Приближение функций

1. Постановка задачи

Задача приближения (аппроксимации) функции состоит в замене заданной функции $f(x)$ другой функцией $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$, значения которой вычисляются легче. На рассматриваемом множестве значений аргумента x $f(x) \approx \varphi(x, c_1, \dots, c_n)$. Параметры $c_1, \dots, c_n$ подбираются из тех или иных условий близости $f(x)$ и $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$.

Необходимость аппроксимации функций возникает при обработке экспериментальных данных или при численном решении задач для восстановления значений функции в интересующих исследователя точках по ее известным значениям.

Задача приближения функции упрощается, если в качестве аппроксимирующей функции использовать обобщенный многочлен

$$\varphi(x, c_1, \dots, c_n) = \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x),$$

где $\varphi_k(x)$ – система линейно независимых функций, выбор которой основывается на свойствах аппроксимируемой функции $f(x)$. В этом случае говорят о <u>линейной аппроксимации</u>.

К <u>задаче интерполяции</u> (интерполирования) приходят, если в качестве условия близости $f(x)$ и $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$ принимают совпадение значений этих функций в n различных точках $x_1, \dots, x_n$ (узлах интерполяции). В этом случае значения параметров $c_1, \dots, c_n$ определяют в результате решения системы уравнений

$$\varphi(x_k, c_1, \dots, c_n) = f(x_k), \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Если в качестве интерполирующей функции выбирается обобщенный многочлен, то параметры $c_1, \dots, c_n$ удовлетворяют СЛАУ

$$\sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Для существования и единственности решения этой СЛАУ ее определитель должен быть отличным от нуля.

Интерполяция при помощи обобщенного многочлена наз. линейной.

Термин „интерполяция" часто используют в более узком смысле, подразумевая, что все точки, в которых требуется найти значения $f(x)$, расположены между какими-либо двумя узлами интерполяции: $x_i < x < x_j$. Если это требование нарушено, используется термин „экстраполяция".

Интерполирование алгебраическими многочленами. Пусть на отрезке $a \le x \le b$ заданы узлы интерполирования $x_0, x_1, \dots, x_n$, в которых известны значения функции $f(x_i)$, $i=0,1,\dots,n$. Построим многочлен n-й степени

$$P_n(x) = c_0 + c_1 x + \dots + c_n x^n,$$

значения которого в узлах x_i совпадают с $f(x_i)$:

$$P_n(x_i) = f(x_i), \quad i=0,1,\dots,n.$$

Такой многочлен наз. интерполяционным многочленом для функции $f(x)$ по узлам $\{x_i\}_{i=0,1,\dots,n}$.

Для любой непрерывной функции $f(x)$ задача построения интерполяционного многочлена имеет единственное решение при условии, что все узлы интерполирования различны. Действительно, коэффициенты многочлена $c_0, c_1, \dots, c_n$ удовлетворяют СЛАУ

$$c_0 + c_1 x_i + c_2 x_i^2 + \dots + c_n x_i^n = f(x_i), \quad i=0,1,\dots,n,$$

определитель которой является определителем Вандермонда, отличным от нуля.

2. Интерполяционные формулы Лагранжа и Ньютона

Интерполяционная формула Лагранжа представляет интерполяционный многочлен в виде линейной комбинации значений функции в узлах:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{j\ne i} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}$$

Легко видеть, что $P_n(x)$ — многочлен n-й степени, а $P_n(x_i) = f(x_i)$.

Интерполяционную формулу Лагранжа можно записать в другом виде. Рассмотрим многочлен степени $n+1$

$$\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n).$$

Его производная в точке $x=x_i$

$$\omega'(x_i) = (x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n) = \prod_{j\ne i}(x_i-x_j),$$

следовательно,

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\,\omega'(x_i)} f(x_i).$$

Разделённые разности. Разделенные разности являются аналогами соответствующих производных функции $f(x)$.

Разделенные разности первого порядка

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

Разделенные разности второго порядка

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

Если известны разделенные разности k-го порядка, то разделенные разности $k+1$-го порядка определяются равенством

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

Разделенные разности выражаются через значения функции $f(x)$ в узлах по формуле

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{1}{x_i - x_j}.$$

Эта формула доказывается методом мат. индукции.

Интерполяционная формула Ньютона выражает интерполяционный многочлен $P_n(x)$ через значение функции $f(x)$ в одном из узлов и разделенные разности функции $f(x)$, построенные по узлам $x_0, x_1, \ldots, x_n$:

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{i=1}^{n} f(x_0, \ldots, x_i) \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) =$$

$$= f(x_0) + (x-x_0) f(x_0, x_1) + (x-x_0)(x-x_1) f(x_0, x_1, x_2) + \ldots + (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}) f(x_0, x_1, \ldots, x_n).$$

Используя приведенную выше формулу для разделенных разностей, несложно установить, что интерполяционные многочлены, построенные по формулам Лагранжа и Ньютона, совпадают.

Интерполяционную формулу Ньютона целесообразно применять, если интерполируется одна и та же функция $f(x)$, но число узлов интерполяции постепенно увеличивается. Добавление нового узла не требует пересчета всех слагаемых в формуле Ньютона. Если же узлы фиксированы и интерполируются несколько функций, то предпочтение следует отдать формуле Лагранжа.

3. Остаточный член интерполяционной формулы

Пусть $P_n(x)$ - интерполяционный многочлен для функции $f(x)$ по узлам $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Функция $r_n(x) = f(x) - P_n(x)$ наз. погрешностью интерполирования или остаточным членом интерполяционной формулы. В узлах интерполирования погрешность $r_n(x)$ обращается в нуль. Для того чтобы оценить $r_n(x)$ в произвольной точке $x \in [a,b]$, $x \neq x_i$, рассмотрим вспомогательную функцию $g(s) = f(s) - P_n(s) - K\omega(s)$, $s \in [a,b]$,

$\omega(s) = \prod\limits_{i=0}^{n}(s - x_i)$. Постоянная K выбирается из условия $g(x)=0$, где x - точка, в которой требуется оценить погрешность интерполирования. Такая постоянная K всегда найдется, т.к. $x \neq x_i$, $f(x) - P_n(x) \neq 0$, $\omega(x) \neq 0$: $K = \frac{f(x) - P_n(x)}{\omega(x)}$.

Предположим, что функция $f(s)$ $n+1$ раз непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$. Функция $g(s)$ имеет на этом отрезке $n+2$ нуля в точках $x, x_0, x_1, \ldots, x_n$. Согласно теореме Ролля между двумя точками, в которых функция принимает равные значения (функция гладкая), существует по крайней мере одна точка, в которой равна нулю производная этой функции. Следовательно, $g'(s)$ имеет $n+1$ нуль на $[a,b]$, $g''(s)$ имеет n нулей и так далее. Функция $g^{(n+1)}(s)$ имеет хотя бы один нуль, т.е. $\exists\, \xi \in [a,b]$: $g^{(n+1)}(\xi) = 0$.

Дифференцируя $g(s)$ $n+1$ раз, получаем:

$$g^{(n+1)}(s) = f^{(n+1)}(s) - (n+1)!\,K,$$

откуда

$$f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!\,\frac{f(x) - P_n(x)}{\omega(x)} = 0.$$

Итак, погрешность интерполирования можно представить в виде

$$r_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\,\omega(x), \quad \xi \in [a,b],$$

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n),$$

и справедлива оценка

$$|f(x)-P_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega(x)|, \quad M_{n+1}=\max_{a\le x\le b}|f^{(n+1)}(x)|.$$

Представим погрешность интерполирования в ином виде. С этой целью рассмотрим разделенную разность порядка $n+1$:

$$f(x,x_0,x_1,\dots,x_n)=\frac{f(x)}{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}+\frac{f(x_0)}{(x_0-x)(x_0-x_1)\dots(x_0-x_n)}+$$
$$+\dots+\frac{f(x_n)}{(x_n-x)(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})}.$$

Вспоминая интерполяционную формулу Лагранжа, получаем:

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

откуда следует другое представление погрешности

$$f(x)-P_n(x)=\omega(x)f(x,x_0,x_1,\dots,x_n).$$

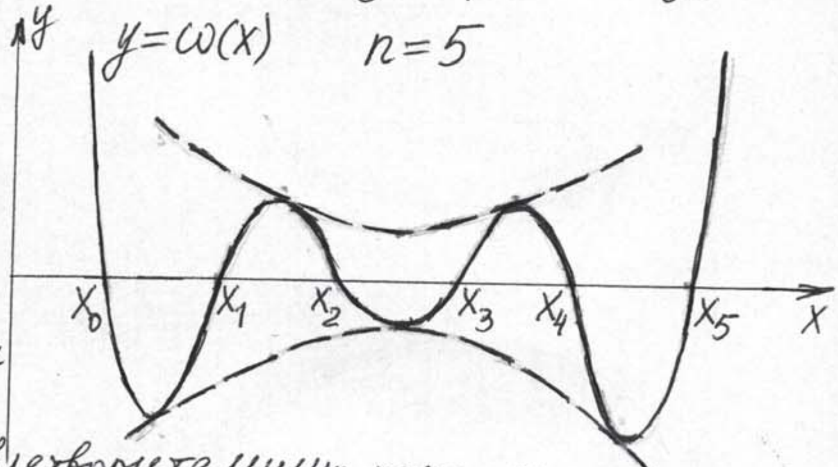
Это представление показывает, что при использовании интерполяционной формулы Ньютона целесообразно производить эмпирическую оценку погрешности по первому отброшенному слагаемому. В сумме удерживаются слагаемые, большие допустимой погрешности; число узлов, подключаемых в расчет, определяется в ходе расчета. Полученная таким образом оценка точности является апостериорной, т.к. делается после проведения вычислений.

Если известно максимальное значение производной M_{n+1}, то оценку погрешности можно произвести до построения интерполяционного многочлена, т.е. такая оценка является априорной. Строгие априорные оценки используются в основном при теоретическом исследовании методов.

При практическом контроле точности расчетов обычно употребляют менее строгие, но более удобные апостериорные оценки. Апостериорные оценки также имеют теоретическое обоснование. Использование на практике априорных оценок обычно затруднительно, т.к. производные искомой функции заранее неизвестны.

В оценку погрешности интерполяции входит $|\omega(x)|$. При произвольном расположении узлов оценить этот многочлен достаточно сложно. Рассмотрим частный случай <u>интерполяции на равномерной сетке</u> $x_i = x_0 + ih$, $i=1,2,\ldots,n$, где h – постоянный шаг, $h = x_i - x_{i-1}$. Качественное поведение $\omega(x)$ в этом случае такое: вблизи центрального узла значения $|\omega(x)|$ в точках экстремума невелики, вблизи крайних узлов – несколько больше, а при выходе за крайние узлы $|\omega(x)|$ быстро возрастает.

Схематический график $y=\omega(x)$ при $n=5$



Точность интерполирования будет хорошей вблизи центральных узлов сетки. Вблизи крайних узлов точность ухудшается. Расчитывать на удовлетворительную точность при экстраполяции ($x < x_0$ или $x > x_n$) не приходится.

Вблизи центральных узлов сетки справедлива оценка

$$|f(x) - P_n(x)| < \sqrt{\frac{2}{\pi n}}\, M_{n+1} \left(\frac{h}{2}\right)^{n+1}.$$

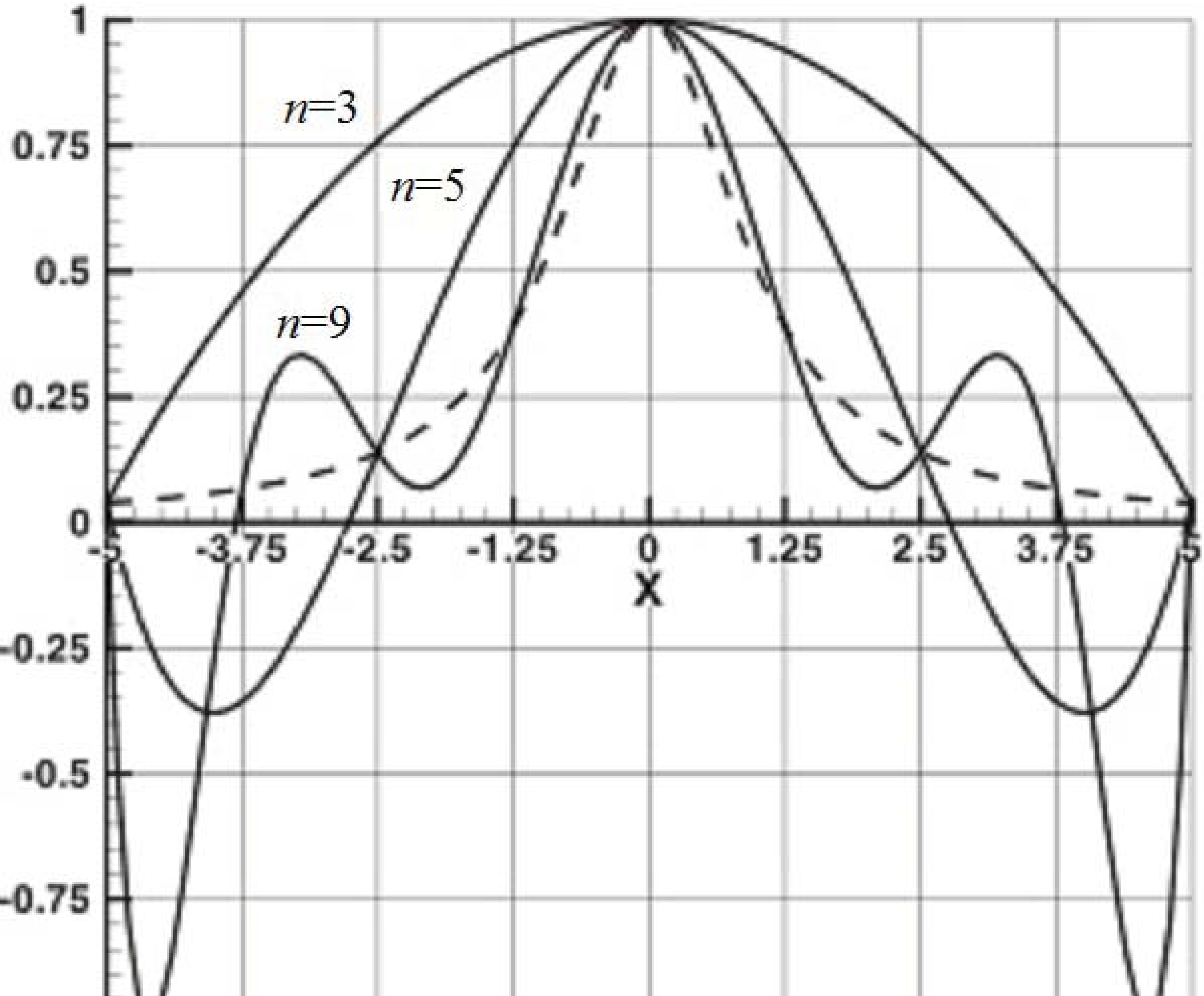
Отсюда видно, что при сгущении сетки погрешность убывает как h^{n+1}. Поэтому говорят, что интерполяционный многочлен n-й степени имеет погрешность $O(h^{n+1})$ и обеспечивает $n+1$-й порядок точности интерполяции.

<u>Замечание об оптимальном выборе узлов интерполирования.</u>

Величину $|\omega(x)|$ можно минимизировать за счет выбора узлов $x_i \in [a,b]$, $i=0,1,\ldots,n$. Известно, что величина $\max\limits_{a \le x \le b} |\omega(x)|$ достигает наименьшего значения, если в качестве узлов x_i выбрать корни многочлена Чебышёва первого рода $T_{n+1}(x)$

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, \quad i=0,1,\ldots,n,$$

при этом $\max\limits_{a \le x \le b} |\omega(x)| = \dfrac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}$. Узлы расположены сравнительно редко в середине отрезка и сгущаются у его концов. Но вне отрезка $[a,b]$ многочлен $\omega(x)$ все равно быстро возрастает. Выигрыш в точности при использовании в качестве узлов корней многочлена Чебышёва невелик.



1
0.75
0.5
0.25
0
-0.25
-0.5
-0.75
-1
-5
-3.75
-2.5
-1.25
0
1.25
2.5
3.75
5
X
n=3
n=5
n=9

4. Сходимость интерполяционного процесса

Возникает вопрос, будет ли стремиться к нулю погрешность интерполирования $f(x)-P_n(x)$ при $n\to\infty$. Ответ в общем случае отрицательный.

Множество точек $\Omega_n=\{x_0,x_1,\dots,x_n\}$ наз. сеткой на отрезке $[a,b]$, если $a\le x_0<x_1<\dots<x_n\le b$. Рассмотрим последовательность сеток с возрастающим числом узлов $\{\Omega_n\}_{n=0,1,2,\dots}$

Пусть функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $a\le x\le b$, а $\{P_n(x)\}_{n=0,1,2,\dots}$ – последовательность интерполяционных многочленов для функции $f(x)$, построенных на сетках Ω_n.

Говорят, что интерполяционный процесс для функции $f(x)$ <u>сходится в точке</u> $x_*\in[a,b]$, если существует

$$\lim_{n\to\infty} P_n(x_*)=f(x_*).$$

Говорят, что интерполяционный процесс для функции $f(x)$ <u>сходится равномерно</u> на отрезке $[a,b]$, если

$$\lim_{n\to\infty}\max_{a\le x\le b}|f(x)-P_n(x)|=0.$$

Сходимость интерполяционного процесса зависит как от выбора последовательности сеток, так и от гладкости функции $f(x)$.

<u>Теорема Фабера</u>. Какова бы ни была последовательность сеток Ω_n, найдется непрерывная на $[a,b]$ функция $f(x)$ такая, что последовательность интерполяционных многочленов $P_n(x)$ не сходится к $f(x)$ равномерно на $[a,b]$.

<u>Теорема Марцинкевича</u>. Если $f(x)$ непрерывна на $[a,b]$, то найдется такая последовательность сеток Ω_n, для которой интерполяционный процесс сходится равномерно на $[a,b]$.

Построить такие сетки очень сложно, кроме того, для каждой функции нужно строить свою последовательность сеток.

В практике вычислений избегают использования интерполяционных многочленов высокой степени. Вместо этого прибегают к <u>кусочно-полиномиальной интерполяции</u>: отрезок $[a,b]$ разбивают на частичные отрезки и на каждом частичном отрезке интерполируют функцию многочленом невысокой степени.

5. Интерполирование кубическими сплайнами

Сплайном (сплайн-функцией) наз. кусочно-полиномиальная функция, определенная на отрезке и имеющая на этом отрезке некоторое число непрерывных производных.
Преимущества интерполирования сплайнами: 1) сходимость интерполяционного процесса; 2) устойчивость вычислительного алгоритма.

Пусть непрерывная функция $f(x)$ задана на отрезке $a \le x \le b$.
Введем сетку $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$, $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \ldots, n$.
Кубическим сплайном для функции $f(x)$ на заданной сетке наз. функция $S(x)$, удовлетворяющая следующим условиям:
1) на каждом отрезке $x_{i-1} \le x \le x_i$ функция $S(x)$ является многочленом 3-й степени;
2) на отрезке $a \le x \le b$ функция $S(x)$ непрерывна вместе со своими первой и второй производными $S'(x)$, $S''(x)$;
3) функция $S(x)$ удовлетворяет условиям интерполяции
$$S(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Построение кубического сплайна. На каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ будем разыскивать $S(x)$ в виде многочлена 3-й степени:
$$S(x) = f_i + S_i'(x - x_i) + \frac{1}{2} S_i''(x - x_i)^2 + \frac{1}{6} S_i'''(x - x_i)^3, \quad x_{i-1} < x < x_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$
где S_i', S_i'', S_i''' – неизвестные постоянные, подлежащие определению из условий непрерывности функции и ее производных.
Легко видеть, что
$$S(x_i - 0) = f_i; \quad S'(x_i - 0) = S_i', \quad S''(x_i - 0) = S_i'', \quad S'''(x_i - 0) = S_i'''.$$
Условие интерполяции $S(x_0) = f_0$ и условия непрерывности $S(x)$, $S'(x)$, $S''(x)$ в точках $x_1, \ldots, x_{n-1}$ приводят к системе $3n-2$ линейных уравнений относительно неизвестных S_i', S_i'', S_i''':
$$\begin{cases} S(x_{i-1}+0) = S(x_{i-1}-0), \ i = 1, 2, \ldots, n, \\ S'(x_{i-1}+0) = S'(x_{i-1}-0), \ i = 2, 3, \ldots, n, \\ S''(x_{i-1}+0) = S''(x_{i-1}-0), \ i = 2, 3, \ldots, n, \end{cases} \quad \begin{cases} S(x_{i-1}+0) = f_{i-1}, \\ S'(x_{i-1}+0) = S_{i-1}', \\ S''(x_{i-1}+0) = S_{i-1}'' \end{cases}$$
В левые части уравнений подставим представление сплайна на отрезке $x_{i-1} < x < x_i$. В результате получим:

$$\begin{cases} f_i - S_i' h_i + \frac{1}{2} S_i'' h_i^2 - \frac{1}{6} S_i''' h_i^3 = f_{i-1}, \quad i = 1,2,\dots,n, \\ S_i' - S_i'' h_i + \frac{1}{2} S_i''' h_i^2 = S_{i-1}', \quad i = 2,3,\dots,n, \\ S_i'' - S_i''' h_i = S_{i-1}'', \quad i = 2,3,\dots,n. \end{cases}$$

Для однозначного определения неизвестных необходимы еще два уравнения, которые получают, задавая те или иные граничные условия для $S(x)$ на концах отрезка $[a, b]$. Эти условия задают, опираясь на информацию о поведении функции $f(x)$ на концах отрезка.

Предположим, что $f''(a) = 0$, $f''(b) = 0$. Тогда получаем два дополнительных уравнения: $S''(x_0 + 0) = 0$, $S''(x_n - 0) = 0$, откуда

$$S_1'' - S_1''' h_1 = 0, \quad S_n'' = 0.$$

В итоге приходим к замкнутой системе уравнений для определения коэффициентов кубического сплайна:

$$\begin{cases} h_i S_i''' = S_i'' - S_{i-1}'', \quad i = 1,2,\dots,n, \quad S_0'' = 0, \quad S_n'' = 0, \\ h_i S_i'' = \frac{1}{2} h_i^2 S_i''' + S_i' - S_{i-1}', \quad i = 2,3,\dots,n, \\ h_i S_i' = \frac{1}{2} h_i^2 S_i'' - \frac{1}{6} h_i^3 S_i''' + f_i - f_{i-1}, \quad i = 1,2,\dots,n \end{cases}$$

Полученные уравнения приводятся к СЛАУ относительно S_i''. С этой целью из последнего равенства найдем

$$S_i' - S_{i-1}' = \frac{1}{2}\left(h_i S_i'' - h_{i-1} S_{i-1}''\right) - \frac{1}{6}\left(h_i^2 S_i''' - h_{i-1}^2 S_{i-1}'''\right) + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}}, \quad i = 2,3,\dots,n,$$

из первого равенства выразим S_i''', S_{i-1}''' через S_i'', S_{i-1}'', S_{i-2}'' и подставим все полученные выражения в уравнение для $h_i S_i''$:

$$h_i S_i'' - \frac{1}{2} h_i \left(S_i'' - S_{i-1}''\right) = \frac{1}{2}\left(h_i S_i'' - h_{i-1} S_{i-1}''\right) - \frac{1}{6} h_i \left(S_i'' - S_{i-1}''\right) + \frac{1}{6} h_{i-1} \left(S_{i-1}'' - S_{i-2}''\right) + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}}, \quad i = 2,3,\dots,n,$$

откуда

$$h_{i-1} S_{i-2}'' + 2(h_{i-1} + h_i) S_{i-1}'' + h_i S_i'' = 6\left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}}\right), \quad i = 2,3,\dots,n.$$

Окончательно СЛАУ для определения коэффициентов s_i'' кубического сплайна записывается в виде:

$$h_i s_{i-1}'' + 2(h_i + h_{i+1}) s_i'' + h_{i+1} s_{i+1}'' = 6\left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}\right), \; i = 1, 2, \ldots, n-1$$

$$s_0'' = 0, \quad s_n'' = 0.$$

Остальные коэффициенты вычисляются по формулам:

$$s_i''' = \frac{s_i'' - s_{i-1}''}{h_i}, \quad s_i' = \frac{1}{2} h_i s_i'' - \frac{1}{6} h_i^2 s_i''' + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Матрица полученной СЛАУ является трехдиагональной (ленточной) с диагональным преобладанием (коэффициенты при s_i'' по модулю больше коэффициентов при s_{i-1}'', s_{i+1}''). Далее будет доказано, что такая СЛАУ имеет единственное решение, которое легко найти методом прогонки. Рассматриваемая СЛАУ удовлетворяет достаточным условиям устойчивости алгоритма метода прогонки, т.е. в процессе вычислений не происходит накопление погрешности.

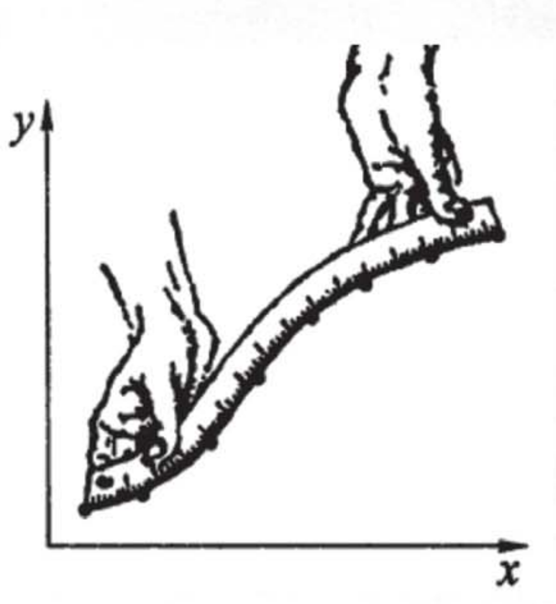
Таким образом, доказаны существование и единственность кубического сплайна на заданной сетке.

Замечание. Можно строить сплайны и с другими граничными условиями, матрица СЛАУ все равно останется трехдиагональной.

Сходимость процесса интерполирования кубическими сплайнами

При неограниченном увеличении числа узлов n соответствующая последовательность сплайн-функций $s_n(x)$ сходится к интерполируемой функции $f(x)$:

$$\lim_{n \to \infty} \max_{a \le x \le b} |f(x) - s_n(x)| = 0.$$



6. Метод прогонки решения СЛАУ с трехдиагональной матрицей.

Для численного решения СЛАУ с трехдиагональной (ленточной) матрицей применяется метод прогонки, который представляет собой вариант метода последовательного исключения неизвестных. СЛАУ с трехдиагональной матрицей имеет вид:

$$\begin{cases} a_0 z_0 + a_0^+ z_1 = a_0^0, \\ a_i^- z_{i-1} + a_i z_i + a_i^+ z_{i+1} = a_i^0, \ i=1,2,\dots,n-1, \\ a_n^- z_{n-1} + a_n z_n = a_n^0. \end{cases}$$

Решение системы разыскивается в виде

$$z_i = \xi_{i+1} z_{i+1} + \xi_{i+1}^0, \quad i=1,2,\dots,n-1,$$

где ξ_i, ξ_i^0 – прогоночные коэффициенты, подлежащие определению. Выразим z_{i-1} через z_{i+1}

$$z_{i-1} = \xi_i z_i + \xi_i^0 = \xi_i \xi_{i+1} z_{i+1} + \xi_i \xi_{i+1}^0 + \xi_i^0$$

и подставим записанные выше соотношения в СЛАУ:

$$\begin{cases} a_0(\xi_1 z_1 + \xi_1^0) + a_0^+ z_1 = a_0^0, \\ a_i^-(\xi_i \xi_{i+1} z_{i+1} + \xi_i \xi_{i+1}^0 + \xi_i^0) + a_i(\xi_{i+1} z_{i+1} + \xi_{i+1}^0) + a_i^+ z_{i+1} = a_i^0, \\ a_n^-(\xi_n z_n + \xi_n^0) + a_n z_n = a_n^0. \end{cases}$$

Из последнего уравнения выразим $z_n = \dfrac{a_n^0 - a_n^- \xi_n^0}{a_n + a_n^- \xi_n}$,

а в остальных уравнениях приравняем коэффициенты при неизвестных $z_1, \dots, z_n$ в левой и правой частях:

$$a_0 \xi_1 + a_0^+ = 0, \quad a_0 \xi_1^0 = a_0^0,$$

$$(a_i^- \xi_i + a_i)\xi_{i+1} + a_i^+ = 0, \quad (a_i^- \xi_i + a_i)\xi_{i+1}^0 + a_i^- \xi_i^0 = a_i^0, \ i=1,2,\dots,n-1.$$

В результате приходим к рекуррентным соотношениям для прогоночных коэффициентов:

$$\xi_{i+1} = -\frac{a_i^+}{a_i + a_i^- \xi_i}, \quad \xi_{i+1}^0 = \frac{a_i^0 - a_i^- \xi_i^0}{a_i + a_i^- \xi_i}, \quad i=1,2,\dots,n-1.$$

Начальными для рекуррентного процесса будут значения

$$\xi_1 = -\frac{a_0^+}{a_0}, \quad \xi_1^0 = \frac{a_0^0}{a_0}.$$

Вычисление коэффициентов ξ_i по такому алгоритму наз. прямым ходом прогонки.

__Обратный ход прогонки__ заключается в вычислении значений неизвестных z_i по рекуррентным формулам

$$z_{i-1} = \xi_i z_i + \xi_i^0, \quad i = n, n-1, \dots, 1.$$

Начальным для рекуррентного процесса является значение

$$z_n = \frac{a_n^0 - a_n^- \xi_n^0}{a_n + a_n^- \xi_n}.$$

Для возможности применения метода прогонки достаточно потребовать, чтобы коэффициенты СЛАУ удовлетворяли одному из условий:

1) $a_i^- \neq 0,\ a_i^+ \neq 0,\quad |a_i| \geq |a_i^-| + |a_i^+|,\ i = 1, 2, \dots, n-1,$
$|a_0| \geq |a_0^+|,\quad |a_n| > |a_n^-|;$

2) $a_i^- \neq 0,\ a_i^+ \neq 0,\quad |a_i| > |a_i^-| + |a_i^+|,\ i = 1, 2, \dots, n-1,$
$|a_0| \geq |a_0^+|,\quad |a_n| \geq |a_n^-|.$

Эти условия наз. __условиями диагонального преобладания.__ При выполнении одного из указанных условий прогоночные коэффициенты по модулю не превосходят единицы, а знаменатели рекуррентных соотношений отличны от нуля:

$$|\xi_i| \leq 1,\ i = 1, 2, \dots, n, \qquad a_i + a_i^- \xi_i \neq 0.$$

Доказательство проведем методом мат. индукции. Предположим, что выполнено первое из условий. Тогда $|\xi_1| \leq 1$. Предположим, что $|\xi_i| \leq 1$ и оценим $|\xi_{i+1}|$:

$$|a_i + a_i^- \xi_i| \geq \big|\,|a_i| - |a_i^-||\xi_i|\,\big| \geq \big|\,|a_i| - |a_i^-|\,\big| \geq |a_i^+| > 0,$$

$$|\xi_{i+1}| = \frac{|a_i^+|}{|a_i + a_i^- \xi_i|} \leq 1,$$ что и доказывает справедливость оценки $|\xi_i| \leq 1\ \forall i = 1, 2, \dots, n,$

$$|a_n + a_n^- \xi_n| \geq \big|\,|a_n| - |a_n^-||\xi_n|\,\big| \geq \big|\,|a_n| - |a_n^-|\,\big| > 0.$$

В случае выполнения второго условия док-во аналогично.

Таким образом, выполнение одного из условий диагонального преобладания обеспечивает существование и единственность решения СЛАУ, а также устойчивость вычислительного алгоритма метода прогонки. Погрешность при вычислениях по рекуррентным формулам не возрастает, т. к. $|\xi_i| \leq 1$.

7. Постановка задачи среднеквадратичного приближения функции

При решении задачи приближения (аппроксимации)

$$f(x) \approx \varphi(x, c_1, \dots, c_n), \quad a \le x \le b,$$

параметры $c_1, \dots, c_n$ подбираются из тех или иных условий близости функции $f(x)$ к аппроксимирующей функции $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$. В случае задачи интерполирования в качестве условия близости принимают совпадение значений функций в узлах интерполирования. Такой подход не является единственно возможным, более того, он не всегда оправдан.

При среднеквадратичном приближении функции $f(x)$ в качестве меры ее отклонения от аппроксимирующей функции $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$ принимается среднеквадратичное отклонение

$$\delta = \left(\frac{\int_a^b \rho(x) \left(f(x) - \varphi(x, c_1, \dots, c_n) \right)^2 dx}{\int_a^b \rho(x) dx} \right)^{\frac{1}{2}},$$

а параметры $c_1, \dots, c_n$ подбирают из условия минимума среднеквадратичного отклонения. Здесь $\rho(x)$ – весовая функция (вес), $\rho(x) > 0 \ \forall x \in [a, b]$. Весовая функция подбирается таким образом, чтобы ее значения были больше для тех значений аргумента, при которых требуется лучшая локальная точность аппроксимации ($\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$ ближе к $f(x)$).

В случае дискретного (точечного) среднеквадратичного приближения (приближения по методу наименьших квадратов) среднеквадратичное отклонение определяется следующим образом:

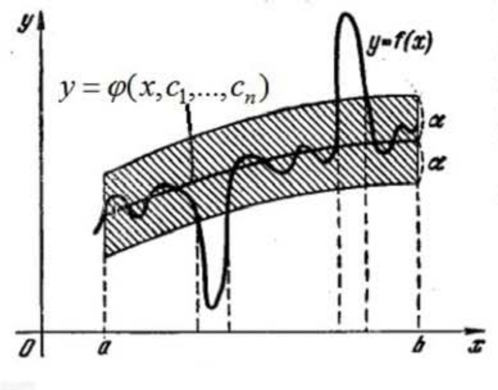
$$\delta = \left(\frac{\sum_{i=1}^{m} \rho_i \left(f(x_i) - \varphi(x_i, c_1, \dots, c_n) \right)^2}{\sum_{i=1}^{m} \rho_i} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

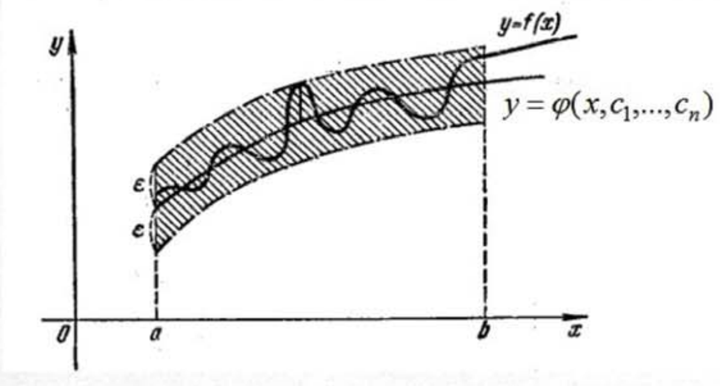
Параметры $c_1, \dots, c_n$ подбираются из условия минимума величины δ. Весовые коэффициенты (веса) $\rho_i > 0$ подбираются из тех же соображений, что и весовая функция $\rho(x)$, $x_i \in [a, b]$, $m > n$. При $m = n$ точечное среднеквадратичное приближение превращается в интерполяцию.

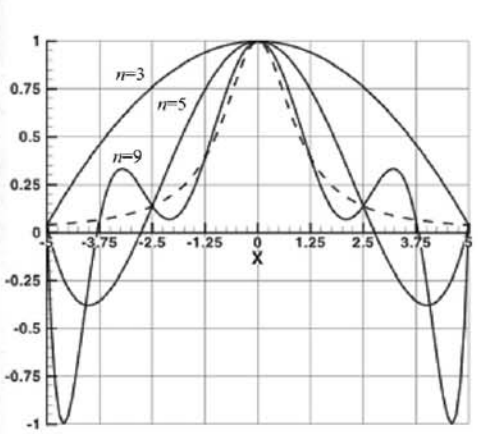
Приближение $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$, соответствующее минимальному значению среднеквадратичного отклонения δ, наз. наилучшим среднеквадратичным приближением.

Целесообразность использования среднеквадратичной аппроксимации обусловлена следующими факторами.

1. Интерполяция обеспечивает приемлемую точность только на небольших промежутках. С практической же точки зрения желательно иметь единую приближенную формулу $f(x) \approx \varphi(x, c_1, \dots, c_n)$, пригодную для отрезка $[a, b]$ большой длины.
2. Если число узлов m больше числа параметров $c_1, \dots, c_n$, то задача интерполирования становится переопределенной.
3. Во многих случаях нет необходимости требовать поточечной близости функций $f(x)$ и $\varphi(x, c_1, \dots, c_n)$, достаточно, чтобы эти функции были близкими в интегральном смысле, что и обеспечивает среднеквадратичное приближение.
4. Если приближаемая функция $f(x)$ задана дискретно (таблицей значений в конечном числе точек), то значения функции могут нести погрешности. В этом случае интерполирование лишено смысла: среднеквадратичные аппроксимации значительно лучше представляют функцию $f(x)$, чем интерполяционные многочлены.







8. Построение наилучшего среднеквадратичного приближения

Ограничимся рассмотрением линейной аппроксимации, когда аппроксимирующая функция представляет собой обобщенный многочлен:

$$\varphi(x, c_1, \ldots, c_n) = \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x),$$

где $\varphi_k(x)$ – базисные функции, которые выбираются, исходя из свойств аппроксимируемой функции $f(x)$. Базисные функции должны быть линейно независимыми и обеспечивать возможность приближения обобщенным многочленом (при надлежащем выборе числа слагаемых n и коэффициентов c_k) любой функции из того класса, к которому принадлежит $f(x)$.

Задача минимизации среднеквадратичного отклонения эквивалентна поиску минимума функции

$$F(c_1, \ldots, c_n) = \int_a^b \rho(x)\Big(f(x) - \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x)\Big)^2 dx.$$

Частные производные этой функции определяются следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = -2\int_a^b \rho(x)\Big(f(x) - \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x)\Big)\varphi_i(x)\,dx,$$

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = 2\sum_{k=1}^{n} (\varphi_i, \varphi_k)c_k - 2(f, \varphi_i),$$

где (f, g) обозначено скалярное произведение функций $f(x)$ и $g(x)$

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x)\,dx.$$

Таким образом, точки экстремума функции $F(c_1, \ldots, c_n)$ являются решениями СЛАУ

$$\sum_{k=1}^{n} (\varphi_i, \varphi_k)c_k = (f, \varphi_i), \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Определитель этой СЛАУ $\det(\varphi_i, \varphi_k)$ представляет собой известный определитель Грама, который отличен от нуля, если функции $\varphi_k(x)$ линейно независимы. Поэтому СЛАУ имеет единственное решение. Можно доказать, что это решение соответствует минимуму функции $F(c_1, \ldots, c_n)$, т.е. определяет наилучшее среднеквадратичное приближение.

Функции $\varphi_k(x)$ наз. ортогональными, если $(\varphi_i, \varphi_k) = 0$ при $i \neq k$. Если $\varphi_k(x)$ не ортогональные, то с ростом n определитель Грама быстро стремится к нулю, что приводит к потере точности при численном решении СЛАУ, поэтому в таких случаях нецелесообразно брать более 5–6 слагаемых в обобщенном многочлене.

Известно, что линейно независимая система функций $\varphi_k(x)$ может быть подвергнута процессу ортогонализации, в результате которого получается ортогональная система. Однако численная ортогонализация также приводит к большой потере точности. Поэтому если требуется большое число слагаемых в аппроксимирующем обобщенном многочлене, то нужно проводить процесс ортогонализации аналитически или пользоваться готовыми системами ортогональных функций.

Для среднеквадратичной аппроксимации удобно в качестве $\varphi_k(x)$ брать многочлены, ортогональные с заданным весом. Наиболее употребительны многочлены Якоби, Лагерра и Эрмита, а также многочлены Лежандра и Чебышева — частные случаи многочленов Якоби. Для аппроксимации периодических функций используют тригонометрическую систему функций.

<u>Точечное среднеквадратичное приближение</u>. В этом случае построение обобщенного многочлена наилучшего приближения сводится к минимизации функции

$$F(c_1, \dots, c_n) = \sum_{s=1}^{m} \rho_s \Big(f(x_s) - \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x_s) \Big)^2.$$

Получаем

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = -2 \cdot \sum_{s=1}^{m} \rho_s \Big(f(x_s) - \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x_s) \Big) \varphi_i(x_s),$$

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = 2 \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik} c_k - 2\beta_i, \quad \alpha_{ik} = \sum_{s=1} \rho_s \varphi_i(x_s) \varphi_k(x_s), \; \beta_i = \sum_{s=1} \rho_s f(x_s) \varphi_i(x_s).$$

Наилучшее приближение задается решением СЛАУ

$$\sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik} c_k = \beta_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Определитель этой СЛАУ отличен от нуля в силу линейной независимости функций $\varphi_k(x)$, поэтому наилучшее приближение существует и единственно.