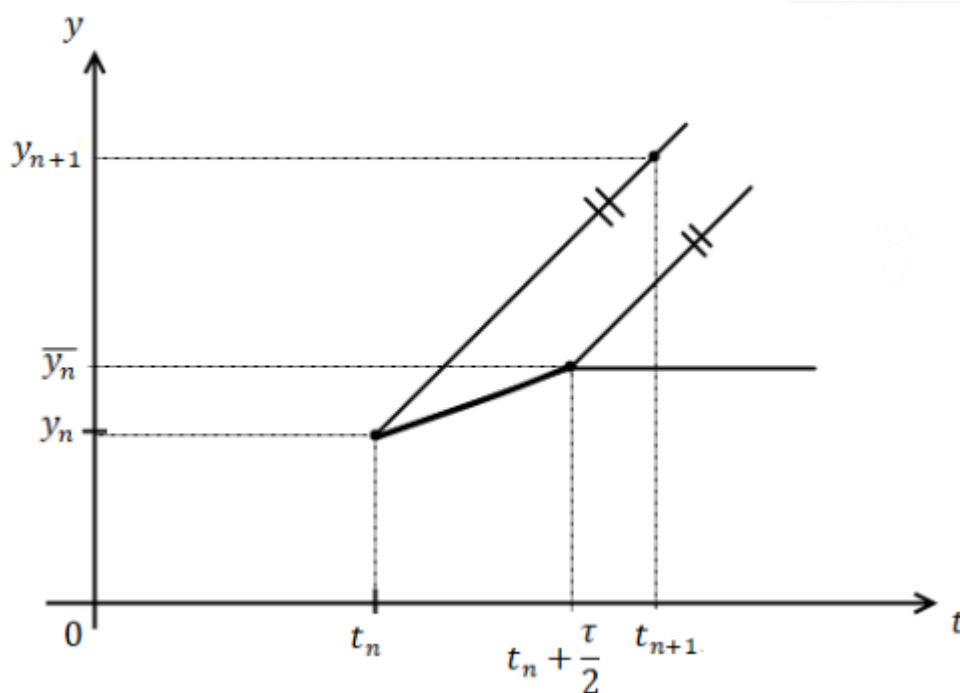
В найденной точке $(t_n + \frac{\tau}{2}, \bar{y}_n)$ определим тангенс угла наклона:

$$tg\alpha = y' \left(t_n + \frac{\tau}{2} \right) = f \left(t_n + \frac{\tau}{2}, \bar{y}_n \right)$$

По найденному значению $tg\alpha$ вычисляем приращение функции на целом шаге τ :

$$y_{n+1} = y_n + \tau f \left(t_n + \frac{\tau}{2}, \bar{y}_n \right)$$

Геометрическая интерпретация.



II. $\sigma = 0,5, \quad \alpha = 1$

Сначала применим схему Эйлера с шагом τ :

$$\bar{y}_n = y_n + \tau f(t_n, y_n)$$

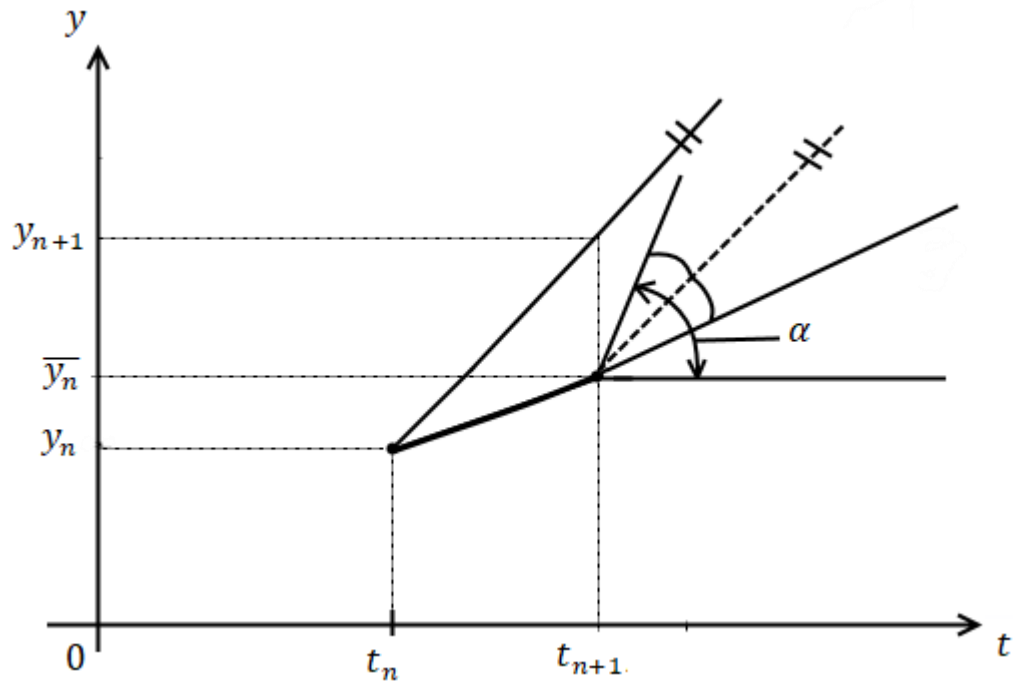
В новой точке $(t_{n+1} \equiv t_n + \tau, \bar{y}_n)$ вычислим $tg\alpha$:

$$tg\alpha = \bar{y}'_n = f(t_{n+1}, \bar{y}_n)$$

Корректируем значение y_{n+1} , применив схему с полусуммой:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = \frac{1}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \bar{y}_n)]$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\tau}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \bar{y}_n)]$$



Преимущества методов Рунге-Кутты:

- 1). Все методы имеют хорошую точность
- 2). Методы являются явными (поэтому легко программируются)
- 3). Допускают вычисления с переменным шагом