ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В курсе «Вычислительные алгоритмы» рассматриваются методы и алгоритмы вычислительной математики и средства их реализации, используемые в различных областях инженерной и научной деятельности. Возникающие здесь задачи отличаются разнообразием постановок задач, большим объемом вычислительной работы, конкретным научно-техническим содержанием, широким спектром используемых подходов для решения, необходимостью завершения вычислительного процесса получением обширных числовых массивов и во многих случаях графическим представлением результатов моделирования. Изучаются вопросы построения алгоритмов вычислений для типичных задач, встречающихся в научно - технической практике и инженерных расчетах. Описание методов ориентировано на компьютерную реализацию соответствующих алгоритмов и позволяет осуществить их реальное воплощение в работающее программное обеспечение с использованием различных языков высокого уровня и инструментальных сред. Особенности алгоритмов и детали их реализации выясняются при выполнении лабораторного практикума.

1. АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ

Под **аппроксимацией** понимается некоторое **приближение**, приближенное представление. Соответственно, если речь идет об аппроксимации функции, то ставится вопрос о ее замене другой, например, более простой функцией, которая в каком-то смысле близка к заданной. Если ставится задача аппроксимации дифференциального уравнения, то речь может идти о его замене на разностный аналог, построенный на некоторой сетке в области интегрирования исходного уравнения, в результате строится система алгебраических уравнений, аппроксимирующих исходную дифференциальную задачу. И так далее.

В данном разделе рассмотрены вопросы аппроксимации функций одной или нескольких переменных, заданных таблично. При этом возникает необходимость определения значений функции для значений аргумента, отличающихся от тех, которые содержатся в таблице. В этих целях применяют процедуру интерполяции, а также экстраполяции. По сути, речь идет о восстановлении непрерывной функции по заданному набору ее значений для счетного множества значений аргумента. Задача восстановления функции может ставиться и иначе, когда ищется функция, близкая в определенном смысле к таблично заданной функции (например, наилучшее среднеквадратичное приближение). В обоих случаях исходную функциональную зависимость $y(x)$, по которой сопоставлена таблица, заменяют приближенной функцией $\varphi(x,\bar{a})$, которую и используют в дальнейших вычислениях. При этом близость $y(x)$ и $\varphi(x,\bar{a})$ обеспечивается подбором свободных параметров $\bar{a}=\{a_0,a_1,\ldots,a_n\}$в соответствии с некоторым критерием, определяющим степень совпадения аппроксимируемой и аппроксимирующей функций.

Отметим, что в ходе процедуры аппроксимации может решаться задача сглаживания или исправления функции, если исходные данные искажены погрешностью.

1. 1. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Вначале остановимся на интерполяции функции одной переменной. В простейшем варианте лагранжевой интерполяции, когда функция $y(x)$ задана в узлах некоторой сетки x_i, параметры $\bar{a}$ определяют из условия совпадения $\varphi(x,\bar{a})$ со значениями функции в фиксированном числе узлов.

Получаемая при этом система уравнений имеет вид

$$\varphi(x_i,a_0,a_1,\ldots,a_n)=y(x_i)\equiv y_i,0\le i\le n. \qquad (1.1)$$

Из этой системы можно определить все a_i.

Интерполяция может быть линейной или нелинейной, в соответствии с характером зависимости функции $\varphi(x,\bar{a})$ от параметров $\bar{a}$.

1.1.1. Линейная интерполяция. Полином Ньютона.

При линейной интерполяции функция $\varphi(x,\bar{a})$ имеет вид

$$\varphi(x,\bar{a})=\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x), \qquad (1.2)$$

где все функции $\varphi_j(x)$, называемые базисными, линейно независимы. В качестве базисных функций выбирают целые степени полинома, синусы и косинусы кратных углов, различные ортогональные полиномы.

Подставляя (1.2) в (1.1), получим систему линейных уравнений для определения a_i:

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) = y_i, \quad 0 \le i \le n. \tag{1.3}$$

Единственность решения обеспечивается требованием неравенства нулю определителя системы (1.3):

$$\Delta = \begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0)\ldots & \varphi_n(x_0) \\ . & \ldots & . \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n)\ldots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \ne 0 \tag{1.4}$$

при $x_k \ne x_l$ (т.е. при любых несовпадающих узлах).

Систему функций, удовлетворяющую условию (1.4), называют чебышевской. Из различных систем функций наиболее распространены многочлены, хотя применяют также тригонометрические и экспоненциальные функции.

Если в качестве системы функций выбрать степенные функции аргумента, т.е. $\varphi_j(x) = x^j$, то определитель (1.4) окажется определителем Вандермонда, который не равен нулю при условии $x_k \ne x_l$. Следовательно, интерполяционный полином всегда существует и он единствен.

Для практических вычислений удобно использовать многочлен $P_n(x)$ в форме интерполяционного полинома Ньютона. Введем понятие разделенных разностей функции $y(x)$, заданной в узлах x_i:

$$\begin{aligned} & y(x_i, x_j) = [\, y(x_i) - y(x_j)] / (x_i - x_j), \\ & y(x_i, x_j, x_k) = [\, y(x_i, x_j) - y(x_j, x_k)] / (x_i - x_k), \\ & y(x_i, x_j, x_k, x_l) = [\, y(x_i, x_j, x_k) - y(x_j, x_k, x_l)] / (x_i - x_l), \end{aligned} \tag{1.5}$$

Правило образования таких конструкций понятно из приведенной записи. Разделенные разности первого, второго и более высоких порядков связаны с производными соответствующих порядков.

Можно показать, что полином представим через разделенные разности в виде:

$$P_n(x) = P_n(x_0) + (x - x_0) P(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1) P(x_0, x_1, x_2) + \ldots$$

$$+(x-x_0)(x-x_1)..(x-x_{n-1})P(x_0,x_1,x_2,..,x_n) \qquad (1.6)$$

Таким образом, мы выразили многочлен n- ой степени через его значения в $(n+1)$узлах $x_0,x_1,x_2,..,x_n$. Ввиду того, что значения интерполяционного полинома в этих узлах совпадают со значениями интерполируемой функции, разделенные разности, входящие в (1.6), выражаются через узловые значения функции. В результате получается полином, называемый интерполяционным многочленом Ньютона:

$$y(x) \approx y(x_0)+\sum_{k=1}^{n}(x-x_0)(x-x_1)..(x-x_{k-1})\ y(x_0,..,x_k). \qquad (1.7)$$

При вычислениях по этой формуле точность расчетов удобно оценивать, наблюдая за тем, насколько быстро убывают члены ряда. Если это происходит достаточно быстро, можно оставлять только те члены, которые больше заданной погрешности расчетов. В (1.7) безразличен порядок нумерации узлов, что очень удобно при подключении новых узлов для построения полинома более высокого порядка.

Погрешность многочлена Ньютона можно оценить по формуле

$$\left|y(x)-P_n(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|\varpi_n(x)\right|,$$

где $M_{n+1}=max\left|y^{(n+1)}(\xi)\right|$ - максимальное значение производной интерполируемой функции на отрезке между наименьшим и наибольшим из значений $x_0,x_1,x_2,..,x_n$, а полином

$$\varpi_n(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i).$$

На равномерной сетке узлов приведенная формула трансформируется к виду

$$\left|y(x)-P_n(x)\right| < \sqrt{\frac{2n}{\pi}}M_{n+1}\left(\frac{h}{2}\right)^{n+1}, \qquad (1.8)$$

,где $h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = \cdots$ (предполагается, что шаг сетки постоянен). Выражение (1.8) свидетельствует, что с уменьшением расстояния между узлами (шага) h погрешность представления функций полиномом Ньютона убывает как $O(h^{n+1})$.

Трудность использования указанных теоретических оценок на практике состоит в том, что производные интерполируемой функции обычно неизвестны, поэтому для определения погрешности удобнее воспользоваться оценкой первого отброшенного члена.

Пример 1.1. Построить интерполяционный полином Ньютона четвертой степени для функции $y(x) = cos(2x)$ в области значений аргумента $0 \le x \le \pi / 4$.

Пусть задано значение x=0.6. Заполним таблицу разделенных разностей, вычисляемых по пяти узлам, представив для удобства вычислений $y(z) = cos[(\pi / 2) z],\ 0 \le z \le 1$.

z_i	$y(z_i)$	$y(z_i, z_k)$	$y(z_i, z_k, z_l)$	$y(z_i, \ldots, z_m)$	$y(z_0, \ldots, z_4)$
0	**1**				
		-0,304			
0,25	**0,924**		-1,128		
		-0,868		0,363	
0,5	**0,707**		-0,856		0,149
		-1,296		0,512	
0,75	**0,383**		-0,472		
		-1,532			
1	**0**				

Полином Ньютона

$$y(z) \approx 1 - 0{,}304z - 1{,}128z(z - 0{,}25) + 0{,}363z(z - 0{,}25)(z - 0{,}5) +$$
$$+ 0{,}149z(z - 0{,}25)(z - 0{,}5)(z - 0{,}75)$$

Вычислим

$$y(0{,}6) \approx 1 - 0{,}182 - 0{,}237 + 7{,}623 \cdot 10^{-3} - 4{,}694 \cdot 10^{-3} = 0{,}589.$$

В формировании полинома участвуют только те разделенные разности, которые находятся в верхней строке таблицы (наклонной в нашем представлении таблицы). Остальные разности нужны только для вычисления этих разностей.

Отметим, что точное значение $y(0{,}6) = 0{,}588$, т.е. точность вычислений по формуле полинома Ньютона оказалась весьма высокой. Это произошло из-за высокой гладкости интерполируемой функции.

Опишем алгоритм построения полинома Ньютона.

В качестве исходных данных задаются: таблично интерполируемая функция, значение аргумента x, для которого выполняется интерполяция, и степень полинома.

1. Формируется конфигурация из (n+1)-го узлов, по возможности симметрично расположенных относительно значения x (понятно, что вблизи краев таблицы это невозможно).

2. На сформированной конфигурации узлов строится вспомогательная таблица, аналогичная той, которая представлена в вышеприведенном примере.

3. Строится полином Ньютона с разделенными разностями, взятыми из верхней строки таблицы.

Наконец, сделаем замечание о так называемой **обратной интерполяции.**

Обратная интерполяция применяется для приближенного нахождения корня монотонных функций. Суть ее состоит в том, что в таблице этой функции меняются местами столбцы и выполняется обычная интерполяция при задании аргумента, равным нулю.

Факт наличия корня у функции устанавливается по наличию смены знака у функции при продвижении по строкам таблицы.