МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

А.Н. Гудович, Н.Н. Гудович

КРАТКИЙ КУРС ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Выпуск 1
Приближение функций
алгебраическими многочленами

Учебное пособие

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2017

Утверждено научно-методическим советом факультета прикладной математики, информатики и механики 10 октября 2017 г., протокол № 2

Рецензент – кандидат физико-математических наук, доцент В.П. Трофимов

Подготовлено на кафедре вычислительной математики и прикладных информационных технологий факультета прикладной математики, информатики и механики Воронежского государственного университета.

Рекомендовано для студентов 3-го и 4-го курсов факультета прикладной математики, информатики и механики.

Для направления 01.03.02 – Прикладная математика и информатика

Глава 1. Интерполяция. Многочлен Лагранжа

§1. Понятие интерполяционного многочлена

Термин «интерполяция» имеет латинское происхождение. Латинское слово *interpolatio* образовано с помощью приставки *inter* (между, внутри) и глагола *polire* (восстанавливать, ремонтировать) и потому означает восстановление фрагмента массива данных по предыдущему и последующему фрагментам. Например, интерполяция в летописи – это восстановление утраченного фрагмента летописи на основе анализа предшествующего и последующего текста.

В математике под *задачей интерполяции* первоначально понимали восстановление значения функции в точке, расположенной между заданными точками a, b, по известным значениям $f(a)$, $f(b)$ функции в этих точках.

Пусть

$$x_0=a, \quad x_1=b \tag{1.1}$$

– заданные точки,

$$f(x_0)=f(a), \quad f(x_1)=f(b) \tag{1.2}$$

– заданные значения функции в этих точках, а x^* – внутренняя точка отрезка $[a, b]$.

Для приближенного решения задачи интерполяции рассмотрим многочлен первой степени

$$p_1(x)=a_0+a_1 x \tag{1.3}$$

и подберем его коэффициенты a_0, a_1 так, чтобы в точках x_0, x_1 этот многочлен принимал те же значения, что и функция f, т.е. подберем из условий

$$a_0+a_1\,x_0=f(x_0),\quad a_0+a_1\,x_1=f(x_1). \qquad (1.4)$$

Решая систему (1.4) относительно неизвестных $a_0,\ a_1$, подставляя полученные значения этих коэффициентов в выражение для многочлена p_1 и вычисляя значение $p_1(x^*)$, получим число, которое и принимается в качестве приближенного значения функции f в интересующей нас внутренней точке x^*:

$$f(x^*)\cong p_1(x^*).$$

Описанный прием нахождения приближенных значений функции называют *линейной интерполяцией*, поскольку в качестве этих приближений здесь используются значения многочлена (1.3) первой степени, т.е. значения линейной функции. При этом сам многочлен (1.3) называют *интерполяционным многочленом* первой степени, построенным по значениям (1.2) функции f в *узлах интерполяции* (1.1).

С геометрической точки зрения использование линейной интерполяции соответствует (см. рис. 1) замене графика функции f графиком интерполяционного многочлена (1.3) – прямой линией, проведенной через точки плоскости $(a, f(a)), (b, f(b))$.

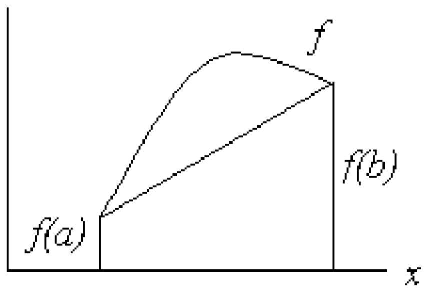

рис. 1

Далее, пусть кроме значений функции f на концах отрезка $[a, b]$ нам задано значение $f(c)$ в некоторой внутренней фиксированной точке c нашего отрезка $(a<c<b)$. Тогда для приближенного нахождения значений f в остальных точках отрезка естественно воспользоваться многочленом второй степени

$$p_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2, \tag{1.5}$$

подобрав его коэффициенты так, чтобы значения этого многочлена в точках a, c, b совпадали со значениями функции f, т.е. подобрав их из условий:

$$p_2(a)=f(a),\ \ p_2(c)=f(c),\ \ p_2(b)=f(b). \tag{1.6}$$

Если ввести для узлов интерполяции a, c, b обозначения

$$x_0=a,\ \ x_1=c,\ \ x_2=b, \tag{1.7}$$

то условия (1.6) примут вид

$$\begin{gathered} a_0+a_1x_0+a_2(x_0)^2=f(x_0),\\ a_0+a_1x_1+a_2(x_1)^2=f(x_1),\\ a_0+a_1x_2+a_2(x_2)^2=f(x_2) \end{gathered} \tag{1.8}$$

и дадут систему линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов многочлена (1.5).

Описанный способ приближения функций называют *квадратичной* или *параболической* интерполяцией, поскольку для приближенной замены функции здесь используется квадратный трехчлен (1.5), графиком которого является парабола (см. рис. 2, где в качестве c взята середина отрезка).

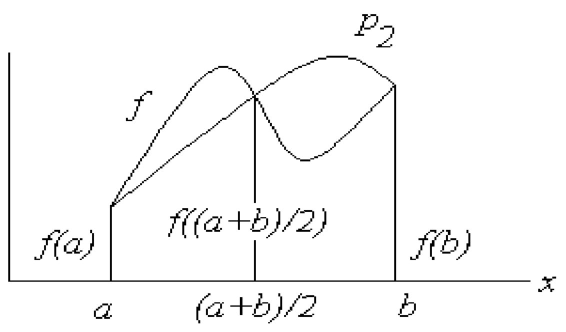

рис. 2

Упражнение 1.1. Функция f принимает в точках $1, 2, 3$ соответственно значения $3, 6, 11$. Используя параболическую интерполяцию, найти приближенное значение функции в точке $1{,}5$.

Решение. Точки (1.7) есть точки $1, 2, 3$, а потому система (1.8) имеет в данном случае вид

$$a_0+a_1+a_2=3,\ \ a_0+2a_1+4a_2=6,\ \ a_0+3a_1+9a_2=11. \tag{1.9}$$

Решаем эту систему *методом последовательного исключения неизвестных*. Именно, первое уравнение оставляем без изменений, а из остальных уравнений исключаем неизвестное a_0, вычитая из второго и третьего уравнений первое уравнение. Тогда придем к подсистеме

$$a_1+3a_2=3,\ \ 2a_1+8a_2=8$$

или (после деления второго из полученных уравнений на 2) к подсистеме

$$a_1+3a_2=3,\ \ a_1+4a_2=4. \tag{1.10}$$

Далее действуем аналогичным образом: первое из уравнений подсистемы оставляем без изменений, а из второго уравнения вычитаем первое. В результате приходим к уравнению

$$a_2=1.$$

Для нахождения a_1 подставляем найденное значение a_2 в первое из уравнений подсистемы (1.10) и получаем для неизвестного a_1 значение $a_1=0$. Наконец, подстановка найденных значений a_1 и a_2 в первое из уравнений (1.9) дает $a_0=2$.

Итак, интерполяционный многочлен имеет вид

$$p_2(x)=2+x^2,$$

а потому приближенное значение функции в точке $1,5$ равно $4,25$.

Мы ознакомились с понятием интерполяции на простых частных случаях. Рассмотрим теперь общую ситуацию.

Пусть f – заданная на отрезке $[\,a\,,\,b\,]$ функция, а

$$x_0,\, x_1,\, \dots\,,\, x_n \tag{1.11}$$

– попарно различные точки этого отрезка.

Определение 1.2. *Интерполяционным многочленом степени не выше* n (обозначение $p_n\,(x;\,\{x_i\}_{i=0,\,\dots\,,\,n};\,f)$) называют многочлен вида

$$p(\,x\,) = a_0 + \; a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n\,, \tag{1.12}$$

значения которого в точках (1.11) совпадают со значениями функции f:

$$p_n\,(\,x_k\,;\,\{\,x_i\,\}_{i=0,\,\dots\,,\,n}\,;\,f\,)=f\,(x_k), \quad k = 0,\,1,\,\dots\,,\,n; \tag{1.13}$$

при этом точки (1.11) называют *узлами интерполяции*, а функцию f – *интерполируемой функцией*.

Замечание 1.3. Многочлен $p_n(x; \{x_i\}, f)$ как функция переменной x зависит, во-первых, от функции f и, во-вторых, от выбора узлов интерполяции (1.11), что и отражено в обозначении. В том случае, когда ясно, о каком наборе узлов и какой функции идет речь, естественно использовать более простое обозначение: $p_n(x)$.

Теорема 1.4. Для любого набора (1.11) попарно различных узлов интерполяции на отрезке $[a,b]$ и любой заданной на $[a,b]$ функции f интерполяционный многочлен $p_n(x; \{x_i\}; f)$ существует и единственен.

Доказательство. Воспользовавшись формулой (1.12), перепишем условия (1.13) в виде:

$$a_0 + a_1 x_k + a_2 (x_k)^2 + \ldots + a_m (x_k)^m + \ldots + a_n (x_k)^n = f(x_k), \quad k=0,1, \ldots ,n. \qquad (1.14)$$

Если набор узлов (1.11) зафиксировать, то соотношения (1.14) можно рассматривать как систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов a_0, a_1, ... , a_m, ... , a_n интерполяционного многочлена $p_n(x; \{x_i\}, f)$, и потому вопрос о существовании и единственности этого многочлена эквивалентен вопросу об однозначной разрешимости этой системы при любых правых частях

$$f(x_0), f(x_1), \ldots , f(x_k), \ldots , f(x_n). \qquad (1.15)$$

Матрица системы (1.14) имеет специальный вид: её m-тый ($m=0,1, \ldots ,n$) столбец составлен из m-тых степеней чисел (1.11). Матрицы такого типа в алгебре называют матрицами *Вандермонда*; для построения матрицы B этого класса выбирают (не обязательно различные) числа

$$b_0, b_1, \ldots , b_k, \ldots , b_n, \qquad (1.16)$$

возводят их в m-тую степень и полученный упорядоченный набор чисел

$$(b_0)^m,\ (b_1)^m,\ \dots,\ (b_k)^m,\ \dots,\ (b_n)^m$$

записывают в виде m-того столбца матрицы B. Известен способ вычисления определителя такой матрицы: сначала следует образовать всевозможные разности

$$b_i - b_j \quad , \quad i>j \tag{1.17}$$

чисел (1.16), а затем их перемножить:

$$det\, B = \prod_{i>j} (b_i - b_j). \tag{1.18}$$

В нашем случае роль чисел (1.16) играют числа (1.11): $b_k = x_k$, $k=0,1, \dots ,n$. В силу предположения о том, что узлы интерполяции – попарно различные точки отрезка $[a,b]$, разности (1.17), а значит, и их произведение (1.18) – определитель системы (1.14) – отличны от нуля. Но тогда система однозначно разрешима при любых правых частях (1.15), что и гарантирует существование и единственность интерполяционного многочлена.

Замечание 1.5. Проведенные рассуждения указывают и способ построения интерполяционного многочлена: по заданным узлам интерполяции (1.11) и значениям (1.15) интерполируемой функции составляем систему (1.14), решаем её относительно $a_0, a_1, \dots, a_n$ и подставляем полученные a_m в (1.12). Такой способ построения $p_n(x)$ называют *методом неопределённых коэффициентов*.

Замечание 1.6. Если в результате решения системы (1.14) для старших коэффициентов $a_n, a_{n-1}, \dots, a_{n-r}$ будут получены нулевые значения, то фактическая степень интерполяционного многочлена окажется строго меньше n (по этой причине в определении 1.2 мы говорим о многочлене степени не выше n, а не о многочлене n-ой степени).

Замечание 1.7. Укажем, что в определении 1.2 и теореме 1.4 не предполагается, что крайние точки набора узлов (1.11) совпадают с концами отрезка $[a, b]$, а точки (1.11) занумерованы в порядке возрастания.

Считается лишь, что узлы интерполяции – попарно различные точки отрезка $[a, b]$, в которых известны значения функции f. Выбор набора узлов влияет на коэффициенты интерполяционного многочлена, поскольку узлы интерполяции входят в матрицу системы (1.14). Что же касается нумерации узлов в пределах выбранного набора узлов интерполяции, то она не существенна, так как перенумерация узлов соответствует перестановке уравнений системы, что, очевидно, не влияет на решение.

§2. Многочлен Лагранжа.

Недостаток изложенного выше метода неопределенных коэффициентов заключается в необходимости решения системы уравнений для нахождения коэффициентов интерполяционного многочлена. Лагранжем предложен способ построения интерполяционного многочлена, который не требует решения каких бы то ни было линейных систем. Суть этого способа удобно изложить применительно к случаю $n=2$.

Упражнение 2.1. Выписать многочлен второй степени, который в узлах x_1, x_2 был бы равен нулю, а в узле x_0 равнялся бы единице.

Решение. Многочлен

$$(x-x_1)(x-x_2). \tag{2.1}$$

в узлах x_1, x_2 равен, очевидно, нулю. А так как узлы интерполяции попарно различны, в точке x_0 он примет ненулевое значение

$$(x_0-x_1)(x_0-x_2). \tag{2.2}$$

Деление многочлена (2.1) на число (2.2) и дает нужный многочлен второй степени.

Обозначим построенный многочлен через $l_0^{(2)}$:

$$l_0^{(2)}(x)=((x-x_1)(x-x_2))/((x_0-x_1)(x_0-x_2)). \qquad (2.3)$$

Верхний индекс в этом обозначении указывает на степень многочлена, а нижний есть номер узла, в котором многочлен равен единице.

Аналогичным образом строится многочлен

$$l_1^{(2)}(x)=((x-x_0)(x-x_2))/((x_1-x_0)(x_1-x_2)), \qquad (2.4)$$

равный единице в узле x_1 и нулю в остальных узлах x_0, x_2, и многочлен

$$l_2^{(2)}(x)=((x-x_0)(x-x_1))/((x_2-x_0)(x_2-x_1)), \qquad (2.5)$$

равный единице в узле x_2 и нулю в узлах x_0, x_1.

Теорема 2.2. Линейная комбинация многочленов (2.3), (2.4), (2.5) с коэффициентами $f(x_0), f(x_1), f(x_2)$ дает для функции f интерполяционный многочлен степени не выше второй с узлами интерполяции x_0, x_1, x_2.

Доказательство. В самом деле, линейная комбинация

$$f(x_0)\, l_0^{(2)}(x) + f(x_1)\, l_1^{(2)}(x) + f(x_2)\, l_2^{(2)}(x)$$

многочленов второй степени (2.3), (2.4), (2.5) есть многочлен степени не выше второй. Если подставить в эту сумму вместо x узел x_0, то, поскольку многочлены (2.4), (2.5) равны в этом узле нулю, второе и третье слагаемые линейной комбинации также окажутся равными нулю. Первое же слагаемое, поскольку многочлен (2.3) в точке x_0 по построению равен единице, окажется равным $f(x_0)$. Аналогичная проверка для узлов x_1, x_2

показывает, что в этих узлах значения линейной комбинации равны соответственно $f(x_1), f(x_2)$, так что действительно справедливо равенство

$$p_2(x)=f(x_0)\, l_0^{(2)}(x)+f(x_1)\, l_1^{(2)}(x)+f(x_2)\, l_2^{(2)}(x). \tag{2.6}$$

<u>Замечание 2.3</u>. Более подробная запись формулы (2.6) имеет вид

$$\begin{gathered}p_2(x)=f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+\\+f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.\end{gathered} \tag{2.7}$$

Если требуется найти приближенное значение функции f в какой-то точке x^*, то нет смысла приводить в формуле (2.7) подобные при степенях x, а следует сразу подставить в формулу (2.7) вместо x это значение x^* и вычислить получившееся арифметическое выражение.

<u>Упражнение 2.4</u>. Функция f принимает в узлах 1, 2, 4 соответственно значения $4, 7, 19$. Найти приближенное значение функции в точке 3.

Решение. Подстановка $x=3$ в формулу (2.7) дает:

$$p_2(3)=4\frac{(3-2)(3-4)}{(1-2)(1-4)}+7\frac{(3-1)(3-4)}{(2-1)(2-4)}+19\frac{(3-1)(3-2)}{(4-1)(4-2)}=-\frac{4}{3}+7+\frac{19}{3}=12.$$

В общем случае, когда задан набор $x_0, x_1,\ldots, x_n$ узлов интерполяции, для построения интерполяционного многочлена p_n действуем аналогично.

1. Фиксируя i ($i=0,1,\ldots, n$), составляем всевозможные разности $x-x_j$, $j\neq i$, а затем, перемножая эти разности, получаем многочлен n-ой степени

$$\prod_{j=0,\, j\neq i}^{n}(x-x_j), \tag{2.8}$$

равный нулю во всех узлах, кроме x_i, и принимающий в узле x_i ненулевое значение

$$\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x_i - x_j). \tag{2.9}$$

2. Делим многочлен (2.8) на число (2.9) и получаем многочлен n-й степени

$$l_i(x) = \left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x - x_j)\right) / \left(\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x_i - x_j)\right), \tag{2.10}$$

равный единице в узле x_i и нулю в остальных узлах:

$$l_i(x_k) = \begin{cases} 1, & k = i \\ 0, & k \neq i. \end{cases} \tag{2.11}$$

3. Выполняем указанные выше действия для всех i $(i=0, 1, \ldots, n)$ и составляем линейную комбинацию

$$\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x) \tag{2.12}$$

многочленов l_i с коэффициентами $f(x_i)$.

<u>Теорема 1.5</u>. Интерполяционный многочлен p_n и линейная комбинация (2.12) как функции переменной x совпадают:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x). \tag{2.13}$$

Доказательство. Линейная комбинация (2.12) многочленов (2.10) степени n, есть, очевидно, многочлен степени не выше n. Далее, фиксируем номер r узла интерполяции и полагаем $x=x_r$ в выражении (61). Тогда получим число

$$\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x_r). \tag{2.14}$$

В силу нижнего из равенств (2.11) слагаемые суммы (2.14), отвечающие значениям i, не равным r, обратятся в нуль, а оставшееся слагаемое, отвечающее индексу i, равному r, в силу верхнего из равенств (2.11) окажется равным $f(x_r)$. Следовательно, многочлен (2.12) степени не выше n в узле x_r принимает значение $f(x_r)$, что ввиду произвольности r и завершает доказательство.

Замечание 2.6. В более подробной записи формула (2.13) имеет вид

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \frac{\prod\limits_{j=0, j\neq i}^{n} (x - x_j)}{\prod\limits_{j=0, j\neq i}^{n} (x_i - x_j)}, \tag{2.15}$$

причем соотношение $j \neq i$ в этой записи означает, что индекс j в обозначении произведения принимает все значения от 0 до n кроме значения $j=i$.

Упражнение 2.7. Выписать формулу (2.15) при $n=3$, не пользуясь знаками «сигма» и «пи» для обозначения суммы и произведения.

Определение 2.8. Интерполяционный многочлен, записанный в форме (2.15), называется *многочленом Лагранжа*.

Замечание 2.9. Представления (1.12) и (2.15) – лишь разные формы записи интерполяционного многочлена: первое из них есть разложение интерполяционного многочлена по базису из функций 1, x, x^2,..., x^n, а второе – по базису из функций (2.10). Достоинство второго разложения состоит в том, что коэффициенты в разложении по базису (2.10) совпадают со значениями $f(x_i)$ функции f в узлах интерполяции, тогда как связь коэффициентов a_m разложения (1.12) с величинами $f(x_i)$ достаточно сложна.

§ 3. Погрешность интерполяции.

Изучим теперь вопрос о погрешности интерполяционного многочлена.

Определение 3.1. *Погрешностью интерполяционного многочлена в точке* $x \in [a,b]$ *(или погрешностью интерполяции в точке* x *)* называется величина

$$r_n(x) = f(x) - p_n(x), \tag{3.1}$$

т.е. разность значений функции и многочлена в точке x.

Исследование вопроса о погрешности начнем с рассмотрения частного случая.

Упражнение 3.2. Пусть функция f есть многочлен *2-ой* степени. Вывести формулу для погрешности линейной интерполяции.

Решение. В данном случае $n=1$, так что имеем два узла интерполяции x_0, x_1. При $n=1$ погрешность интерполяции (3.1) есть разность многочлена второй степени f и многочлена первой степени p_1. Поэтому она является многочленом второй степени. Известны корни этого многочлена – ими являются узлы интерполяции. Следовательно, для погрешности интерполяции справедливо представление:

$$f(x)-p_1(x)=K(x-x_0)(x-x_1), \tag{3.2}$$

где K – некоторая константа. Для ее нахождения дважды дифференцируем полученное равенство (3.2). Тогда, поскольку вторая производная от многочлена первой степени p_1 равна нулю, а вторая производная от правой части

$$K\,(x-x_0)(x-x_1)=K(x^2-(x_0+x_1)x+x_0\,x_1) \tag{3.3}$$

равенства (3.2) равна, очевидно, $K(2!)$, приходим к соотношению

$$f''(x) = (2!)K. \tag{3.4}$$

Вычисляя отсюда K и подставляя результат в (3.2), получим для погрешности интерполяции выражение

$$f(x)-p_1(x)=(1/2!)\,f''(x)(x-x_0)(x-x_1). \qquad (3.5)$$

Усложним задачу, заменив предположение о том, что приближаемая функция f есть многочлен степени 2, более общим предположением о существовании у этой функции непрерывных производных до второго порядка включительно.

Теорема 3.3. Пусть $f \in C^2[a,\ b]$, Тогда для погрешности линейной интерполяции в любой точке x отрезка $[a,\ b]$, отличной от узлов интерполяции, справедлива формула

$$f(x)-p_1(x)=\frac{1}{2!}f''(\xi(x))(x-x_0)(x-x_1), \qquad (3.6)$$

где $\xi\,(x)$ – точка, принадлежащая наименьшему отрезку вещественной оси, содержащему точку x и узлы интерполяции:

$$\xi(x) \in [\ min\{x,\ x_0,\ x_1\},\ max\{x,\ x_0,\ x_1\}\ ] \subseteq [a,b]. \qquad (3.7)$$

Доказательство. При проведении доказательства нам придется различать точку x^*, в которой оценивается погрешность интерполяции, и переменную x, по которой будут дифференцироваться функции.

Итак, зафиксируем отличную от узлов интерполяции точку x^* и по аналогии с (3.2) подберем константу K^* так, чтобы выполнялось равенство

$$f(x^*)-p_1(x^*) = K^*(x^*-x_0)(x^*-x_1). \qquad (3.8)$$

Для этого, очевидно, следует взять в качестве константы K^* величину

$$K^*= (\ f(x^*)-p_1(x^*)\ )\ /\ (x^*-x_0)(x^*-x_1)$$

Отметим, что отличие формул (3.2) и (3.8) состоит в том, что константа K в формуле (3.2) (случай многочлена степени 2) – одна и та же для всех x, тогда как константа в формуле (3.8) (случай дважды непрерывно дифференцируемой функции) зависит от выбора точки x^*, что и отражено в обозначении этой константы.

Составим теперь вспомогательную функцию переменной x

$$h(x) = f(x) - p_1(x) - K^*(x - x_0)(x - x_1)\ . \tag{3.9}$$

Равенство (3.8) означает, что в точке x^* функция (3.9) обращается в ноль. Кроме того, она равна нулю и в узлах интерполяции x_0, x_1, поскольку при подстановке в формулу (3.9) вместо x узла интерполяции третье слагаемое в правой части этой формулы обратится в ноль, а разность $f{-}p_1$ окажется равной нулю в силу совпадения в узле интерполяции значения функции и интерполяционного многочлена. Переобозначим эти три корня функции h символами $y_i^{(0)}$, $i{=}0,\ 1,\ 2$, чтобы получить упорядоченный по возрастанию набор корней

$$y_0^{(0)} < y_1^{(0)} < y_2^{(0)}. \tag{3.10}$$

Например, если $x^*{<}x_0{<}x_1$, то нумерация такова: $y_0^{(0)}{=}x^*$, $y_1^{(1)}{=}x_0$, $y_2^{(0)}{=}x_1$. В случае же $x_0{<}x^*{<}x_1$ имеем нумерацию: $y_0^{(0)}{=}x_0$, $y_1^{(0)}{=}x^*$, $y_2^{(0)}{=}x_1$, и т.д.

Поясним, что нижний индекс в обозначении $y_i^{(0)}$ $(i{=}0,\ 1,\ 2)$ есть номер корня (ввиду специфики задачи нумеровать точки естественно от нуля), а верхний индекс напоминает, что речь идет о корнях самой функции h, т.е. о корнях ее производной нулевого порядка.

Отметим, что левая из точек (3.10) есть левый конец подотрезка

$$[\ min\{x^*, x_0, x_1\}\ ,\ max\{x^*, x_0, x_1\}\ ] \tag{3.11}$$

отрезка $[a,b]$, а правая есть правый конец этого подотрезка. Поэтому отрезок $[y_0^{(0)},\ y_2^{(0)}]$ в точности совпадает с отрезком (3.11), а, значит, все внутренние точки отрезка $[y_0^{(0)}, y_2^{(0)}]$, которые будут далее выбираться, будут внутренними точками отрезка (3.11).

Обратимся теперь к средней из точек (3.10). Эта точка разбивает отрезок $[y_0^{(0)}, y_2^{(0)}]$ на подотрезки $[y_0^{(0)}, y_1^{(0)}]$, $[y_1^{(0)}, y_2^{(0)}]$, на концах которых функция h принимает нулевые значения. Но тогда по теореме Ролля *внутри* этих подотрезков находятся корни первой производной функции h.

Обозначая через $y_0^{(1)}$ корень производной из левого подотрезка $[y_0^{(0)}, y_1^{(0)}]$, а через $y_1^{(1)}$ – из правого подотрезка $[y_1^{(0)}, y_2^{(0)}]$ (верхний индекс означает здесь, как и ранее, порядок производной, а нижние индексы есть номера корней), получим упорядоченный по возрастанию

$$y_0^{(1)} < y_1^{(1)}$$

набор корней первой производной функции h. Применяя теперь к функции h' на отрезке $[y_0^{(1)}, y_1^{(1)}]$ теорему Ролля, приходим к выводу о существовании внутри этого отрезка точки $y_0^{(2)}$,в которой равна нулю вторая производная функции h:

$$h''(y_0^{(2)}) = 0. \tag{3.12}$$

Заметим, что, поскольку сам отрезок (3.11) зависит, вообще говоря, от выбора точки x^*; его внутренняя точка $y_0^{(2)}$ также зависит от x^*; поэтому ее естественно обозначить через $\xi(x^*)$.

Дифференцируя дважды равенство (3.9) и подставляя в полученное соотношение

$$h''(x) = f''(x) - K^*(2!) \tag{3.13}$$

вместо x точку $y_0^{(2)} = \xi(x^*)$, с учетом (3.12) будем иметь

$$h''(\xi(x^*)) = 0 = f''(\xi(x^*) - K^*(2!).$$

Выражая отсюда константу K^*, подставляя результат в формулу (3.8) и учитывая, что точка $\xi(x^*)$ расположена на отрезке (3.11), получим соотношения

$$f(x^*) - p_1(x^*) = \frac{1}{2!} f''(\xi(x^*))(x^* - x_0)(x^* - x_1),$$

$$\xi(x^*) \in [\,min\{x^*, x_0, x_1\}\,,\, max\{x^*, x_0, x_1\}\,],$$

совпадающие ввиду произвольности точки x^* с доказываемыми формулами (3.6), (3.7).

Упражнение 3.4. Значения функции $f(x) = sin(5x)$ на отрезке $[0,4]$ в равноотстоящих точках $x_0 = 0, x_1 = 0{,}04, x_2 = 0{,}08, \ldots, x_{100} = 4$ заданы, а в промежуточных точках x находятся с помощью линейной интерполяции по двум ближайшим к x точкам x_i , x_{i+1} ($x_i < x < x_{i+1}$). Можно ли утверждать, что абсолютная величина погрешности интерполяции для любой промежуточной точки x не превысит числа $0{,}01$?

Решение. Узлами интерполяции в данном случае служат точки x_i, x_{i+1} таблицы значений функции. Поэтому формула (3.6) принимает здесь вид

$$f(x) - p_1(x) = \frac{1}{2!} f''(\xi(x))(x - x_i)(x - x_{i+1}),$$

Отсюда, переходя к абсолютным величинам, приходим к равенству

$$|f(x) - p_1(x)| = \frac{1}{2!} |f''(\xi(x))|\,|(x - x_i)(x - x_{i+1})|.$$

Поскольку $f''(x) = -25\sin x$, а абсолютная величина значений синуса не превосходит единицы, имеем неравенство

$$|f(x) - p_1(x)| \le \frac{1}{2!} 25 |(x - x_i)(x - x_{i+1})|. \qquad (3.14)$$

Найдем максимальное значение правой части полученного неравенства, когда точка x пробегает отрезок $[x_i, x_{i+1}]$.

Рассмотрим функцию

$$g(x)=(x-x_i)(x-x_{i+1}), \tag{3.15}$$

и найдем ее экстремум на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$. Вычисляя производную этой функции и приравнивая ее нулю, приходим к следующему уравнению для отыскания точки экстремума

$$(x-x_{i+1})+(x-x_i)=0,$$

откуда для точки экстремума получаем выражение

$$x=(x_i+x_{i+1})/2. \tag{3.16}$$

Итак, единственной внутренней точкой экстремума на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ является середина отрезка.

Подстановка величины (3.16) в формулу (3.15) дает следующее ненулевое значение для величины этого экстремума

$$g((x_i+x_{i+1})/2)=((x_i+x_{I+1})/2-x_{i+1})((x_i+x_{i+1})/2-x_i)=(1/4)(x_i+x_{i+1}-2x_{i+1})(x_i+$$

$$+x_{i+1}-2x_i)=-(1/4)(x_{i+1}-x_i)^2.$$

По условию задачи шаг $x_{i+1}-x_i$ таблицы имеет значение $0{,}04$, поэтому величина рассматриваемого экстремума задается равенством

$$g((x_i+x_{i+1})/2)=-(1/4)(0{,}04)^2. \tag{3.17}$$

А так как на концах отрезка $[x_i, x_{i+1}]$ функция (3.15) равна, очевидно, нулю, ненулевых значений экстремумов, отличных от величины (3.17), на этом отрезке нет.

Проведенное рассуждение позволяет вместо неравенства (3.14) выписать более сильное неравенство

$$|f(x)-p_1(x)| \le \frac{1}{2!}25(1/4)(0{,}04)^2 .$$

Поскольку правая часть этого неравенства есть число $0{,}005$, ответ на поставленный в упражнении вопрос утвердительный.

Обратимся теперь к вопросу о погрешности интерполяции в случае произвольного n ($n>1$).

Сначала рассмотрим полиномиальный случай, т.е. случай, когда многочлен степени $n+1$ приближается интерполяционным многочленом p_n на единицу меньшей степени.

Теорема 3.5. Для любого многочлена f степени $n+1$ справедлива формула

$$f(x)-p_n(x)=\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(x)(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n) \tag{3.18}$$

(ср. с (3.5)).

Доказательство проводится по той же схеме, что и при $n=1$. Именно, разность $f-p_n$ является многочленом степени $n+1$, корнями которого служат узлы интерполяции $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Поэтому эта разность может быть представлена в виде

$$f(x)-p_n(x)=K(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n). \tag{3.19}$$

Правая часть этого равенства есть многочлен вида

$$K\,x^{n+1}+g_n(x),$$

где g_n – многочлен степени не выше n (ср. с (3.3)). Поскольку производная порядка $n+1$ от многочленов p_n, g_n степени не выше n равна нулю, $(n+1)$-кратное дифференцирование равенства (37) даст соотношение

$$f^{(n+1)}(x)=K\,(n+1)!$$

(ср. с (3.4)). Подставляя найденное отсюда значение K в (3.19), получим формулу (3.18).

Замечание 3.6. Выведенная формула (318) полезна тем, что с ее помощью удобно описать типичное поведение погрешности интерполяции при перемещении точки x по отрезку $[a, b]$. Именно, обозначим через $[c, d]$ наименьший подотрезок вещественной оси, содержащий все узлы интерполяции (если узлы занумерованы в порядке возрастания, то это просто отрезок $[x_0, x_n]$). Если точка x, перемещаясь по этому отрезку, проходит через узел x_i, то множитель $(x - x_i)$ в правой части формулы (3.18) меняет знак, тогда как остальные множители свои знаки сохраняют. Поэтому меняет свой знак и левая часть, т.е. погрешность интерполяции. Это объясняет тот наблюдаемый в практике вычислений факт, что погрешность интерполяции на отрезке $[c, d]$ является осциллирующей функцией (т.е. является функцией колебательного характера). При этом более детальный анализ показывает, что размах этих колебаний минимален в центральной части отрезка и существенно увеличивается к его концам. Поэтому, если при приближенном вычислении значения функции в точке x имеется возможность выбора узлов интерполяции, то выбирать их следует так, чтобы точка x оказалась как можно ближе к центру отрезка $[c, d]$.

Отметим, что вне отрезка $[c, d]$ осцилляции погрешности прекращаются, и абсолютная величина погрешности в точке x начинает сильно расти по мере удаления x от этого отрезка. Ситуация, при которой точка, где ищется приближенное значение функции, находится вне отрезка, содержащего узлы интерполяции, называется *экстраполяцией* (латинская приставка «extra» соответствует русской приставке «вне»). По указанной только что причине применения экстраполяции стараются избегать.

Теорема 3.7. Для любой функции $f \in C^{n+1}[a, b]$ и любой отличной от узлов интерполяции точки $x \in [a, b]$ справедлива формула

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n), \tag{3.20}$$

где $\xi(x)$ – точка, принадлежащая наименьшему отрезку вещественной оси, содержащему точку x и все узлы интерполяции:

$$\xi(x) \in [\, min\{x, x_0, x_1,\dots, x_n\},\ max\{x, x_0, x_1,\dots, x_n\}\,] \subseteq [a,b] \tag{3.21}$$

(ср. с формулами (3.6), (3.7)).

Замечание 3.8. Отличие формулы (3.20) от ранее выведенной формулы (3.18) состоит в том, что множитель $f^{(n+1)}(x)$ в формуле (3.18) как производная порядка $n+1$ от многочлена степени $n+1$ фактически от x не зависит, тогда как аналогичный множитель $f^{(n+1)}(\xi(x))$ в (3.20) с изменением x, вообще говоря, меняется.

Доказательство теоремы 3.7 аналогично доказательству теоремы 3.3.

Именно, фиксируем отличную от узлов интерполяции точку x^* и подбираём константу K^* так, чтобы имело место равенство

$$f(x^*) - p_n(x^*) = K^*(x^* - x_0)(x^* - x_1)\dots(x^* - x_n). \tag{3.22}$$

Далее, выписываем вспомогательную функцию переменной x

$$h(x) = f(x) - p_n(x) - K^*(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n). \tag{3.23}$$

Обращение функции h в ноль во всех узлах интерполяции следует из вида (3.23) этой функции и того факта, что в узле интерполяции значения $f(x_i)$ и $p_n(x_i)$ совпадают. Кроме того, из формулы (3.22) следует, что эта функция обращается в ноль и в точке x^*. Переобозначим эти $n+2$ корня функции h символами $y_i^{(0)}$, $i=0, 1,..., n+1$ так, чтобы получить упорядоченный по возрастанию

$$y_0^{(0)} < y_1^{(0)} < y_2^{(0)} < ... < y_{n+1}^{(0)} \tag{3.24}$$

набор корней функции h

$$h(y_i^{(0)}) = 0\ ,\ \ i = 0,1, ... , n+1; \tag{3.25}$$

корни эти, очевидно, расположены на подотрезке

$$[y_0^{(0)},y_{n+1}^{(0)}] = [\ min\{x^*, x_0, x_1, ... , x_n\}\ , max\{x^*, x_0, x_1, ... , x_n\}\ ] \tag{3.26}$$

отрезка $[a,b]$.

Корни $y_i^{(0)}, y_{i+1}^{(0)}$ с соседними номерами образуют подотрезок

$$[y_i^{(0)}, y_{i+1}^{(0)}], \tag{3.27}$$

на концах которого функция h в силу (3.25) принимает равные (нулевые) значения. Но тогда по теореме Ролля внутри этого подотрезка найдется корень $y_i^{(1)}$ первой производной функции, т.е. найдется точка, такая что

$$h'(\,y_i^{(1)}\,) = 0. \tag{3.28}$$

Число таких точек окажется равным $n+1$, на единицу меньшим, чем число корней (3.24) нулевой производной функции h. Так как это внутренние точки отрезков (3.27)

$$y_i^{(0)} < y_i^{(1)} < y_{i+1}^{(0)},$$

концы которых (см. (3.24)) упорядочены по возрастанию, они располагаются на вещественной оси согласно неравенствам

$$y_0^{(0)} < y_0^{(1)} < y_1^{(0)} < y_1^{(1)} < y_2^{(0)} < \ldots < y_n^{(0)} < y_n^{(1)} < y_{n+1}^{(0)}$$

и потому образуют на отрезке (3.26) набор попарно различных точек, занумерованных в порядке возрастания:

$$y_0^{(1)} < y_1^{(1)} < y_2^{(1)} < \ldots < y_n^{(1)}. \qquad (3.29)$$

Применяя в свою очередь к отрезкам $[y_i^{(1)}, y_{i+1}^{(1)}]$ и функции h', принимающей в силу (3.28) на концах таких отрезков равные (нулевые) значения, снова теорему Ролля, приходим к выводу о существовании на отрезке (3.26) набора корней второй производной функции h, упорядоченного по возрастанию:

$$y_0^{(2)} < y_1^{(2)} < y_2^{(2)} < \ldots < y_{n-1}^{(2)}. \qquad (3.30)$$

При этом число таких точек равно n, что на единицу меньше числа нулей (3.29) предыдущей первой производной.

Дальнейшее выделение с помощью теоремы Ролля корней производных все более и более высокого порядка через конечное число шагов прервется, поскольку число исходных корней (3.24) производной нулевого порядка конечно, а переход от производной данного порядка к производной следующего порядка уменьшает число выделенных корней на единицу.

Заметим, что из формул (3.24), (3.29), (3.30) усматривается следующая закономерность: сумма порядка производной и количества выделенных ее корней совпадает с числом $(n+2)$. Поэтому продолжение описанной процедуры выделения корней прервется на $(n+1)$-й производной, для которой удастся выделить на отрезке (3.26) лишь одну точку $y_0^{(n+1)}$, в которой эта производная обращается в ноль:

$$h^{(n+1)}(y_0^{(n+1)})=h^{(n+1)}(\xi(x^*))=0. \tag{3.31}$$

Дифференцируя теперь равенство (3.23) $(n+1)$ раз и подставляя в полученное соотношение

$$h^{(n+1)}(x)=f^{(n+1)}(x)-K^*(n+1)!$$

(ср. с формулой (3.13)) вместо x точку $\xi(x^*)$, получим с учетом (3.31) равенство

$$0=f^{(n+1)}(\xi(x^*))-K^*(n+1)!.$$

Выражая отсюда константу K^* и подставляя ее в соотношение (3.22), приходим к выводу о справедливости доказываемых формул (3.20), (3.21) для произвольной точки x^* из промежутка $[a, b]$, отличной от узлов интерполяции.

Замечание 3.9. Если на отрезке $[a, b]$ $(n+1)$-я производная интерполируемой функции близка к некоторой ненулевой константе, то поведение погрешности при перемещении точки x по этому отрезку имеет характер, указанный в замечании 3.6; соответственно сохраняют силу и приведенные там рекомендации по выбору узлов.

В заключение данной главы коснемся вопроса о сходимости интерполяционного многочлена p_n к приближаемой функции f при неограниченном увеличении степени многочлена n. Факт сходимости или расходимости интерполяционного процесса имеет не только теоретическое, но и практическое значение, поскольку позволяет решить вопрос о целесообразности или нецелесообразности использования в практике вычислений интерполяционных многочленов высоких степеней.

Рассмотрим для определенности случай *равноотстоящих* узлов интерполяции.

Для построения такого набора узлов отрезок $[a,b]$ делят на n равных частей длины

$$h=(b-a)/n \tag{3.32}$$

и принимают концы полученных подотрезков в качестве узлов интерполяции. Другими словами, в качестве узлов интерполяции берут точки, заданные равенствами

$$x_i=a+ih, \qquad i=0, 1, 2, \dots ,n, \tag{3.33}$$

где параметр h – *расстояние между соседними узлами* – определяется формулой (3.32). При этом, как видно из равенства (3.33) с $i=0$, узел x_0 совпадает с левым концом a отрезка $[a,b]$, а узел x_n, как легко проверить подстановкой (3.32) в равенство (3.33) с $i=n$, совпадает с правым концом b этого отрезка.

При увеличении n узлы (3.33) располагаются на отрезке $[a,b]$ все плотнее и плотнее. Поэтому возникает предположение, что для любой непрерывной на этом отрезке функции f значение $p_n(x)$ интерполяционного многочлена в любой фиксированной точке x этого отрезка будет равномерно по x стремиться к значению $f(x)$, или более слабое предположение о *поточечной сходимости* на $[a,b]$ интерполяционного многочлена p_n к приближаемой функции f, то есть о сходимости $p_n(x)$ к $f(x)$ для любого фиксированного x из $[a,b]$. Однако оба эти предположения *неверны*. Первое из этих предположений опровергается теоремой немецкого математика Г. Фабера, которая гласит, что при любом алгоритме построения узлов интерполяции на отрезке $[a,b]$ (в том числе, разумеется, и при алгоритме, определяемом формулами (3.32), (3.33)), найдется непрерывная на этом отрезке функция f (зависящая, вообще говоря, от алгоритма построения узлов интерполяции), для которой равномерное по x на отрезке $[a,b]$ стремление величины $p_n(x)$ к $f(x)$ при неограниченном увеличении n не будет иметь места, а второе – исследованием С. Н. Бернштейна сходимости интерполяционного процесса с равноотстоящими узлами для функции

$$f(x)=|x|, -1 \le x \le 1. \tag{3.34}$$

Может показаться, что расходимость интерполяции в случае функции (3.34) является следствием недостаточной гладкости этой функции на указанном отрезке (эта функция, будучи *непрерывной* на отрезке $[-1,1]$, не является на нем *непрерывно дифференцируемой*, поскольку ее производная терпит в точке $x=0$ разрыв). Однако, как заметил Рунге, расходимость интерполяционного процесса в некоторых точках x наблюдается и для функции

$$f(x)=1/(1+25x^2), -1 \le x \le 1, \tag{3.35}$$

которая не только непрерывно дифференцируема на $[-1,1]$, но и имеет на этом отрезке непрерывные производные любого сколь угодно высокого порядка.

Рекомендуем читателю выполнить сформулированные в конце данной главы задания, чтобы зрительно представить себе характер расходимости интерполяционного процесса для функций (3.34), (3.35) (он разный для этих функций).

Сказанное выше о возможности расходимости интерполяционного процесса не следует считать приговором интерполяции как способу приближения функций по двум причинам.

Во-первых, если сузить класс рассматриваемых функций до множества непрерывно дифференцируемых на $[a,b]$ функций, то можно будет указать (см. [1]) алгоритм выбора узлов интерполяции (к сожалению, эти узлы уже не будут равноотстоящими), который обеспечит сходимость интерполяционного процесса на таком классе.

Во-вторых (и это главное), существует такой способ использования интерполяционных многочленов, который не только гарантирует сходимость приближающей функции к приближаемой функции, если последняя непрерывна на $[a,b]$, но и позволяет сделать вывод о быстроте такой сходимости в случае наличия у функции дополнительных непрерывных производных. Этот прием называется *локальной интерполяцией* и состоит в предварительном разбиении отрезка $[a,b]$ на достаточно большое число малых подотрезков с заменой функции на таких подотрезках интерполяционными многочленами невысоких степеней.

Именно, выбираем достаточно большое натуральное N и делим $[a,b]$ на N подотрезков равной длины точками y_j ($j=0, 1, 2, \dots N$). Далее на каждом таком подотрезке $[y_j,y_{j+1}]$ строим сетку равноотстоящих узлов интерполяции по формулам (3.32), (3.33) с заменой в формуле (3.32) параметров a, b соответственно на y_j, y_{j+1}. Наконец, заменяем на этом подотрезке приближаемую функцию f ее интерполяционным многочленом $p_{n,j}$ степени n, не зависящей от номера j подотрезка, и получаем заданную на всем отрезке $[a,b]$ функцию p_n^N, которая и принимается в качестве приближения к f

Функция p_n^N называется *локальным интерполянтом* степени n для f на отрезке $[a,b]$. При этом натуральное n ($n \geq 1$) считается фиксированным (и не слишком большим), а параметром, за счет увеличения которого стараются добиться большей близости локального интерполянта p_n^N к приближаемой функции f является параметр N – число частичных отрезков разбиения при предварительном разбиении исходного отрезка $[a,b]$ на более мелкие части.

Заметим, что если не пользоваться локальной интерполяцией, а заменять функцию f на $[a,b]$ единым интерполяционным многочленом p_n достаточно высокой степени, то такой вид приближения естественно назвать *глобальной интерполяцией* , а используемый многочлен p_n – *глобальным интерполянтом* для f на $[a,b]$.

Для более подробного изучения вопросов сходимости глобальной интерполяции (при $n \to \infty$) и локальной интерполяции (при $N \to \infty$) можно обратиться, например, к пособию [1] и к монографии [2].

Задания для самостоятельного выполнения.

<u>Задание 1.</u> Исследовать с помощью компьютера поведение интерполяционного многочлена p_n для функции (3.35) при увеличении n, придавая степени n этого многочлена последовательно значения *5, 10, 20, 30, 40, 50.* Считать узлы интерполяции равноотстоящими, то есть заданными формулами (3.32), (3.33) с $a= -1$ и $b=1$. Исследование провести визуально, выводя на экран монитора одновременно график как самой функции f, так и многочлена p_n. При этом, поскольку значения функции f и многочлена p_n могут быть различными лишь в точках, отличных от узлов

интерполяции, при построении графиков в число точек, по которым строятся графики, следует кроме узлов интерполяции включить и промежуточные между узлами интерполяции точки. Проще всего это сделать, разбив подотрезок $[x_i, x_{i+1}]$ между соседними узлами интерполяции на m равных частей (например, на 20 равных частей) и добавив концы получившихся более мелких подотрезков в число точек для построения графиков.

Задание 2. Провести аналогичное исследование для функции (3.34).

Задание 3. Составить компьютерную программу вычисления значений локального интерполянта p_n^N для заданной на отрезке $[a,b]$ функции f. Для функции (3.35) исследовать визуально с помощью этой программы поведение локальных интерполянтов p_5^N и p_{10}^N при увеличении N, придавая этому параметру последовательно значения 1, 5, 10 и 20. Сравнить полученные результаты с результатами выполнения задания 1.

Литература к главе 1.

1. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Выпуск I. Многочлен Лагранжа : учеб. пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – 28 с.
2. Натансон И.П. Конструктивная теория функций: монография / И.П. Натансон. – М.: Гостехиздат, 1949. – 688 с.

Глава 2. Многочлен Ньютона

§ 1. Понятие многочлена Ньютона

Пусть

$$x_0,\ x_1,\ \dots,\ x_k,\ \dots,\ x_n. \qquad (1.1)$$

– набор попарно различных точек отрезка $[a,b]$, а

$$f(x_0), f(x_1),\ \dots, f(x_k),\ \dots, f(x_n) \qquad (1.2)$$

– набор значений приближаемой функции f в этих точках.

Рассмотрим алгебраический многочлен p_n степени не выше n, то есть функцию, значения которой на отрезке $[a,b]$ задаются формулой

$$p_n(x)=a_0+ a_1x + \dots + a_mx^m + \dots + a_nx^n. \qquad (1.3)$$

Напомним, что многочлен p_n называется *интерполяционным многочленом* для функции f, если значения этого многочлена в точках (1.1) совпадают с соответствующими значениями (1.2) функции f, то есть если выполнены условия:

$$p_n(x_k)=f(x_k),\quad k = 0, 1, \dots, n. \qquad (1.4)$$

Условия (1.4) называют *условиями интерполяционности.*

Если подставить в (1.3) вместо x узел x_k, то получится выражение

$$p_n(x_k)= a_0 + a_1x_k + a_2(x_k)^2 + \dots + a_m(x_k)^m + \dots + a_n(x_k)^n.$$

Подстановка правой части этого выражения в левую часть соотношения (1.4) приводит к следующей более подробной записи условий интерполяционности

$$a_0 + a_1x_k + a_2(x_k)^2 + \dots + a_m(x_k)^m + \dots + a_n(x_k)^n = f(x_k),\quad k=0,1, \dots ,n . \qquad (1.5)$$

Совокупность равенств (1.5) есть система линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов a_0, a_1, … , a_n интерполяционного многочлена. Решая эту систему и подставляя найденные значения указанных коэффициентов в формулу (1.3), мы и получим выражение для интерполяционного многочлена как функции переменной x.

Описанный способ нахождения интерполяционного многочлена ранее был назван *методом неопределенных коэффициентов.*

Заметим, что запись (1.3) значения интерполяционного многочлена в виде разложения по степеням x с абстрактной точки зрения означает, что этот многочлен ищется как линейная комбинация

$$p_n = a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + \ldots + a_m\varphi_m + \ldots + a_n\varphi_n \quad (1.6)$$

элементарных многочленов, заданных формулами

$$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x,\ \ldots\ ,\varphi_m(x)=x^m,\ \ldots\ ,\ \varphi_n(x)=x^n. \quad (1.7)$$

Однако в линейном пространстве многочленов степени не выше n имеются и другие базисы, отличные от базиса (1.7). В частности, применительно к задаче интерполяции Ньютон предложил записывать произвольный многочлен степени не выше n в виде линейной комбинации

$$p_n=d_0\psi_0+d_1\psi_1+d_2\psi_2+\ldots+d_m\psi_m+\ldots+d_n\psi_n \quad (1.8)$$

других базисных многочленов, а именно многочленов, заданных на $[a,b]$ формулами

$$\psi_0(x)=1,\ \psi_1(x)=x-x_0,\ \psi_2(x)=(x-x_0)(x-x_1),\ \ldots\ ,\ \psi_m(x)=(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1}),$$
$$\ldots\ ,\psi_n(x)=(x-x_0)(x-x_1)\ \ldots\ (x-x_{n-1}). \quad (1.9)$$

или, что эквивалентно, предложил записывать значение такого многочлена в произвольной точке x отрезка $[a,b]$ в виде формулы

$$p_n(x)=d_0\psi_0(x)+d_1\psi_1(x)+d_2\psi_2(x)+\ldots+d_m\psi_m(x)+\ldots+d_n\psi_n(x), \quad (1.10)$$

в которой под $\psi_m(x)$ понимаются величины, заданные равенствами (1.9).

Интерполяционный многочлен p_n степени не выше n, представленный в виде разложения (1.8) по базису из многочленов, заданных формулами (1.9), или, что то же самое, интерполяционный многочлен, значение которого в точке x выписано в виде линейной комбинации (1.10) значений функций (1.9), называют *многочленом Ньютона*.

Конечно, интерполяционный многочлен p_n, полученный методом неопределенных коэффициентов, и интерполяционный многочлен Ньютона при том же n как функции переменной x на отрезке $[a,b]$ совпадают: значения этих многочленов в любой точке отрезка равны между собой. Разница состоит лишь в выборе базиса для записи этого единого интерполяционного многочлена. Выбор в качестве базиса совокупности многочленов (1.9) объясняется прежде всего стремлением получить для нахождения коэффициентов разложения интерполяционного многочлена по базису более простую систему уравнений.

Для нахождения значений коэффициентов $d_0, d_1, \dots d_n$, при которых многочлен (1.8) превращается в интерполяционный многочлен степени не выше n, пользуются теми же самыми условиями интерполяционности (1.4), что и в методе неопределенных коэффициентов. При этом принцип вывода уравнений для нахождения $d_0, d_1, \dots d_n$ здесь такой же, как в упомянутом только что методе. Именно, придаем в формуле (1.10) переменной x значение, равное x_k, заменяем в полученном равенстве

$$p_n(x_k)=d_0\psi_0(x_k)+d_1\psi_1(x_k)+d_2\psi_2(x_k)+\ldots+d_m\psi_m(x_k)+\ldots+d_n\psi_n(x_k) \qquad (1.11)$$

значения функций ψ в точке x_k их выражениями согласно формулам (1.9) и подставляем правую часть получившегося после такой замены равенства в условие интерполяционности (1.4) вместо величины $p_n(x_k)$. Проводя такие действия при всех $k=0, 1, 2, \ldots, n$, мы и получим $n+1$ уравнений для нахождения искомых неизвестных $d_0, d_1, \dots d_n$.

Спрашивается, за счет чего при переходе от базиса (1.7) к базису (1.9) происходит упрощение процедуры нахождения коэффициентов разложения по базису?

Ответ на этот вопрос заключается в том, что при $k \leq n-1$ фигурирующие в равенстве (1.11) величины $\psi_m(x_k)$, отвечающие значениям m, большим k, в силу структуры формул (1.9) содержат нулевой множитель (x_k-x_k) и потому равны нулю. Ввиду этого при указанном k в сумме (1.11) имеются лишь слагаемые, содержащие коэффициенты d_0, d_1, … d_k, а слагаемые с коэффициентами d_m с номерами m, большими k, отсутствуют. В результате, при подстановке в условия интерполяционности (1.4) таких укороченных сумм (1.11) вместо линейной системы с матрицей общего вида получается система с верхней треугольной матрицей.

Проиллюстрируем сказанное на конкретном примере.

Упражнение 1.1. Функция f принимает в точках 0, 1, 2 соответственно значения 1, 2, 9. Используя многочлен Ньютона, найти приближенное значение функции в точке $x^*=1{,}5$.

Решение. В нашем случае $n=2$, поэтому представление (1.11) имеет здесь вид:

$$p_2(x)= d_0\psi_0(x)+d_1\psi_1(x)+d_2\psi_2(x),$$

а это соотношение в силу равенств (1.9) для базисных функций ψ может быть переписано в виде

$$p_2(x)=d_0+d_1(x-x_0)+d_2(x-x_0)(x-x_1). \qquad (1.12)$$

При подстановке в это равенство вместо x точки x_0 второе и третье слагаемые в правой части равенства (1.12) вследствие возникших нулевых множителей (x_0-x_0) обратятся в ноль, а значит, окажется верным равенство:

$$p_2(x_0)=d_0. \qquad (1.13)$$

С учетом этого соотношения первое из условий интерполяционности (1.4) примет вид

$$d_0=f(x_0). \tag{1.14}$$

Далее, подстановка $x=x_1$ в равенство (1.12) дает соотношение

$$p_2(x_1)=d_0+d_1(x_1-x_0)+d_2(x_1-x_0)(x_1-x_1)= d_0+d_1(x_1-x_0),$$

которое позволяет записать второе из условий интерполяционности (1.4) в виде уравнения

$$d_0+d_1(x_1-x_0)=f(x_1). \tag{1.15}$$

Наконец, подстановка $x=x_2$ в равенство (1.12) дает для $p_2(x_2)$ значение

$$p_2(x_2)=d_0+d_1(x_2-x_0)+d_2(x_2-x_0)(x_2-x_1);$$

подстановка этого значения в третье из условий интерполяционности (1.4) позволяет записать упомянутое условие в виде уравнения

$$d_0+d_1(x_2-x_0)+d_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)=f(x_2). \tag{1.16}$$

Система уравнений (1.14), (1.15), (1.16) есть система линейных алгебраических уравнений с нижней треугольной матрицей. Решение такой системы не представляет никакого труда. Действительно, из уравнения (1.14) сразу находится неизвестное d_0. Далее, подстановка этого значения d_0 в уравнение (1.15) превращает это уравнение в линейное уравнение с единственным неизвестным d_1, из которого это неизвестное и находится. Наконец, подстановка найденных коэффициентов d_0, d_1 в (1.16) приводит к линейному уравнению с неизвестным d_2. Решая это уравнение, находим последнее неизвестное d_2.

В условиях нашего упражнения имеем совокупность равенств

$$x_0=0,\ x_1=1,\ x_2=2,\ f(x_0)=1,\ f(x_1)=2,\ f(x_2)=9,$$

в силу которых систему (1.14), (1.15), (1.16) можно записать в виде:

$$d_0=1,\ d_0+d_1=2,\ d_0+2d_1+2d_2=9.$$

Действуя согласно описанному выше алгоритму нахождения неизвестных, будем иметь

$d_0=1,\ d_1=-d_0+2=-1+2=1,\ d_2=(1/2)(-d_0-2d_1+9)=(1/2)(-1-2+9)=3.$

Следовательно, многочлен Ньютона имеет в данном случае вид

$$p_2(x)=1+(x-0)+3(x-0)(x-1)=1+x+3x(x-1).$$

Подстановка сюда вместо x числа x^*, равного $1,5$, дает для величины $p_2(1,5)$ значение $4,75$. Это и есть искомое приближенное значение функции f.

Заметим, что одна из целей выполненного только что упражнения состояла в том, чтобы продемонстрировать на простом примере тот важный факт, что система алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов многочлена Ньютона является системой с нижней треугольной матрицей. Покажем, что этот факт имеет место и в общем случае.

Приступим к выводу системы уравнений для нахождения коэффициентов $d_0, d_1, \ldots, d_n$ многочлена Ньютона в общем случае, то есть в случае произвольного n.

Рассмотрим сначала случай $n=0$, чтобы исключить этот тривиальный случай из дальнейшего изложения.

В этом случае формула (1.10) примет вид

$$p_0(x) = d_0\psi_0(x),$$

а значит, в силу первого из равенств (1.9), вид

$$p_0(x) = d_0.$$

Заменяя в последнем равенстве переменную x узлом интерполяции x_0, приходим к соотношению

$$p_0(x_0) = d_0,$$

подстановка правой части которого в условие интерполяции (1.4) с $k=0$ (другие значения индекс k при рассматриваемом n принимать не может) приводит к следующему уравнению

$$d_0=f(x_0) \tag{1.17}$$

для нахождения коэффициента d_0.

Пусть теперь $n \geq 1$.

Замена в формуле (1.10) значений функций ψ их выражениями (1.9) дает равенство

$$p_n(x)=d_0+d_1(x-x_0)+d_2(x-x_0)(x-x_1)+\ldots+d_m(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1})+\ldots+$$
$$+d_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}), \qquad (1.18)$$

которое послужит инструментом доказательства следующего важного утверждения.

Теорема 1.2. При $n\geq 1$ коэффициенты d_0, d_1, … , d_n многочлена Ньютона p_n удовлетворяют системе уравнений

$$d_0=f(x_0), \qquad (1.19)$$
$$d_0+d_1(x_k-x_0)+d_2(x_k-x_0)(x_k-x_1)+\ldots+$$
$$+d_k(x_k-x_0)(x_k-x_1)\ldots(x_k-x_{k-1})=f(x_k),\ k=1,\ 2,\ \ldots,n-1, \qquad (1.20)$$
$$d_0+d_1(x_n-x_0)+\ldots+d_n(x_n-x_0)(x_n-x_1)\ldots(x_n-x_{n-1})=f(x_n). \qquad (1.21)$$

Доказательство. Если подставить в формулу (1.18) вместо x узел интерполяции x_0, то все слагаемые в правой части полученного числового равенства, за исключением первого, содержащего коэффициент d_0 с множителем 1, окажутся равными нулю, поскольку все они будут содержать нулевой множитель (x_0-x_0). В результате получится соотношение

$$p_n(x_0)=d_0,$$

подстановка правой части которого вместо величины $p_n(x_0)$ в условие интерполяционности (1.4) с $k=0$ и даст уравнение (1.19).

Далее, пусть k удовлетворяет неравенствам $0<k\leq n-1$. Рассмотрим в формуле (1.18) слагаемые, отвечающие неизвестным d_m с номерами $m>k$. Указанные неизвестные входят в формулу (1.18) с коэффициентами

$$(x-x_0)\ldots(x-x_{m-1}), \qquad (1.22)$$

Поскольку из неравенства $m>k$ следует неравенство $m-1\geq k$, коэффициент (1.22) содержит множитель $(x-x_k)$. При подстановке $x=x_k$ этот множитель обращается в нуль, обращая в нуль и весь коэффициент (1.22). Поэтому замена x в выражении (1.18) на x_k даст выражение

$$p_n(x_k)=d_0+d_1(x_k-x_0)+d_2(x_k-x_0)(x_k-x_1)+\ldots+d_k(x_k-x_0)(x_k-x_1)\ldots(x_k-x_{k-1}),$$

не содержащее неизвестных d_m с номерами $m>k$. Подставляя правую часть этого выражения вместо $p_n(x_k)$ в условие интерполяционности (1.4), мы и получим уравнения (1.20).

Наконец, полагая в формуле (1.18) $x=x_n$, получим выражение

$$p_n(x_n)=d_0+d_1(x_n-x_0)+d_2(x_n-x_0)(x_n-x_1)+\ldots+d_m(x_n-x_0)(x_n-x_1)\ldots(x_n-x_{m-1})+\ldots+$$
$$+d_n(x_n-x_0)(x_n-x_1)\ldots(x_n-x_{n-1}),$$

содержащее уже все неизвестные $d_0, d_1, \ldots, d_n$. Подстановка правой части этого выражения вместо $p_n(x_n)$ в последнее из условий интерполяционности (1.4), то есть в условие с $k=n$, и даст уравнение (1.21).

<u>Замечание 1.3.</u> Уравнение (1.21) можно включить в группу уравнений (1.20), увеличив в этой группе область изменения индекса k до n. Система уравнений для коэффициентов многочлена Ньютона примет тогда вид:

$$d_0=f(x_0), \tag{1.23}$$

$$d_0+d_1(x_k-x_0)+d_2(x_k-x_0)(x_k-x_1)+\ldots+$$
$$+d_k(x_k-x_0)(x_k-x_1)\ldots(x_k-x_{k-1})=f(x_k),\ k=1,2,\ldots,n. \tag{1.24}$$

Далее будут использоваться обе эти формы записи уравнений для коэффициентов многочлена Ньютона.

<u>Замечание 1.4.</u> Система (1.19), (1.20), (1.21) есть система $N+1$ линейных алгебраических уравнений с $N+1$ неизвестными $d_0, d_1, \ldots, d_n$. При этом, поскольку ввиду специфики задачи неизвестные занумерованы не от единицы, а от нуля, точно также естественно нумеровать и сами уравнения, и соответствующие столбцы и строки матрицы системы. В частности, уравнение (1.19) есть уравнение системы с номером ноль, уравнения (1.20) есть уравнения системы с номерами от 1 до $n-1$, а уравнение (1.21) есть уравнение системы с номером n.

Следствие 1.5. При $n \geq 1$ система уравнений для нахождения коэффициентов многочлена Ньютона p_n есть система линейных алгебраических уравнений с нижней треугольной матрицей.

Доказательство. Напомним, что диагональными элементами матрицы называют элементы, у которых номера строки и столбца, в которых они расположены, совпадают. Нижней же треугольной матрицей по определению считается матрица, у которой во всех строках, за исключением последней, все элементы, расположенные правее принадлежащего этой строке диагонального элемента матрицы, равны нулю.

Заметим, что уравнение (1.19) содержит неизвестное d_0 с коэффициентом 1, а остальные неизвестные в нем отсутствуют, то есть входят в это уравнение с нулевыми коэффициентами. Поэтому строка матрицы системы с номером 0, которая составлена из коэффициентов при неизвестных в этом уравнении, имеет в крайней левой позиции, то есть в столбце с номером ноль, число единицу и нули во всех остальных позициях. Следовательно, в рассматриваемой строке все элементы, расположенные правее диагонального элемента, равного единице, нулевые, как это и должно быть у нижней треугольной матрицы.

Далее, зафиксируем в (1.20) значение k и рассмотрим строку матрицы системы, отвечающую именно этому фиксированному значению k. Указанная строка имеет в матрице системы номер k, а потому диагональным элементом матрицы системы, расположенным в этой строке, является элемент столбца с номером k, то есть коэффициент

$$(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1}) \qquad (1.25)$$

при неизвестном d_k. Поскольку неизвестные d_m с номерами $m>k$ в рассматриваемом уравнении отсутствуют, то есть входят в уравнение с нулевыми коэффициентами, все элементы рассматриваемой строки, расположенные правее диагонального элемента (1.25), равны нулю. Это и завершает доказательство следствия.

Следствие 1.6. Система (1.19), (1.20), (1.21) при любой правой части имеет (и притом единственное) решение.

Доказательство. Как известно, определитель треугольной матрицы равен произведению диагональных элементов. В строке матрицы рассматриваемой системы, отвечающей уравнению (1.19), диагональный элемент равен единице. Далее, диагональные элементы (1.25) строк матрицы, соответствующих уравнениям (1.20), являются произведениями разностей попарно различных узлов интерполяции и потому отличны от нуля. По той же причине отличен от нуля и диагональный элемент

$$(x_n - x_0)(x_n - x_1) \ldots (x_n - x_{n-1}) \qquad (1.26)$$

матрицы, который отвечает уравнению (1.21). Следовательно, определитель рассматриваемой системы уравнений отличен от нуля. Для завершения доказательства остается сослаться на известный факт линейной алгебры, который состоит в том, что система с отличным от нуля определителем при любой правой части имеет (и притом единственное) решение.

Замечание 1.7. При доказательстве следствия 1.6 можно было бы не опираться на общие теоремы линейной алгебры об определителе треугольной матрицы и об однозначной разрешимости системы с отличным от нуля определителем, а просто сформулировать однозначный алгоритм нахождения решения системы при любой правой части. Это легко сделать, пользуясь треугольностью матрицы системы. В самом деле, поскольку коэффициент (1.25) при неизвестном d_k в уравнении (1.20) отличен от нуля, из этого уравнения можно вывести формулу, выражающую это неизвестное через неизвестные d_0, d_1, … , d_{k-1} с меньшими номерами. А так как уравнение (1.19) определяет (и притом однозначно) значение неизвестного d_0 с наименьшим номером, последовательное использование упомянутых формул при $k=1, 2, \ldots, n-1$ позволяет найти (и притом однозначно) неизвестные $d_1, \ldots, d_{n-1}$. Наконец, ввиду отличия от нуля коэффициента (1.26) при неизвестном d_n в уравнении (1.21) это уравнение можно переписать в виде формулы, выражающей указанное неизвестное через значения неизвестных с предшествующими номерами. Подстановка этих значений в указанную формулу и проведение необходимых арифметических вычислений позволяет найти (и притом однозначно) значение последнего неизвестного d_n.

Заметим, что описанный только что алгоритм нахождения коэффициентов многочлена Ньютона как раз и был реализован в упражнении 1.1.

Итак, показано, что система уравнений для нахождения коэффициентов многочлена Ньютона есть система с нижней треугольной матрицей. Это существенно облегчает нахождение указанных коэффициентов. Кроме того, структура этих уравнений позволяет установить важное свойство многочленов Ньютона, связанное с добавлением дополнительных узлов интерполяции.

Выберем целое r, удовлетворяющее неравенству $0 \le r \le n-1$, и обозначим через p_r многочлен Ньютона , построенный по первым узлам $x_0, x_1, \ldots, x_r$ из всего набора $\{ x_0, x_1, \ldots, x_r, \ldots, x_n \}$ узлов интерполяции (1.1), а через p_n – многочлен Ньютона, отвечающий всему набору узлов.

<u>Теорема 1.8.</u> Коэффициенты многочлена p_r в точности равны коэффициентам многочлена p_n с теми же номерами.

Доказательство. Рассмотрим сначала случай $r=0$, то есть обратимся к интерполяционному многочлену p_0 нулевой степени с единственным узлом интерполяции x_0. Ранее (см. (1.17)) было показано, что коэффициент d_0 этого многочлена находится из уравнения

$$d_0=f(x_0).$$

Но в точности из такого же уравнения находится (см. (1.19)) и коэффициент d_0 многочлена p_n.

Далее, пусть $r\geq 1$. Применим для многочлена p_r теорему 1.2, заменив в этой теореме n на r. В силу этой теоремы и замечания 1.3 к ней коэффициенты многочлена

$$p_r(x)=d_0+d_1(x-x_0)+\ldots+d_r(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{r-1}) \tag{1.27}$$

являются решением системы

$$d_0=f(x_0), \tag{1.28}$$

$$d_0+d_1(x_k-x_0)+\ldots++d_k(x_k-x_0)(x_k-x_1)\ldots(x_k-x_{k-1})=f(x_k),\ k=1,\ 2,\ \ldots,r. \tag{1.29}$$

Но эта система, как это следует из формул (1.19), (1.20), (1.21), одновременно является подсистемой системы уравнений для нахождения коэффициентов многочлена p_n, а именно является подсистемой, составленной из уравнения (1.19) и из уравнений (1.20) с $k=1,\ 2,\ \ldots,r$ (мы не приводим запись этой подсистемы, поскольку эта запись полностью совпадает с записью системы (1.28), (1.29)). Поскольку в силу следствия 1.6 система (1.28), (1.29), имеет единственное решение, то имеет единственное решение и упомянутая выше подсистема системы (1.19), (1.20), (1.21). А так как система (1.28), (1.29) и указанная выше подсистема системы (1.19), (1.20), (1.21) совпадают, совпадают и их решения. Отсюда и следует, что набор коэффициентов d_0, d_1, … , d_r многочлена p_r совпадает с набором коэффициентов d_0, d_1, … , d_r многочлена p_n.

Замечание 1.9. На практике приближенное значение функции f в заданной точке x^* иногда находят с помощью многочлена p_{n-1}, простроенного по узлам интерполяции $x_0,\ x_1,\ \ldots,\ x_{n-1}$, а последний узел интерполяции x_n резервируют для уточнения полученного приближенного значения функции, если в таком уточнении возникнет необходимость. В силу теоремы (1.8) в выражении

$$p_n(x)=d_0+d_1(x-x_0)+d_2(x-x_0)(x-x_1)+\ldots+d_{n-1}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-2})+$$
$$+d_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}) \qquad (1.30)$$

для многочлена p_n сумма всех слагаемых в правой части за исключением последнего дает значение в точке x многочлена p_{n-1}. Поэтому равенство (1.30) может быть переписано в виде

$$p_n(x)=p_{n-1}(x)+d_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}).$$

Подстановка в это равенство вместо x точки x^* дает для уточненного приближенного значения $f(x^*)$ представление

$$p_n(x^*)=p_{n-1}(x^*)+d_n(x^*-x_0)(x^*-x_1)\ldots(x^*-x_{n-1}). \qquad (1.31)$$

Другими словами, для получения нового приближения к прежнему приближению достаточно прибавить лишь одно дополнительное слагаемое

$$d_n(x^*-x_0)(x^*-x_1)\ldots(x^*-x_{n-1}).$$

Это свойство многочлена Ньютона является его важным преимуществом перед многочленом Лагранжа, введение дополнительного узла в формулу которого требует не только прибавления дополнительного слагаемого, отвечающего новому узлу, но и перевычисления всех слагаемых, относящихся к прежним узлам интерполяции.

<u>Упражнение 1.10.</u> В условиях упражнения 1.1 уточнить приближенное значение функции, добавив дополнительный узел интерполяции $x_3=3$ со значением функции в этом узле, равном 28.

Решение. Выписываем дополнительное уравнение

$$d_0+d_1(x_3-x_0)+d_2(x_3-x_0)(x_3-x_1)+d_3(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)=f(x_3)$$

для нахождения коэффициента d_3. Подстановка сюда узлов интерполяции $x_0=0$, $x_1=1$, $x_2=2$, $x_3=3$ и вычисленных в упражнении 1.1 коэффициентов $d_0=1$, $d_1=1$, $d_2=3$ приводит к равенству

$$1+1\cdot(3-0)+3(3-0)(3-1)+d_3(3-0)(3-1)(3-2)=28,$$

откуда для коэффициента d_3 получаем значение $d_3=1$. Следовательно, для получения уточненного приближения к ранее вычисленному приближению $4{,}75$ следует прибавить величину

$$d_3(x^* - x_0)(x^* - x_1)(x^* - x_2)=1\cdot(1{,}5-0)(1{,}5-1)(1{,}5-2),$$

равную $-0{,}375$. Таким образом, уточненное значение равно $4{,}375$.

Замечание 1.11. На практике кроме описанного выше способа нахождения коэффициентов Ньютона путем решения системы с нижней треугольной матрицей используют и другой алгоритм нахождения этих коэффициентов, основанный на построении так называемой *таблицы разделенных разностей*. К описанию этого алгоритма мы и переходим.

§ 2. Понятие разделенной разности

Итак, пусть

$$x_0,\ x_1,\ \dots,\ x_k,\ \dots,\ x_n \tag{2.1}$$

– узлы интерполяции, а

$$f(x_0), f(x_1),\ \dots, f(x_k),\ \dots, f(x_n) \tag{2.2}$$

– значения приближаемой функции f в этих узлах.

Сведем данные (2.1), (2.2) в таблицу значений функции f

Таблица 1.

Узлы	x_0	x_1	. . . .	x_n
Значения функции	$f(x_0)$	$f(x_1)$	. . . .	$f(x_n)$

Разделенные разности являются дискретными аналогами производных. Дискретность здесь понимается в том смысле, что эти разности применяются в том случае, когда функция задана своими значениями на дискретном множестве значений аргумента, например, задана в узлах интерполяции (2.1).

Как будет показано ниже, существует глубокая аналогия между свойствами разделенных разностей и свойствами производных. В частности, как и производные, разделенные разности бывают разных порядков, причем, как и в случае производных, разделенная разность следующего порядка определяется через разделенную разность предшествующего порядка.

Опишем процесс построения разделённых разностей от функции, заданной таблицей своих значений в узлах (2.1).

<u>Разделённой разностью 0-го порядка</u> в узле x_k ($k=0,1, \dots ,n$) называется значение $f(x_k)$ функции f в этом узле. Таким образом, имеем $n+1$ разделённых разностей 0-го порядка:

$$f(x_0)\ ,f(x_1)\ , \dots , f(x_n) \quad . \tag{2.3}$$

<u>Разделённая разность 1-го порядка</u> в узле x_k ($k=0,1, \dots ,n-1$) обозначается символом

$$f(x_k\ , x_{k+1}) \tag{2.4}$$

и выражается через разделённые разности 0-го порядка в узлах x_k , x_{k+1} по формуле

$$f(x_k\ , x_{k+1}) = (f(x_k) - f(x_{k+1}))\,/\,(x_k - x_{k+1})\ . \tag{2.5}$$

Таким образом, при построении разделённой разности (2.4) берётся разность разделённых разностей (2.3) предшествующего порядка в узлах x_k,

x_{k+1} и делится на разность аргументов разделённой разности (2.4); отсюда и происхождение термина – «разделённая разность».

Всего имеется n разделённых разностей 1-го порядка.

Разделённая разность 2-го порядка в узле x_k ($k = 0,1, \dots ,n - 2$) обозначается символом

$$f(x_k , x_{k+1}, x_{k+2}) . \quad (2.6)$$

Для построения этой разности берём разность разделённых разностей 1-го порядка в узлах x_k , x_{k+1} и делим её на разность крайних аргументов величины (2.6):

$$f(x_k , x_{k+1} , x_{k+2}) = (f(x_k , x_{k+1}) - f(x_{k+1} , x_{k+2})) / (x_k - x_{k+2}) .$$

Всего имеем $n - 1$ разделённых разностей 2-го порядка:

$$f(x_0 , x_1 , x_2) = (f(x_0 , x_1) - f(x_1 , x_2)) / (x_0 - x_2) ,$$

$$f(x_1 , x_2 , x_3) = (f(x_1 , x_2) - f(x_2 , x_3)) / (x_1 - x_3) , \dots ,$$

$$f(x_{n-2} , x_{n-1} , x_n) = (f(x_{n-2} , x_{n-1}) - f(x_{n-1} , x_n)) (x_{n-2} - x_n) .$$

В общем случае, разделённая разность m-того порядка ($m=1,2, \dots ,n$) в узле x_k ($k=0,1, \dots , n - m$), то есть величина

$$f(x_k , x_{k+1} , \dots , x_{k+m}) \quad (2.7)$$

следующим образом выражается через разделённые разности $(m-1)$-го порядка в узлах x_k , x_{k+1} :

$$f(x_k , x_{k+1} , \dots , x_{k+m})=(f(x_k , x_{k+1} , \dots , x_{k+m-1})-$$

$$-f(x_{k+1} , x_{k+2}, \dots , x_{k+m})) / (x_k - x_{k+m}) . \quad (2.8)$$

Следует отметить, что в знаменателе дроби (2.8) фигурирует разность крайних аргументов разделённой разности (2.7), а в числителе – разность разделённых разностей $(m\text{-}1)$-го порядка в соседних узлах x_k, x_{k+1}.

Всего имеем $n\text{-}m+1$ разделённых разностей m – того порядка:

$f(x_0, x_1, \dots, x_m) = (f(x_0, x_1, \dots, x_{m-1}) - f(x_1, x_2, \dots, x_m)) / (x_0 - x_m)$,

$f(x_1, x_2, \dots, x_{m+1}) = (f(x_1, x_2, \dots, x_m) - f(x_2, x_3, \dots, x_{m+1})) / (x_1 - x_{m+1})$, ... ,

$f(x_{n-m}, x_{n-m+1}, \dots, x_n) = (f(x_{n-m}, \dots, x_{n-1}) - f(x_{n-m+1}, \dots, x_n)) / (x_{n-m} - x_n)$.

Количество $n\text{-}m+1$ разделённых разностей m-того порядка для функции f, заданной *Таблицей 1*, при увеличении порядка разделённой разности m убывает от $n+1$ при $m=0$ до 1 при $m = n;$ таким образом, имеем лишь одну разделённую разность n-го порядка:

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

Чтобы получить разделённые разности более высокого порядка, в *Таблицу 1* следует добавить дополнительные узлы.

Разделённые разности для функции f, заданной *Таблицей 1*, удобно записывать в виде приведенной ниже *Таблицы 2*, первые две левые колонки которой составлены из заданных величин x_k, $f(x_k)$, а элементы последующих колонок вычисляются по элементам предыдущей колонки согласно формулам (2.8).

Таблица 2.

x_0	$f(x_0)$	$f(x_0,x_1)$	$f(x_0,x_1,x_2)$	...	$f(x_0, \dots, x_{n-1})$	$f(x_0, \dots, x_n)$
x_1	$f(x_1)$	$f(x_1,x_2)$	$f(x_1,x_2,x_3)$	...	$f(x_1, \dots, x_n)$	-
x_2	$f(x_2)$	$f(x_2,x_3)$	$f(x_2,x_3,x_4)$	...	-	-

x_3	$f(x_3)$	$f(x_3, x_4)$	$f(x_3, x_4, x_5)$	...	-	-
...	...	...	...	...	...	...
x_{n-2}	$f(x_{n-2})$	$f(x_{n-2}, x_{n-1})$	$f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n)$	...	-	-
x_{n-1}	$f(x_{n-1})$	$f(x_{n-1}, x_n)$	-	...	-	-
x_n	$f(x_n)$	-	-	...	-	-

3^0. Свойства разделённых разностей.

Теорема 3.1. Разделённая разность (2.8) m-того ($m=1,2, \ldots ,n$) порядка в узле x_k ($k=0,1, \ldots ,n-m$) есть линейная комбинация

$$f(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}) = \sum_{i=k}^{k+m} f(x_i) \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=k \\ j\neq i}}^{k+m} (x_i - x_j)} \tag{3.1}$$

значений

$$f(x_k), f(x_{k+1}), \ldots, f(x_{k+m})$$

функции f в узлах

$$x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}, \tag{3.2}$$

причём коэффициент этой линейной комбинации при $f(x_i)$ есть дробь, числитель которой равен 1, а знаменатель получен вычитанием из узла x_i остальных узлов (3.2) и перемножением этих разностей.

Замечание 3.2. Для указанных знаменателей используются и более наглядные обозначения:

$$\prod_{\substack{j=k\\ j\neq i}}^{k+m}(x_i-x_j)=(x_i-x_k)(x_i-x_{k+1})\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_{k+m}), \tag{3.3}$$

которые при $k < i < k+m$ следует понимать буквально, а при $i=k$ и $i=k+m$ – считать символическим обозначением произведений:

$$(x_k-x_{k+1})(x_k-x_{k+2})\ \ldots\ (x_k-x_{k+m}), \tag{3.4}$$

$$(x_{k+m}-x_k)(x_{k+m}-x_{k+1})\ \ldots\ (x_{k+m}-x_{k+m-1}); \tag{3.5}$$

в обозначениях (3.3) формула (3.1) примет вид:

$$f(x_k,x_{k+1},\ldots,x_{k+m})=\sum_{i=k}^{k+m}f(x_i)\frac{1}{(x_i-x_k)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_{k+m})}\ . \tag{3.6}$$

Доказательство теоремы 3.1. Для разделённых разностей *1*-го порядка справедливость теоремы непосредственно усматривается из формулы (2.5), если переписать её в виде

$$f(x_k, x_{k+1}) = f(x_k) \,/\, (x_k - x_{k+1}) + f(x_{k+1}) \,/\, (x_{k+1} - x_k).$$

Пусть представления (3.1) имеют место для разделённых разностей (2.8) m-того порядка. Покажем, что тогда они имеют место и для разделённых разностей $(m+1)$-го порядка. Этот факт мы установим для разделённой разности $(m+1)$-го порядка в узле x_0, то есть докажем равенство:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_{m+1}) = \sum_{i=0}^{m+1} f(x_i) \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{m+1} (x_i - x_j)}; \tag{3.7}$$

для остальных узлов рассуждения аналогичны.

Используя определение разделённой разности и предположение индукции, будем иметь:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_m, x_{m+1}) = \frac{f(x_0, x_1, \ldots, x_m) - f(x_1, x_2, \ldots, x_{m+1})}{x_0 - x_{m+1}} =$$

$$= \frac{1}{x_0 - x_{m+1}} \left(\sum_{i=0}^{m} f(x_i) \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{m} (x_i - x_j)} - \sum_{i=1}^{m+1} f(x_i) \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{m+1} (x_i - x_j)} \right);$$

отсюда, выделяя из первой суммы слагаемое с $i=0$, а из второй – с $i=m+1$, и записывая их с использованием обозначений (3.4),(3.5), получим:

$$f(x_0,x_1,\dots,x_{m+1})=\frac{1}{(x_0-x_{m+1})}\left(f(x_0)\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_m)}+\right.$$

$$\left.+\sum_{i=1}^{m}f(x_i)\left[\frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{m}(x_i-x_j)}-\frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m+1}(x_i-x_j)}\right]-f(x_{m+1})\frac{1}{(x_{m+1}-x_1)\dots(x_{m+1}-x_m)}\right)=$$

$$=f(x_0)\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_m)(x_0-x_{m+1})}+\sum_{i=1}^{m}f(x_i)\frac{1}{(x_0-x_{m+1})}\left[\frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{m}(x_i-x_j)}-\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m+1}(x_i-x_j)}\right]+f(x_{m+1})\frac{1}{(x_{m+1}-x_0)(x_{m+1}-x_1)\dots(x_{m+1}-x_m)}. \tag{3.8}$$

Крайние слагаемые суммы (3.8) есть в точности слагаемые суммы (3.7), отвечающие соответственно значениям индекса суммирования $i=0$ и $i=m+1$. Покажем, что и при $0 < i < m+1$ слагаемые сумм (3.7),(3.8) совпадают.

Поскольку при $0 < i < m+1$ знаменатель первой дроби в квадратных скобках заведомо содержит множитель $x_i - x_0$, а знаменатель второй – множитель $x_i - x_{m+1}$:

$$\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{m}(x_i-x_j)=(x_i-x_0)\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i-x_j)\quad,\quad \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m+1}(x_i-x_j)=\Big(\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i-x_j)\Big)(x_i-x_{m+1})\quad,$$

для коэффициента при $f(x_i)$ в (3.8) имеем значение

$$\frac{1}{x_0 - x_{m+1}}\left[\frac{1}{(x_i - x_0)\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i - x_j)} - \frac{1}{\left(\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i - x_j)\right)(x_i - x_{m+1})}\right] =$$

$$= \frac{1}{x_0 - x_{m+1}} \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i - x_j)}\left[\frac{1}{x_i - x_0} - \frac{1}{x_i - x_{m+1}}\right] =$$

$$= \frac{1}{x_0 - x_{m+1}} \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i - x_j)} \frac{x_i - x_{m+1} - x_i + x_0}{(x_i - x_0)(x_i - x_{m+1})} =$$

$$= \frac{1}{(x_i - x_0)\left(\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}(x_i - x_j)\right)(x_i - x_{m+1})} = \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{m+1}(x_i - x_j)} \quad ;$$

а это в точности совпадает со значением коэффициента при $f(x_m)$ в сумме (3.7).

Теорема доказана.

Из формулы (3.1) (или, при других обозначениях, из формулы (3.6)) вытекает очевидное

<u>Следствие 3.3</u>. Для любых функций f , g и любой константы λ справедливы равенства

$$(f+g)(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}) = f(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}) + g(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}),$$

$$(\lambda f)(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}) = \lambda f(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}).$$

Другими словами, разделённая разность суммы двух функций равна сумме разделённых разностей слагаемых, а постоянный множитель можно выносить за знак разделённой разности; в этом отношении разделённые разности аналогичны производным.

Далее, взгляд на формулы (3.1), (3.6) приводит к выводу, что узлы

$$x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}, \tag{3.9}$$

фигурирующие в качестве аргументов разделённой разности

$$f(x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}),$$

абсолютно равноправны, поскольку слагаемые сумм (3.1), (3.6), отвечающие узлу x_i, образуются для всех i одинаковым образом: значение $f(x_i)$ делится на произведение, сомножители которого получаются вычитанием из узла x_i всех остальных узлов совокупности (3.9). Поэтому, если узлы (3.9) расположить в другом порядке (т.е. занумеровать их целыми числами от k до $k+m$ по другому):

$$y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+m}, \tag{3.10}$$

и представить разделённую разность

$$f(y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+m})$$

согласно теореме 3.1 в виде

$$f(y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+m}) = \sum_{i=k}^{m+k} f(y_i) \frac{1}{\prod\limits_{\substack{j=k \\ j\neq i}}^{m+k} (y_i - y_j)},$$

то получим сумму, которая отличается от суммы (3.1) лишь порядком слагаемых и порядком сомножителей в знаменателях. А это значит, что справедливо

Следствие 3.4. Разделённая разность не меняется при произвольной перестановке своих аргументов.

Следующее утверждение устанавливает важное свойство разделённых разностей от многочлена.

Теорема 3.5. Разделённая разность n-го порядка

$$p(x_0, x_1, \dots, x_n)$$

от многочлена p степени $\leq n$ есть константа, одна и та же для любого набора узлов интерполяции

$$x_0, x_1, \dots, x_n ,$$

а разделённая разность $(n+1)$-го порядка при любых узлах интерполяции равна нулю:

$$p(x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}) = 0 . \tag{3.11}$$

Доказательство. Пусть x – произвольная точка вещественной оси, отличная от узла x_0. Считая x переменным узлом интерполяции, составим разделённую разность 1-го порядка

$$p(x, x_0) = (p(x) - p(x_0) / (x - x_0) . \tag{3.12}$$

Числитель написанной дроби, рассматриваемый как функция на всей вещественной прямой, есть многочлен степени не выше n, обращающийся в нуль при $x = x_0$. Но тогда по теореме Безу этот числитель можно представить на вещественной прямой в виде:

$$p(x) - p(x_0) = (x - x_0)\, q_{n-1}(x) ,$$

где $q_{n-1}(x)$ – многочлен степени не выше $n-1$. Следовательно, дробь (3.12) совпадает со значением этого многочлена в точке x:

$$p(x, x_0) = q_{n-1}(x) \qquad \text{для любого } x \neq x_0 . \tag{3.13}$$

Далее, считая $x \neq x_0, x_1$, составим разделённую разность 2-го порядка

$$p(x, x_0, x_1) = (p(x, x_0) - p(x_0, x_1)) / (x - x_1) = (q_{n-1}(x) - p(x_0, x_1) / (x - x_1) .$$

Числитель последней дроби, если рассматривать его как функцию, заданную на всей вещественной оси, есть многочлен степени не выше $n-1$, обращающийся в силу равенства (3.13) и следствия 3.4 в нуль в точке $x = x_1$:

$$q_{n-1}(x_1) - p(x_0, x_1) = p(x_1, x_0) - p(x_0, x_1) = 0 .$$

Применяя ещё раз теорему Безу, приходим к выводу, что для любого x

$$q_{n-1}(x) - p(x_0, x_1) = (x - x_1)\, q_{n-2}(x) ,$$

где q_{n-2} – многочлен степени не выше $n-2$. Следовательно,

$$p(x, x_0, x_1) = q_{n-2}(x) \qquad \text{для любого } x \neq x_0, x_1 .$$

Продолжая аналогичные рассуждения, в конце концов придём к выводу о том, что значение разделённой разности n-го порядка

$$p(x, x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$$

в любой точке $x \neq x_0, x_1, \dots, x_{n-1}$ совпадает со значением в этой точке многочлена q_0 нулевой степени, т.е. с константой, независящей от x :

$$p(x, x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) = c = const \qquad \text{для любого } x \neq x_0, x_1, \dots, x_{n-1} .$$

При этом для нахождения этой константы достаточно положить здесь $x = x_n$; с учётом следствия 3.4 тогда получим:

$$p(x, x_0, \dots, x_{n-1}) = p(x_0, x_1, \dots, x_n) \quad \text{для любого } x \neq x_0, x_1, \dots, x_{n-1} . \tag{3.14}$$

Докажем, что значение константы c не зависит от выбора узлов, т.е. что для любого другого набора узлов

$$y_0 , y_1 , \dots ,y_n$$

справедливо равенство:

$$p(y_0 ,y_1 , \dots ,y_n) = p(x_0 ,x_1 , \dots ,x_n) . \qquad (3.15)$$

Поскольку переход от одного набора узлов к другому можно осуществить последовательно, меняя на каждом шаге лишь один узел, достаточно доказать равенство разделённых разностей для наборов, у которых n узлов являются общими; при этом, поскольку перенумерация узлов не меняет значений разделённых разностей, без ограничения общности можно считать, что отличными являются узлы с номером n :

$$y_l = x_l , \ l = 0, 1, \dots , n - 1 \ , \ y_n \neq x_n .$$

А в этом случае соотношение (3.15) вытекает из цепочки равенств

$$p(y_0 ,y_1 , \dots ,y_n) = p(y_n ,y_0 ,y_1 , \dots ,y_{n-1}) = p(y_n ,x_0 ,x_1 , \dots ,x_{n-1}) = p(x_0 ,x_1 , \dots ,x_{n-1},x_n),$$

справедливость первых двух из которых очевидна, а справедливость третьего следует из равенства (3.14), если заменить в нем x на y_n (последняя замена правомерна, поскольку при $l=0,1, \quad ,n-1$ $y_n \neq y_l$, а значит, $y_n \neq x_l$).

Наконец, для разделённой разности порядка $n+1$ имеем:

$$p(x_0 ,x_1 , \dots ,x_n ,x_{n+1}) = (p(x_0 ,x_1 , \dots ,x_n) - p(x_1 ,x_2 , \dots ,x_{n+1})) / (x_0 - x_{n+1}) =$$

$$= (c - c) / (x_0 - x_{n+1}) = 0 ,$$

что и завершает доказательство.

Отметим, что установленные только что свойства разделённых разностей от многочлена полностью аналогичны свойствам производных.

§ 4. Разделенные разности как коэффициенты многочлена Ньютона

Пусть x – точка, отличная от узлов интерполяции:

$$x \neq x_0, x_1, \ldots, x_n.$$

Рассматривая x как дополнительный узел интерполяции, составим разделённую разность первого порядка

$$f(x, x_0) = (f(x) - f(x_0)) / (x - x_0)$$

и выразим из нее значение функции f в точке x:

$$f(x) = f(x_0) + f(x, x_0)(x - x_0). \tag{4.1}$$

Чтобы исключить отсюда $f(x, x_0)$, составим разделённую разность второго порядка

$$f(x, x_0, x_1) = (f(x, x_0) - f(x_0, x_1)) / (x - x_1),$$

выразим отсюда $f(x, x_0)$:

$$f(x, x_0) = f(x_0, x_1) + f(x, x_0, x_1)(x - x_1),$$

и подставим результат в (4.1). Получим:

$$f(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x, x_0, x_1)(x - x_0)(x - x_1).$$

Продолжая аналогичные рассуждения, в конце концов придём к формуле:

$$f(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_1)(x - x_0)(x - x_1) + \ldots +$$

$$+ f(x_0, x_1, \ldots, x_m)(x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{m-1}) + \ldots +$$

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

$$+ f(x, x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) . \quad (4.2)$$

Формула (4.2) справедлива для любой функции. Следовательно, аналогичное равенство можно написать и для интерполяционного многочлена $p_n(x) = p_n(x; f)$; при этом, поскольку в силу теоремы 3.5 разделённая разность $(n+1)$-*го* порядка

$$p_n(x, x_0, x_1, \dots, x_n)$$

от многочлена p_n степени $\leq n$ равна нулю, последнее слагаемое в формуле (4.2) окажется равным нулю, и формула примет вид:

$$p_n(x) = p_n(x_0) + p_n(x_0, x_1)(x - x_0) + \dots + p_n(x_0, x_1, \dots, x_m)(x - x_0)(x - x_1) \dots$$

$$\dots (x - x_{m-1}) + \dots + p_n(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) . \quad (4.3)$$

А так как в силу формулы (3.1) совпадение значений двух функций в узлах интерполяции гарантирует равенство их разделённых разностей, в формуле (4.3) разделённые разности от многочлена p_n можно заменить разделёнными разностями от интерполируемой функции f , и тогда эта формула примет вид:

$$p_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + \dots + f(x_0, x_1, \dots, x_m)(x - x_0)(x - x_1) \dots$$

$$\dots (x - x_{m-1}) + \dots + f(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) . \quad (4.4)$$

Итак, доказано утверждение:

Теорема 4.1. Интерполяционный многочлен $p_n(x; f)$, построенный по системе узлов $x_0, x_1, \dots, x_n$, выражается через разделённые разности функции f в узле x_0 согласно формуле (4.4).

Упражнение 4.2. Функция f принимает в точках $-1,\ 0,\ 1$ соответственно значения $0,\ -1,\ 0$. Используя для вычисления разделенных разностей формулы (3.1), составить интерполяционный многочлен p_2 и найти с его помощью приближенное значение функции в точке $x^*=0,5$.

Решение. Имеем исходные данные

$$n=2,\ x_0=-1,\ x_1=0,\ x_2=1,\ f(x_0)=0,\ f(x_1)=-1,\ f(x_2)=0.$$

Разделенная разность нулевого порядка равна значению функции f в точке x_0, то есть нулю.

Далее, придаем в формуле (3.1) параметрам m, k соответственно значения 1, 0 и получаем для разделенной разности первого порядка $f(x_0, x_1)$ значение

$$f(x_0, x_1)=f(x_0)(1/(x_0-x_1))+f(x_1)(1/(x_1-x_0))=0(1/(-1-0))+(-1)(1/(0-(-1)))=-1.$$

Наконец, полагая в формуле (3.1) $m=2$, $k=0$, получаем следующее значение для разделенной разности второго порядка

$$f(x_0, x_1, x_2)=f(x_0)(1/((x_0-x_1)(x_0-x_2)))+f(x_1)(1/((x_1-x_0)(x_1-x_2)))+$$
$$+f(x_2)(1/((x_2-x_0)(x_2-x_1)))=0(1/((-1-0)(-1-1)))+(-1)(1/((0-(-1))(0-1)))+$$
$$+0(1/((1-(-1))(1-0)))=(-1)(1/(1\cdot(-1)))=1.$$

Следовательно, приходим к формуле

$$p_2(x)=0+(-1)(x-x_0)+1\cdot(x-x_0)(x-x_1)=-(x+1)+(x+1)x.$$

Подстановка сюда вместо x числа $0,5$ дает в качестве приближения для $f(0,5)$ величину $-0,75$.

Замечание 4.3.Проведенные выше рассуждения позволяют и выписать формулу для погрешности интерполяционного многочлена. Именно, сопоставляя формулы (4.2) и (4.4), получим:

$$f(x)-p_n(x)=f(x, x_0, x_1, \dots, x_n)(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)\,; \qquad (4.5)$$

это и есть новая формула для погрешности интерполяционного многочлена.

Конечно, непосредственно воспользоваться этой формулой нельзя, так как для вычисления фигурирующей в ней разделённой разности $(n+1)$-го порядка

$$f(x, x_0, x_1, \dots, x_n) \qquad (4.6)$$

нужно знать значение функции f в точке x. Однако, если наблюдение за таблицей значений функции f, из которой берутся узлы интерполяции и значения функции, показывает, что разделённые разности $(n+1)$-го порядка меняются мало, то можно, выбрав из таблицы дополнительный узел x_{n+1}, вычислить разделённую разность

$$f(x_0, x_1, \dots, x_{n+1})$$

и подставить её в (4.5) вместо неизвестной разделённой разности (4.6). В результате получим следующую формулу

$$f(x) - p_n(x) \approx f(x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1})(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \qquad (4.7)$$

для приближённого значение погрешности.

Ранее мы уже указывали на аналогию между разделёнными разностями и производными. Теперь мы можем описать эту аналогию более точно.

Теорема 4.4. Для разделённой разности $m-го$ порядка в узле x_k от функции f класса C^m справедливо представление:

$$f(x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}) = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!}, \qquad (4.8)$$

где ξ − внутренняя точка наименьшего отрезка вещественной оси, содержащего все узлы интерполяции $x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}$.

Доказательство. При $m=1$ для вывода соотношения (4.8) применяем к числителю дроби (2.5) формулу конечных приращений Лагранжа.

Далее, пусть $m \ge 2$.Переобозначим узлы

$$x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m} \tag{4.9}$$

соответственно символами

$$y_0, y_1, \dots, y_m, \tag{4.10}$$

составим интерполяционный многочлен $p_{m-1}(y; \{y_0, y_1, \dots, y_{m-1}\}; f)$ для функции f по совокупности узлов (4.10) без последнего узла y_m и приравняем погрешности соответствующих многочленов Лагранжа и Ньютона (ведь это разные формы записи одного и того же многочлена p_{m-1}) в точке $y = y_m$:

$$(f^{(m)}(\xi) / m!)(y_m - y_0)(y_m - y_1) \dots (y_m - y_{m-1}) =$$

$$= f(y_m, y_0, y_1, \dots, y_{m-1})(y_m - y_0)(y_m - y_1) \dots (y_m - y_{m-1}).$$

Здесь ξ – внутренняя точка наименьшего отрезка вещественной оси, содержащего узлы y_0 , y_1 , ... , y_m , а значит, наименьшего отрезка, содержащего узлы (4.9).

Сокращая полученное равенство на величины $(y_m - y_l)$, возвращаясь к обозначениям (4.9) и меняя в разделённой разности порядок аргументов, приходим к формуле (4.8).

Замечание 4.5. Формула (4.8) позволяет считать, что с точностью до числового множителя $(1 / m!)$ разделённая разность порядка m есть дискретный аналог m – той производной.

В заключение данной главы отметим, что в случае, когда узлы интерполяции на отрезке $[a, b]$ равноотстоящие, то есть заданы формулами (3.32), (3.33), наряду с разделенными разностями используются и так называемые *конечные разности*. Эти разности задаются следующим образом.

Определение 4.6. *Конечными разностями* $(\Delta^m f)_k$ порядка m $(m=0, 1, \dots, n)$ в узлах x_k $(k=0, 1, \dots, n-m)$ называют величины, заданные формулами:

$$(\Delta^0 f)_k = f(x_k) \quad , \qquad k = 0, 1, \dots, n, \tag{4.11}$$

$$(\Delta^m f)_k = (\Delta^{m-1} f)_{k+1} - (\Delta^{m-1} f)_k , \; m=1, 2, \dots, n , \; k=0, 1, \dots, n-m . \tag{4.12}$$

Формула (4.11) означает, что, как и в случае разделенных разностей, конечные разности нулевого порядка есть просто значения функции в узлах, а формула (4.12) дает способ вычисления конечной разности порядка m по ранее вычисленным конечным разностям предшествующего порядка.

Конечные разности, вычисленные последовательным применением равенств (4.11), (4.12), располагают в ячейках треугольной таблицы той же структуры, что и приведенная ранее *таблица 2* для разделенных разностей.

В случае равноотстоящих узлов интерполяции разделенные и конечные разности связаны соотношениями:

$$f(x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}) = ((\Delta^m f)_k)/(m!\, h^m), \tag{4.13}$$

и в частности, соотношениями:

$$f(x_0, x_1, \dots, x_m) = ((\Delta^m f)_0)/(m!\, h^m),$$

а потому значение $p_n(x)$ интерполяционного многочлена Ньютона может быть записано в виде:

$$p_n(x) = f(x_0) + \frac{(\Delta^1 f)_0}{1!\, h}(x - x_0) + \frac{(\Delta^2 f)_0}{2!\, h^2}(x - x_0)(x - x_0 - h) +$$

$$+ \dots + \frac{(\Delta^n f)_0}{n!\, h^n}(x - x_0)(x - x_0 - h) \dots (x - x_0 - (n-1)h) \quad .$$

Эта формула называется первой интерполяционной формулой Ньютона.

На этом мы заканчиваем изложение вопросов, относящихся к многочлену Ньютона. Для более подробного изучения этой темы можно обратиться к пособиям [1], [2] из приведенного ниже списка литературы к данной главе.

Упражнения и задания для самостоятельного выполнения

Упражнение 1. Функция f принимает в узлах $0,\ 1,\ 2,\ 3$ соответственно значения $2,\ 3,\ 10,\ 29$. Составить таблицу разделенных разностей.

Упражнение 2. Для функции f из предыдущего упражнения составить многочлен Ньютона и вычислить его значение в точке $x=1{,}5$.

Упражнение 3. Доказать, что при $m \geq 1$ конечная разность $(\Delta^m f)_k$ может быть выражена через значения f_m функции f в узлах x_m согласно формуле

$$(\Delta^m f)_k = \sum_{i=k}^{k+m} (-1)^{m+k-i} C_m^{i-k} f_i,$$

где C_m^{i-k} – биномиальные коэффициенты.

Указание. Проверить справедливость этого равенства при $m=1$, а затем применить метод математической индукции, воспользовавшись при этом известным соотношением для биномиальных коэффициентов.

Упражнение 4. Используя метод математической индукции, доказать справедливость равенств (4.13).

Задание 5. Составить программу для вычисления значений многочлена Ньютона произвольной степени n в заданной точке x отрезка $[a,\ b]$, используя для нахождения значений коэффициентов многочлена Ньютона:

а) решение системы с нижней треугольной матрицей;

б) составление таблицы разделенных разностей;

в) вычисление разделенных разностей по формулам, выражающим эти разности непосредственно через значения функции в узлах.

Задание 6. Дополнить программу из предыдущего задания графическим блоком, позволяющим выводить на экран графики приближаемой функции и приближающего ее многочлена Ньютона. Применить эту дополненную программу к функции Рунге

$$f(x) = 1 / (1+25x^2) \quad , \qquad -1 \leq x \leq 1 ,$$

имея целью исследовать с помощью компьютера поведение интерполяционного многочлена Ньютона при увеличении его степени n, используя для интерполяции *а)* набор чебышевских узлов на отрезке $[-1, 1]$ и *б)* набор равноотстоящих узлов с $x_0 = -1$, $x_n = 1$ на том же отрезке.

Задание 6. Исследовать влияние ошибок округлений при вычислении значений многочлена Ньютона с равноотстоящими узлами и узлами Чебышева при больших n. О потере численной устойчивости судить по возникновению «вычислительного шума», т.е. по возникновению пилообразных участков на графике интерполяционного многочлена. Найти экспериментально наименьшие степени многочлена, при которых возникает вычислительный шум, в двух случаях: *а)* при индуктивном вычислении разделённых разностей; *б)* при вычислении разделённых разностей на основе теоремы 3.1 данной главы.

Литература к главе 2

1. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Выпуск I. Многочлен Лагранжа : учеб. пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – 28 с.

2. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Выпуск II. Многочлен Ньютона : учеб. пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – 28 с.

Глава 3. Метод наименьших квадратов

§ 1. Понятие о методе наименьших квадратов

Пусть требуется приблизить функцию f на отрезке $[a, b]$ алгебраическим многочленом

$$p_n(x)=c_0+c_1x+\ldots+c_mx^m+\ldots+c_nx^n \tag{1.1}$$

степени не выше n.

В качестве меры близости многочлена p_n к функции f в точке x естественно принять величину

$$|f(x)-p_n(x)|, \tag{1.2}$$

которую условимся называть *уклонением многочлена* p_n *от функции* f *в точке* x, а в качестве меры близости многочлена p_n к функции f на всем отрезке $[a, b]$ – максимальное значение

$$\max_{a\le x\le b}|f(x)-p_n(x)| \tag{1.3}$$

уклонения (1.2) на отрезке $[a. b]$.

Величина (1.3) называется *равномерным уклонением многочлена* p_n *от функции* f *на отрезке* $[a, b]$. Наличие здесь эпитета «равномерный» объясняется тем, что если величина (1.3) окажется меньше заданного ε, то уклонение (1.2) многочлена p_n от функции f в точке x будет меньше ε сразу для всех точек x из отрезка $[a, b]$, то есть будет меньше ε равномерно по x.

В качестве меры близости функций f и p_n можно также использовать среднее значение уклонений (1.2) на отрезке $[a. b]$, то есть величину

$$\frac{1}{b-a}\int_a^b |f(x)-p_n(x)|\,dx, \tag{1.4}$$

которую естественно назвать *средним уклонением p_n от f на отрезке $[a, b]$.*

Наконец, можно вместо уклонений (1.2) взять квадраты этих уклонений, вычислить среднее по отрезку $[a, b]$ значение этих квадратов и извлечь из полученного среднего квадратный корень. Тогда получится величина

$$\sqrt{\frac{1}{b-a}\int_a^b (f(x)-p_n(x))^2\,dx}, \tag{1.5}$$

которую называют *среднеквадратичным уклонением p_n от f на отрезке $[a,b]$.*

Заметим, что наличие в выражении (1.5) знака квадратного корня вызвано, в частности, желанием получить для среднеквадратичного уклонения ту же размерность, какую имеют значения функций. Например, если в рассматриваемой физической задаче величины $f(x)$, $p_n(x)$ измеряются в метрах, то квадрат разности этих величин имеет размерность *м*^{2}, и при отсутствии квадратного корня среднеквадратичное уклонение оказалось бы так же величиной размерности *м*^{2}. Другим основанием использования квадратного корня является соображение нормировки. Действительно, если, к примеру, разность значений приближаемой функции и значений приближающего многочлена имеет на отрезке $[a,b]$ порядок сотых, то квадрат этой разности уже имеет порядок десятитысячных. Такой же малый порядок при отсутствии корня имело бы и среднеквадратичное уклонение, хотя фактическое отличие значений приближаемой функции от значений приближающего многочлена на два порядка больше.

Зафиксируем функцию f и отрезок $[a,b]$.

Подстановка правой части формулы (1.1) вместо p_n в уклонения (1.3), (1.4), (1.5) позволяет представить эти уклонения как функции коэффициентов $c_0, c_1, \ldots, c_n$ приближающего многочлена. Естественно поставить вопрос о таком подборе указанных коэффициентов, который обеспечивал бы минимальное значение соответствующего уклонения.

В случае равномерного уклонения (1.3) многочлен p_n, обладающий указанным оптимальным свойством, называют *многочленом наилучшего равномерного приближения для заданной функции f на заданном отрезке [a,b]*. В случае среднего уклонения (1.4) такой многочлен носит название *многочлена наилучшего среднего приближения для функции f на отрезке [a,b]*, а в случае среднеквадратичного уклонения (1.5) – *многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения для f на [a,b]*.

В вычислительной практике в основном используются многочлены наилучшего среднеквадратичного приближения. Причина широкого применения таких многочленов заключается в простоте их конструирования. Принцип построения этих многочленов мы сначала поясним на двух простых примерах, а алгоритм построения таких многочленов в общем случае опишем в следующем параграфе.

Упражнение 1.1. Приблизить функцию $f(x)=x^2+1$ на отрезке $[0, 1]$ многочленом нулевой степени (то есть константой) наилучшим среднеквадратичным образом.

Решение. Подстановка $p_0(x)=c_0$ в выражение (1.5) с учетом данных задачи приводит к следующему представлению

$$\sqrt{\int_0^1 (x^2+1-c_0)^2\,dx} \tag{1.6}$$

для среднеквадратичного уклонения p_0 от рассматриваемой функции f Наша цель – найти значение константы c_0, при котором величина (1.6) принимает минимальное из своих возможных значений. При этом, поскольку функция $\sqrt{z}$ на полуоси $z \geq 0$ является монотонно возрастающей функцией своей переменной z, минимизировать нужно подкоренное выражение, то есть функцию

$$F(c_0) = \int_0^1 (x^2 + 1 - c_0)^2 dx \qquad (1.7)$$

переменной c_0.

Согласно известному результату математического анализа для нахождения точки минимума функции F нужно вычислить производную этой функции по переменной c_0 и приравнять полученную производную нулю. Полученное соотношение и будет уравнением для нахождения точки минимума функции. При этом при нахождении производной по c_0 от функции (1.7) следует воспользоваться известным из математического анализа правилом дифференцирования определенного интеграла по параметру, каковым в данном случае служит переменная c_0. В соответствии с этим правилом производная от определенного интеграла по параметру равна определенному интегралу по тому же отрезку от производной подынтегральной функции по указанному параметру.

Заметим, что в данном случае подынтегральное выражение как функция переменной c_0 есть сложная функция. Роль внешней функции у нее играет операция возведения в квадрат, а внутренней функцией является основание степени, зависящее от c_0 линейно и имеющее производную по c_0, равную (-1) (слагаемые x^2, 1, фигурирующие в основании степени, от переменной c_0 не зависят и потому при дифференцировании по c_0 дают производные, равные нулю). Используя сформулированное выше правило дифференцирования интеграла по параметру и правило дифференцирования сложной функции, получим для производной функции (1.7) по c_0 последовательность равенств

$$\frac{dF}{dc_0} = \int_0^1 2(x^2 + 1 - c_0)(-1)dx = -2(\int_0^1 (x^2 + 1)dx - c_0 \int_0^1 dx) = -2(\frac{4}{3} - c_0).$$

Приравнивая полученное значение производной нулю, получим $c_0=4/3$.

Итак, при $n=0$ многочленом наилучшего среднеквадратичного приближения для функции x^2+1 на отрезке $[0,\ 1]$ является многочлен $p_0(x)=4/3$.

<u>Упражнение 1.2</u>. Приблизить ту же функцию на том же отрезке многочленом наилучшего среднеквадратичного приближения первой степени.

Решение. Требуется найти набор коэффициентов $\{c_0,\ c_1\}$, который минимизировал бы функцию

$$F(c_0, c_1) = \int_0^1 (x^2 + 1 - c_0 - c_1 x)^2 dx. \qquad (1.8)$$

Вычисления частных производных функции (1.8) приводят к следующим выражениям

$$\frac{\partial F}{\partial c_0} = \int_0^1 2(x^2 + 1 - c_0 - c_1 x)(-1)dx = -2\int_0^1 (x^2 + 1)dx + 2c_0 \int_0^1 dx + 2c_1 \int_0^1 x dx,$$

$$\frac{\partial F}{\partial c_1} = \int_0^1 2(x^2 + 1 - c_0 - c_1 x)(-x)dx = -2\int_0^1 (x^2 + 1)x dx + 2c_0 \int_0^1 x dx + 2c_1 \int_0^1 x^2 dx.$$

Если заменить здесь определенные интегралы их численными значениями и после этого приравнять полученные выражения для частных производных нулю, то для нахождения неизвестных $c_0,\ c_1$ получится система линейных алгебраических уравнений

$$c_0 + (1/2)c_1 = (4/3), \quad (1/2)c_0 + (1/3)c_1 = (3/4). \qquad (1.9)$$

Решая эту систему, получим для искомых коэффициентов значения $c_0=5/6$, $c_1=1$. Следовательно, многочленом наилучшего среднеквадратичного приближения в данном случае служит многочлен $p_1(x)=(5/6)+x$.

Предлагаем читателю выполнить самостоятельно следующее упражнение.

Упражнение 1.3. Изобразить на одном чертеже графики функции $f(x)=x^2+1$ и полученных в предыдущих упражнениях многочленов наилучшего среднеквадратичного приближения p_0, p_1 соответственно нулевой и первой степени для визуального решения вопроса о том, какой из этих многочленов ближе к приближаемой функции.

Замечание 1.4. Описанный выше способ приближения функций с помощью многочленов наилучшего среднеквадратичного приближения в вычислительной практике носит название *метода наименьших квадратов*.

Замечание 1.5. Аналогов метода наименьших квадратов для построения многочленов наилучшего равномерного приближения и многочленов наилучшего среднего приближения не существует. Причина этого состоит в том, что функции $F(c_0, c_1, \dots, c_n)$, получаемые подстановкой правой части равенства (1.1) в выражения (1.3), (1.4), из-за наличия в этих выражениях операции взятия абсолютной величины *не являются дифференцируемыми по переменным* $c_0, c_1, \dots, c_n$, то есть не имеют частных производных по указанным переменным. Этим и объясняется сложность построения многочленов наилучшего равномерного приближения и многочленов наилучшего среднего приближения.

§ 2. Скалярные произведения функций

Пусть функции v, w заданы на одном и том же отрезке $[a, b]$. Если перемножить значения этих функций в точке x, то есть рассмотреть произведение

$$z(x)=v(x)w(x), \qquad (2.1)$$

то получится заданная на том же отрезке новая функция переменной x – известное из курса алгебры обычное произведение функций v, w. Если же взять среднее по отрезку $[a, b]$ значение величины (2.1), то есть среднее значение функции z по указанному отрезку, то получим число

$$\langle v,w\rangle=\frac{1}{b-a}\int_a^b v(x)w(x)dx, \qquad (2.2)$$

которое и называется *скалярным произведением функций* v, w.

Напомним, что в естествознании *скаляром* называют величину, значениями которой являются числа; это и объясняет появление такого термина в наименовании скалярного произведения.

Отметим, что для обозначения скалярного произведения мы ввели специальный символ – острые скобки, чтобы в дальнейшем отличать скалярное произведение от обычного произведения функций.

Замечание 2.1. Скалярное произведение (2.2) можно рассматривать как обобщение понятия скалярного произведения векторов. В самом деле, функции v, w можно трактовать как бесконечномерные векторы, у которых роль индексов координат играют точки x, а роль самих координат – значения функций в указанных точках. Как и в случае конечномерных векторов, в определении (2.2) скалярного произведения функций перемножаются координаты $v(x)$, $w(x)$, отвечающие одному и тому же значению индекса x, но ввиду того, что в отличие от конечномерного случая число индексов x бесконечно, произведения координат не суммируются, а интегрируются по отрезку $[a, b]$.

Замечание 2.2. Скалярное произведение функций обладает теми же свойствами, что и скалярное произведение векторов и, более того, теми же свойствами, что и обычное произведение чисел. Это позволяет преобразовывать скалярные произведения функций по тем же правилам, по которым раскрывают скобки в школьном курсе алгебры.

Эти свойства таковы.

1) Перестановочность сомножителей:

$$\langle v, w\rangle = \langle w, v\rangle.$$

2) Возможность вынесения числового множителя за знак скалярного произведения:

$$\langle \lambda v, w\rangle = \lambda\langle v, w\rangle, \quad \langle v, \lambda w\rangle = \lambda\langle v, w\rangle.$$

3) Распределительный закон умножения относительно сложения:

$$\langle v+w, y\rangle = \langle v, y\rangle + \langle w, y\rangle, \quad \langle v, w+y\rangle = \langle v, w\rangle + \langle v, y\rangle.$$

Справедливость выписанных соотношений очевидным образом вытекает из свойств определенных интегралов.

Приступим теперь к выводу системы уравнений для нахождения коэффициентов многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения.

Отметим, что мы не случайно ввели в рассмотрение скалярное произведение функций. В самом деле, если сопоставить формулу (1.5) с формулой (2.2), то легко убедиться в том, что подкоренное выражение F в формуле (1.5), которое минимизируется в методе наименьших квадратов, может быть представлено в виде скалярного произведения

$$F = \left\langle f - p_n, f - p_n \right\rangle. \tag{2.3}$$

Выразим величину F через коэффициенты приближающего многочлена (1.1). Для этого рассмотрим базисные функции

$$\varphi_0(x)\equiv 1,\ \varphi_1(x)=x,\ \varphi_2(x)=x^2,\ \ldots,\varphi_n(x)=x^n \tag{2.4}$$

и будем трактовать формулу (1.1) для приближающего многочлена p_n как представление этого многочлена в виде линейной комбинации

$$p_n=c_0\,\varphi_0+c_1\,\varphi_1+c_2\,\varphi_2+\ldots+c_n\,\varphi_n \tag{2.5}$$

функций (2.4) с коэффициентами $c_0, c_1, \ldots, c_n$. Опираясь на свойства 1), 2), 3) скалярного произведения функций, преобразуем равенство (2.3) к виду

$$F = \langle f, f \rangle - 2\langle f, p_n \rangle + \langle p_n, p_n \rangle, \tag{2.6}$$

и подставим сюда вместо p_n линейную комбинацию (2.5). Тогда получим следующее выражение

$$F(c_0, c_1, ..., c_n) = \langle f, f \rangle - 2\left\langle f, \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i \right\rangle + \left\langle \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i , \sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j \right\rangle \tag{2.7}$$

для величины F как функции коэффициентов c_0, $c_1, \ldots$, c_n. Далее еще раз используем свойства 1), 2), 3) и в результате приходим к окончательному представлению

$$F(c_0, c_1, ..., c_n) = \langle f, f \rangle - 2\sum_{i=0}^{n} c_i \langle f, \varphi_i \rangle + \sum_{i,j=0}^{n} c_i c_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle \tag{2.8}$$

для функции F.

Заметим, что при переходе от равенства (2.6) к равенству (2.7) мы намеренно заменили в третьем слагаемом справа один и тот же многочлен p_n суммами с разными индексами суммирования. Сделано это было для того, чтобы иметь в дальнейшем возможность записать это слагаемое в виде двойной суммы с индексами i и j.

Приступим теперь к нахождению частных производных функции (2.8).

Пусть m – какое-либо целое в интервале от нуля до n.

Поскольку первое слагаемое в правой части (2.8) не зависит от c_m, производная от него по переменной c_m равна нулю.

Что же касается второго слагаемого в правой части (2.8), то переменную c_m в нем содержит лишь член суммы со значением индекса i, равным m. Дифференцируя по c_m выражение $-2c_m\langle f, \varphi_m \rangle$, получим в качестве производной от рассматриваемого слагаемого величину

$$-2\langle f, \varphi_m \rangle. \tag{2.9}$$

Наконец, в третьем слагаемом правой части равенства (2.8) – двойной сумме с индексами суммирования i, j – переменную c_m содержит, во-первых, член двойной суммы со значениями i, j, равными m, то есть член

$$c_m c_m \langle \varphi_m, \varphi_m \rangle = c_m^2 \langle \varphi_m, \varphi_m \rangle$$

с производной по c_m, равной, очевидно, выражению

$$2c_m \langle \varphi_m, \varphi_m \rangle . \tag{2.10}$$

Во-вторых, переменную c_m содержат те слагаемые двойной суммы, у которых $i=m$, а индекс j принимает произвольные значения, отличные от m, и слагаемые, у которых, наоборот, $j=m$, а индекс i принимает всевозможные значения, отличные от m. Указанные слагаемые естественно сгруппировать в две подсуммы

$$\sum_{j=0,\, j\neq m}^{n} c_m c_j \langle \varphi_m, \varphi_j \rangle = c_m \sum_{j=0,\, j\neq m}^{n} c_j \langle \varphi_m, \varphi_j \rangle, \quad \sum_{i=0, i\neq m}^{n} c_i\, c_m \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle = c_m \sum_{i=0, i\neq m}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle,$$

производные от которых по переменной c_m имеют соответственно вид

$$\sum_{j=0,\, j\neq m}^{n} c_j \langle \varphi_m, \varphi_j \rangle, \quad \sum_{i=0, i\neq m}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle. \tag{2.11}$$

Если разбить величину (2.10) на два слагаемых, включив первое из этих слагаемых в левую из сумм (2.11), а второе – в правую сумму, то производная от рассматриваемой двойной суммы по c_m совпадет с выражением

$$\sum_{j=0}^{n} c_j \langle \varphi_m, \varphi_j \rangle + \sum_{i=0}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle. \tag{2.12}$$

Наконец, если в первой из фигурирующих в выражении (2.12) сумм изменить в скалярных произведениях порядок сомножителей, а затем заменить в этой сумме индекс суммирования j на индекс суммирования i, то в качестве окончательного представления для производной по c_m от фигурирующей в формуле (2.8) двойной суммы получим выражение

$$2\sum_{i=0}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle.$$

Добавляя к этому выражению производную (2.9) от второго слагаемого в формуле (2.8) и учитывая, что производная от первого слагаемого равна нулю, приходим к равенству

$$\partial F / \partial c_m = -2\langle f, \varphi_m \rangle + 2\sum_{i=0}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle. \qquad (2.13)$$

Теорема 2.3. Коэффициенты $c_0, c_1, \dots, c_n$ многочлена p_n наилучшего среднеквадратичного приближения для функции f на отрезке $[a, b]$ удовлетворяют системе линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=0}^{n} c_i \langle \varphi_i, \varphi_m \rangle = \langle f, \varphi_m \rangle, \quad m = 0, 1, \dots, n. \qquad (2.14)$$

Доказательство. По определению многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения набор его коэффициентов $c_0, c_1, \dots, c_n$ есть точка минимума функции $F(c_0, c_1, \dots, c_n)$. Как известно из курса математического анализа, необходимым условием минимума функции нескольких переменных в данной точке является обращение в этой точке в нуль всех частных производных первого порядка, которые в нашем случае задаются формулами (2.13). Приравнивая правые части этих формул нулю, сокращая полученные равенства на 2 и перенося затем скалярные произведения функции f на базисные функции φ_m в правые части равенств, приходим к системе (2.14).

Замечание 2.4. При выводе системы (2.14) мы воспользовались *необходимым* условием минимума. Более детальный анализ, проводить который в данном пособии мы не имеем возможности, показывает, что условия (2.14) являются и достаточными для того, чтобы многочлен p_n, коэффициенты $c_0, c_1, \dots, c_n$ которого удовлетворяют этим условиям, был многочленом наилучшего среднеквадратичного приближения.

Упражнение 2.5. Найти на отрезке $[0,\ 1]$ многочлен первой степени наилучшего среднеквадратичного приближения для функции $f(x)=x^2+1$, используя систему (2.14).

Решение. В данном случае $n=1$, поэтому система (2.14) имеет вид

$$c_0\langle\varphi_0,\varphi_0\rangle+c_1\langle\varphi_1,\varphi_0\rangle=\langle f,\varphi_0\rangle,\quad c_0\langle\varphi_0,\varphi_1\rangle+c_1\langle\varphi_1,\varphi_1\rangle=\langle f,\varphi_1\rangle. \tag{2.15}$$

Вычисляем входящие сюда скалярные произведения, пользуясь общей формулой (2.2) для скалярного произведения функций и видом функций φ_0, φ_1, указанным в формулах (2.4). Для скалярных произведений в левых частях уравнений имеем значения

$$\langle\varphi_0,\varphi_0\rangle=\int_0^1 1\cdot 1\,dx=1,\quad \langle\varphi_1,\varphi_0\rangle=\langle\varphi_0,\varphi_1\rangle=\int_0^1 1\cdot x\,dx=\frac{1}{2},\quad \langle\varphi_1,\varphi_1\rangle=\int_0^1 x^2dx=\frac{1}{3}.$$

Скалярные же произведения в правых частях суть числа

$$\langle f,\varphi_0\rangle=\int_0^1(x^2+1)\cdot 1\cdot dx=\frac{4}{3},\quad \langle f,\varphi_1\rangle=\int_0^1(x^2+1)x=\frac{3}{4}.$$

Подстановка этих значений в (2.15) приводит к той же системе уравнений (1.9), которая ранее была получена без использования скалярных произведений при выполнении упражнения 1.2. Соответственно и ответ в данном упражнении тот же, что и в упражнении 1.2.

Замечание 2.6. Скалярные произведения в левых частях уравнений (2.14) выражаются через определенные интегралы от функций вида $x^i\cdot x^m$, которые без труда вычисляются по формулам Ньютона-Лейбница. Что же касается скалярных произведений в правых частях, то воспользоваться для их вычисления правилом Ньютона-Лейбница не всегда представляется возможным. Такая ситуация имеет место в случае, когда первообразные для функций $f(x)\cdot x^m$ не известны или когда функция f задана не аналитически, а таблицей своих значений. В этих случаях скалярные произведения приходится находить с помощью приближенных формул, знакомству с которыми посвящен следующий параграф.

§ 3. Квадратурные формулы

Под *квадратурными формулами* в курсе численных методов понимают формулы для приближенного вычисления определенных интегралов. Наиболее употребительны *интерполяционные квадратурные формулы*, основанные на замене подынтегральных функций интерполяционными многочленами и последующем вычислении определенных интегралов от этих многочленов по правилу Ньютона-Лейбница.

Такую замену можно провести *глобально*, выбирая на отрезке $[a, b]$ достаточно большое число узлов интерполяции и заменяя подынтегральную функцию интерполяционным многочленом соответствующей степени, единым для всего отрезка. В этом случае говорят о *глобально-интерполяционной квадратурной формуле*.

Если же отрезок $[a, b]$ предварительно разбивают на подотрезки, на каждом из них заменяют подынтегральную функцию своим интерполяционным многочленом, интегрируют эти многочлены по своим подотрезкам и полученные результаты суммируют, то получают *локально-интерполяционную квадратурную формулу*.

Укажем две простейшие глобально-интерполяционные формулы.

Выберем в качестве узлов интерполяции на отрезке интегрирования $[a, b]$ концы отрезка и заменим на этом отрезке подынтегральную функцию g ее интерполяционным многочленом q_1 первой степени. Записывая этот многочлен в форме Лагранжа

$$q_1(x) = g(a)\frac{x-b}{a-b} + g(b)\frac{x-a}{b-a} \tag{3.1}$$

и подставляя его вместо g под знак интеграла, получим

$$\int_a^b g(x)\,dx \approx \int_a^b q_1(x)\,dx = \int_a^b \left(g(a)\frac{x-b}{a-b} + g(b)\frac{x-a}{b-a} \right) dx = \frac{1}{b-a}\left(-g(a)\int_a^b (x-b)\,dx + \right.$$

$$\left. + g(b)\int_a^b (x-a)\,dx = \frac{1}{b-a}\left(-g(a)\left(\frac{x^2}{2} - bx\right)\Big|_{x=a}^{x=b} + g(b)\left(\frac{x^2}{2} - a\,x\right)\Big|_{x=a}^{x=b} \right) = \right.$$

$$= \frac{1}{b-a}\left(-g(a)\left(\frac{1}{2}b^2 - b^2 - \frac{1}{2}a^2 + ab\right) + g(b)\left(\frac{1}{2}b^2 - ab - \frac{1}{2}a^2 + a^2\right)\right) =$$

$$= \frac{1}{b-a}\left(\frac{1}{2}g(a)(b-a)^2 + \frac{1}{2}g(b)(b-a)^2 = (b-a)\frac{g(a)+g(b)}{2}\right.$$

Итак, выведена формула

$$\int_a^b g(x)\,dx \approx (b-a)\frac{g(a)+g(b)}{2}, \tag{3.2}$$

называемая *квадратурной формулой трапеции.*

Поясним происхождение этого названия.

Считая $g > 0$, отложим на плоскости oxy точки $(a,\ g(a))$, $(b,\ g(b))$ и опустим из этих точек перпендикуляры на ось ox, основания которых окажутся соответственно в точках a и b оси ox. Соединим точки $(a,\ g(a))$, $(b,\ g(b))$ отрезком прямой линии, представляющим собой график интерполяционного многочлена (3.1), а так же проведем через них какую-либо непрерывную кривую – воображаемый график функции g. В результате получим две трапеции с одними и теми же основаниями – упомянутыми выше перпендикулярами с длинами $g(a)$, $g(b)$ соответственно, с одной и той нижней стороной – отрезком $[a,\ b]$ оси ox длины $b - a$, но различными верхними сторонами – прямолинейным графиком интерполяционного многочлена и криволинейным графиком самой функции g. В силу геометрического смысла определенного интеграла его численное значение равно площади криволинейной трапеции, ограниченной сверху графиком подынтегральной функции g. Заменяя площадь этой криволинейной трапеции площадью прямолинейной трапеции, ограниченной сверху графиком интерполяционного многочлена, и учитывая тот факт, что площадь прямолинейной трапеции равна произведению полусуммы $(g(a)+g(b))/2$ оснований на высоту $(b - a)$, приходим к соотношению (3.2).

Заметим, что мы предварили эти геометрические рассуждения аналитическим выводом формулы (3.2), имея в виду на этом простом примере показать, как следует действовать при выводе интерполяционных квадратурных формул в случае использования интерполяционных многочленов более высоких степеней, когда геометрические соображения уже не помогают.

Далее, для замены подынтегральной функции g в определенном интеграле можно использовать интерполяционный многочлен второй степени q_2, приняв в качестве узлов интерполяции концы отрезка a, b и его середину $(a+b)/2$. Если записать этот многочлен в форме Лагранжа

$$q_2(x) = g(a)\frac{(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}{(a-\frac{a+b}{2})(a-b)} + g(\frac{a+b}{2})\frac{(x-a)(x-b)}{(\frac{a+b}{2}-a)(\frac{a+b}{2}-b)} +$$

$$+ g(b)\frac{(x-a)(x-\frac{a+b}{2})}{(b-a)(b-\frac{a+b}{2})} \qquad (3.3)$$

и вычислить от него с помощью многократного использования правила Ньютона-Лейбница определенный интеграл по отрезку $[a, b]$, как это делалось при выводе формулы трапеции, то получим формулу

$$\int_a^b g(x)dx \approx \frac{b-a}{6}(g(a)+4g(\frac{a+b}{2})+g(b)). \qquad (3.4)$$

Эту квадратурную формулу вывел английский математик Симпсон, и потому ее называют *формулой Симпсона*.

Кроме того, используется и наименование *формула параболы*. Это объясняется тем, что с геометрической точки зрения формула (3.4) соответствует замене площади криволинейной трапеции, ограниченной сверху графиком подынтегральной функции g, площадью криволинейной трапеции, ограниченной сверху графиком интерполяционного многочлена (3.3) второй степени, то есть *параболой.*

Глобально-интерполяционная квадратурная формула *трапеции* порождает локально-интерполяционную квадратурную формулу *трапеций.*

Именно, зададимся натуральным числом N и разделим отрезок $[a,\ b]$ на N равных частей длины $h=(b–a)/N$ точками

$$i=a+ih,\ i=0,\ 1,\ 2,\ \dots,\ N. \tag{3.5}$$

Применяя к частичному отрезку разбиения $[x_{i-1},\ x_i]$ с номером i аналог формулы (3.2) и учитывая, что длина этого отрезка равна $(b–a)/N$, получим приближенное равенство

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} g(x)dx \approx \frac{b-a}{N}\left(\frac{1}{2}g(x_{i-1})+\frac{1}{2}g(x_i)\right).$$

Суммируя эти равенства по , $i=1,\ 2,\ \dots,\ N$, мы и получим упомянутую выше локально-интерполяционную квадратурную формулу трапеций

$$\int_a^b g(x)dx \approx \frac{b-a}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{2}g(x_{i-1})+\frac{1}{2}g(x_i)\right). \tag{3.6}$$

В выписанной сумме можно привести подобные при значениях $g(x_i)$ функции g во внутренних узлах x_i,то есть в узлах с номерами $i=1,\ 2,\ \dots,\ N\text{-}1$. Величина $g(x_i)$ с таким номером i встречается в этой сумме дважды. Первый раз она входит в сумму как значение функции g в правом конце x_i частичного отрезка разбиения $[x_{i-1},\ x_i]$ с номером i, а второй раз – как значение той же функции в левом конце x_i следующего отрезка разбиения $[x_i,\ x_{i+1}]$ с номером $i+1$. Поскольку оба раза эта величина входит в сумму с коэффициентом $(1/2)$, после приведения подобных коэффициент при ней окажется равным единице, и формула (3.6) обретет вид

$$\int_a^b g(x)\,dx \approx \frac{b-a}{N}\left(\frac{1}{2}g(x_0)+(g(x_1)+g(x_2)+\ldots+g(x_{N-1}))+\frac{1}{2}g(x_N)\right). \quad (3.7)$$

Заметим, что значения $g(x_0)$, $g(x_N)$ функции g в крайних узлах x_0, x_N входят в сумму (3.6) лишь по одному разу, а потому коэффициент $(1/2)$ при них сохраняется.

Аналогично, если добавить к концам (3.5) частичных отрезков разбиения их середины, то есть точки с дробными индексами

$$x_{i-\frac{1}{2}} = \frac{x_{i-1}+x_i}{2} = x_i - \frac{h}{2}, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \qquad (3.8)$$

применить к каждому частичному отрезку разбиения аналог формулы (3.4) с учетом равенства $h=(b-a)/N$ для длины частичного отрезка разбиения и просуммировать приближенные равенства

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} g(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6N}\left(g(x_{i-1})+4g(x_{i-\frac{1}{2}})+g(x_i)\right),$$

то получим квадратурную формулу

$$\int_a^b g(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6N}\Big(g(x_0)+2(g(x_1)+g(x_2)+\ldots+g(x_{N-1}))+$$

$$+4(g(x_{1/2})+g(x_{3/2})+\ldots+g(x_{N-(1/2)}))+g(x_N)\Big). \qquad (3.9)$$

Эта формула называется *локально-интерполяционной квадратурной формулой Симпсона* или *локально-интерполяционной квадратурной формулой парабол*.

Фигурирующие в данной формуле точки x_0, x_N представляют собой концы a, b отрезка интегрирования, а точки с дробными индексами $x_{1/2}$, $x_{3/2}$, …, $x_{N-(1/2)}$ суть середины частичных отрезков разбиения отрезка интегрирования $[a, b]$.

Следует упомянуть, что значения аргумента x, которые входят в квадратурную формулу, называют *квадратурными узлами*, а коэффициенты при значениях подынтегральной функции в этих узлах – *квадратурными коэффициентами*. В частности, квадратурными узлами в формуле Симпсона (3.4) являются точки a, $(a+b)/2$, b, а квадратурные коэффициенты равны соответственно числам $(1/6)(b-a)$, $(2/3)(b-a)$, $(1/6)(b-a)$. В случае же локально-интерполяционной формулы Симпсона квадратурными узлами являются точки (3.5) с целыми номерами и точки (3.8) с дробными номерами. Квадратурные же коэффициенты, отвечающие крайним узлам $x_0=a$, $x_N=b$ с целочисленными номерами, равны числу $(b-a)/6N$, коэффициенты, отвечающие остальным узлам с целочисленными номерами, равны $(b-a)/3N$, а квадратурные коэффициенты, отвечающие узлам с дробными номерами равны $(2/3)(b-a)/N$.

Формула трапеции (3.2) и формула Симпсона (3.4) принадлежат классу так называемых глобально-интерполяционных квадратурных формул *Ньютона-Котеса*.

При выводе такой формулы задаются натуральным числом n – степенью интерполяционного многочлена и делят отрезок интегрирования $[a, b]$ на n равных частей точками

$$x_i^{(n)} = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n, \quad h = (b-a)/n, \tag{3.10}$$

которые и принимаются в качестве узлов интерполяции.

Отметим, что верхний индекс n в обозначении узла интерполяции представляет степень интерполяционного многочлена, а нижний индекс есть номер этого узла в наборе узлов интерполяции (3.10). При этом крайние узлы x_0, x_n набора (3.10) являются концами отрезка интегрирования $[a, b]$, а расстояния между любыми соседними узлами равны одной и той же величине h – длине частичного отрезка разбиения.

Далее записываем для произвольной функции g многочлен Лагранжа степени n с узлами (3.10), заменяем им подынтегральную функцию g в выражении для определенного интеграла и вычисляем с помощью правила

Ньютона-Лейбница интеграл от интерполяционного многочлена. В результате получаем выражение для приближенного значения интеграла в виде суммы

$$\sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} g(x_i^{(n)}), \tag{3.11}$$

которую называют *глобально-интерполяционной квадратурной суммой Ньютона-Котеса* порядка n.

Глобально-интерполяционные формулы Ньютона-Котеса с большими значениями n в вычислительной практике используются редко. Причина этого заключается в том, что даже если для данной конкретной подынтегральной функции g последовательность ее интерполяционных многочленов q_n с узлами (3.10) сходится при $n \to \infty$ к этой функции (что, заметим, имеет место не всегда), сам процесс вычисления квадратурной суммы (3.11) для такой функции при больших n может оказаться вычислительно неустойчивой процедурой. Дело в том, что при возрастании n среди квадратурных коэффициентов $A_i^{(n)}$ начинают появляться коэффициенты, очень большие по абсолютной величине. А так как значения $g(x_i^{(n)})$ обычно содержат погрешности (погрешности измерения, если значения функции g определяются экспериментально, или погрешности округлений, возникающие при введении точных значений функции g в память компьютера), эти погрешности, умножаясь на большие по модулю коэффициенты, могут существенно исказить значение квадратурной суммы (3.11) и даже сделать его бессмысленным.

Сказанное только что не означает окончательного приговора глобально-интерполяционным квадратурным формулам, поскольку относится лишь к формулам с равноотстоящими узлами (3.10). Если от последнего требования отказаться, то можно получить глобально-интерполяционные формулы, которые, во-первых, обеспечивают теоретическую сходимость при $n \to \infty$ приближенных значений интеграла к его точному значению и, во-вторых, дают квадратурные суммы, устойчивые к погрешностям задания функции g в квадратурных узлах. Такие формулы называются *глобально-интерполяционными квадратурными формулами Гаусса*. Эти формулы описаны, например, в пособии [1].

Что же касается квадратурных формул с равноотстоящими узлами, то наиболее употребительными из них являются описанные выше локально-интерполяционные квадратурные формулы трапеций (3.7) и Симпсона (3.9). При этом роль параметра, за счет которого повышается точность приближенного значения интеграла, играет уже не степень используемых интерполяционных многочленов (она фиксирована и равна единице для формулы трапеций и двум для формулы Симпсона), а число N частичных отрезков разбиения отрезка интегрирования $[a, b]$. При этом для любой непрерывной на $[a, b]$ функции g имеют место сходимость при $N \to \infty$ приближенных значений интеграла к его точному значению и устойчивость соответствующих квадратурных сумм к погрешностям задания значений подынтегральной функции в квадратурных узлах.

В заключение параграфа коснемся вопроса о *квадратурных формулах с остаточными членами*.

Обозначим через $I(g)$ точное значение определенного интеграла от функции g по отрезку $[a, b]$, а через $I_{1,N}(g)$ – его приближенное значение, найденное по формуле трапеций (3.7), то есть значение квадратурной суммы из правой части этой формулы. В последнем обозначении первый из нижних индексов, равный 1, напоминает о степени интерполяционных многочленов, использованных при выводе формулы (3.7), а второй индекс N – о числе частичных отрезков разбиения.

Можно доказать, что для любой функции g , принадлежащей пространству $C^2[a,b]$, справедливо равенство

$$I(g)=I_{1,N}(g)+ch^2+o(h^2). \qquad (3.12)$$

Здесь h – длина частичных отрезков разбиения ($h \to 0$ при $N \to \infty$), c – константа, зависящая от подынтегральной функции g, но независящая от h, а $o(h^2)$ – бесконечно малая величина более высокого порядка малости относительно h^2, то есть величина, которая при $h \to 0$ стремится к нулю быстрее, чем стремится к нулю h^2.

Вывод соотношения (3.12) имеется, например, в пособии [1]; там же приведена и формула для константы c. Мы не приводим эту формулу, поскольку конкретный вид этой константы в дальнейшем изложении не используется.

В более подробной записи равенство (3.12) имеет вид

$$\int_a^b g(x)dx=\frac{b-a}{N}\left(\frac{1}{2}g(x_0)+\sum_{i=1}^{N-1}g(x_i)+\frac{1}{2}g(x_N)\right)+ch^2+o(h^2). \qquad (3.13)$$

Представленное в такой форме оно называется *локально-интерполяционной квадратурной формулой трапеций с остаточным членом.* При этом сумму

$$ch^2+o(h^2) \qquad (3.14)$$

называют *остаточным членом* этой формулы.

Если переписать равенство (3.12) в виде

$$I(g)-I_{1,N}(g)=ch^2+o(h^2), \qquad (3.15)$$

то получим формулу для погрешности приближенного значения интеграла.

Отметим, что сама формула (3.15) для нахождения погрешности найденного приближенного значения интеграла в вычислительной практике не применяется. Однако на основе этой формулы удается получить удобное для практических расчетов правило *приближенной оценки погрешности*, которое называется *правилом Рунге*.

Именно, пусть $I_{1,N}(g)$, $I_{1,2N}(g)$ – приближенные значения интеграла, вычисленные по формуле (3.7) с числом частичных отрезков разбиения, равным соответственно N и $2N$, или, другими словами, с шагом h и $h/2$. Записывая формулу (3.15) для этих двух случаев, получим систему равенств

$$I(g)-I_{1,N}(g)=ch^2+o(h^2),$$

$$I(g)-I_{1,2N}(g)=ch^2/4+o(h^2).$$

Заметим, что последнее слагаемое в правой части второго из этих равенств мы записали в виде $o(h^2)$, а не в виде $o((h/2)^2)=o(h^2/4)$, как это формально следовало бы сделать, поскольку деление h^2 на константу 4 не меняет порядка этой бесконечно малой. Вычитание второго из выписанных равенств из первого и последующее отбрасывание бесконечно малых $o(h^2)$ приводит после взаимного уничтожения величин $I(g)$ к следующему приближенному равенству

$$(3/4)ch^2\approx I_{1,\,2N}(g)-I_{1,\,N}(g),$$

или, в эквивалентной записи, к равенству

$$ch^2/4\approx(I_{1,\,2N}(g)-I_{1,\,N}(g))/3. \tag{3.16}$$

Это и есть формула для приближенной оценки главной части погрешности приближенного значения интеграла $I_{1,\,2N}(g)$, а значит, и для приближенной оценки всей погрешности указанного приближенного значения интеграла.

Отметим, что из соотношения (3.16) следует приближенная оценка

$$ch^2\approx(4/3)(I_{1,\,2N}(g)-I_{1,\,N}(g))$$

главного члена погрешности приближенного значения интеграла $I_{1,\,N}(g)$, вычисленного по локально-интерполяционной формуле трапеций с числом частичных отрезков разбиения, равным N. Однако использовать эту оценку не имеет смысла, поскольку она относится к приближенному значению интеграла, менее, вообще говоря, точному, чем приближенное значение $I_{1,2N}(g)$ того же интеграла, вычисленное с вдвое большим числом частичных отрезков разбиения.

Замечание 3.1. Если предположить, что подинтегральная функция g имеет непрерывные производные до четвертого порядка включительно, то для локально-интерполяционной формулы Симпсона можно вывести соотношение

$$I(g) - I_{2,N}(g) = ch^4 + o(h^4),$$

аналогичное равенству (3.15) для локально-интерполяционной квадратурной формулы трапеций. Остаточный член

$$ch^4 + o(h^4)$$

этой формулы, представляющий погрешность вычисленного по формуле Симпсона приближенного значения интеграла (константа c здесь, естественно, другая, чем в выражениях (3.13), (3.14)), есть бесконечно малая более высокого порядка малости по h, чем остаточный член формулы трапеций. Поэтому при $h \to 0$ (то есть при $N \to \infty$) приближенное значение интеграла, вычисленное по формуле Симпсона, будет стремиться к точному значению интеграла гораздо быстрее, чем приближенное значение, вычисленное по формуле трапеций.

Упражнение 3.2. Используя описанную выше методику Рунге, вывести соотношение для приближенной оценки погрешности формулы Симпсона.

§ 4. Метод последовательного исключения неизвестных

Построение многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения требует решения системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов этого многочлена. Наиболее употребительным методом решения таких систем является *метод последовательного исключения неизвестных*. Суть этого метода мы поясним на примере системы трех уравнений с тремя неизвестными. При этом будет использоваться традиционная символика линейной алгебры, согласно которой уравнения записываются в виде

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3=a_{14}, \tag{4.1}$$

$$a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3=a_{24}, \tag{4.2}$$

$$a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3=a_{34}, \tag{4.3}$$

где через x_1, x_2, x_3 обозначены неизвестные, а через $a_{m\,j}$ ($m=1, 2, 3; j=1, 2, 3, 4$) – элементы расширенной матрицы системы, то есть коэффициенты при неизвестных и правые части системы.

Метод последовательного исключения неизвестных реализуется в два этапа, первый из которых называется *прямым ходом метода*, а второй – *обратным ходом*.

Прямой ход метода состоит в преобразовании исходной системы (4.1) – (4.3) в систему с верхней треугольной матрицей, имеющую те же решения, что и исходная система, а обратный ход – в нахождении решения полученной системы с верхней треугольной матрицей.

Прямой ход метода реализуется в виде последовательности *шагов*.

На первом шаге прямого хода выбирается уравнение системы с ненулевым коэффициентом при неизвестном x_1, которое само на этом шаге не меняется, а используется для исключения неизвестного x_1 из остальных уравнений системы. Такое уравнение называется *опорным уравнением первого шага прямого хода.*

Без ограничения общности можно считать опорным уравнением первого шага первое уравнение (4.1) исходной системы, так как отличия от нуля коэффициента при x_1 в первом уравнении системы всегда можно добиться за счет перестановки уравнений системы.

Выпишем опорное уравнение первого шага

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3=a_{14}, \tag{4.1}$$

то есть первое уравнение исходной системы, припишем к нему второе уравнение этой системы

$$a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3=a_{24}, \tag{4.2}$$

а затем произведем *перекрестное умножение* этих уравнений на коэффициенты при неизвестном x_1. Именно, умножаем опорное уравнение (4.1) на коэффициент a_{21} при неизвестном x_1 в уравнении (4.2), а уравнение (4.2) – на коэффициент a_{11} при x_1 в опорном уравнении (4.1) (последний коэффициент называется *опорным коэффициентом* первого шага).

Цель перекрестного перемножения – получить вместо пары уравнений (4.1), (4.2) пару уравнений

$$a_{21}a_{11}x_1+ a_{21}a_{12}x_2+ a_{21}a_{13}x_3= a_{21}a_{14}, \tag{4.4}$$

$$a_{11}a_{21}x_1+ a_{11}a_{22}x_2+ a_{11}a_{23}x_3= a_{11}a_{24} \tag{4.5}$$

с одним и тем же коэффициентом при неизвестном x_1. После достижения этой цели вычитаем из уравнения (4.5) уравнение (4.4) и получаем уравнение

$$a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 = a_{24}^{(1)}, \tag{4.6}$$

не содержащее неизвестное x_1. При этом фигурирующие здесь коэффициенты при остальных неизвестных и правая часть выражаются через параметры исходной системы согласно формулам

$$a_{22}^{(1)} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}, \quad a_{23}^{(1)} = a_{11}a_{23} - a_{21}a_{13}, \quad a_{24}^{(1)} = a_{11}a_{24} - a_{21}a_{14}. \tag{4.7}$$

Сделаем пояснение по поводу фигурирующих здесь и далее обозначений $a_{im}^{(j)}$. Нижние индексы в этом обозначении указывают на расположении элемента в расширенной матрице (i – номер строки, m – номер столбца), а верхний индекс j есть номер шага прямого хода, в ходе реализации которого получен данный элемент.

Заметим, что вместо перекрестного перемножения уравнений можно использовать и так называемые *исключения Гаусса*.

Именно, вычислим отношение

$$\mu_{21}^{(1)} = \frac{a_{21}}{a_{11}} \tag{4.8}$$

коэффициента a_{21} при неизвестном x_1 в уравнении (4.2) к опорному коэффициенту a_{11} первого шага прямого хода, то есть к коэффициенту при x_1 в опорном уравнении (4.1), а затем вычтем из уравнения (4.2) опорное уравнение (4.1), взятое с множителем $\mu_{21}^{(1)}$. Тогда получим уравнение

$$(a_{21}-\mu_{21}^{(1)}a_{11})x_1+(a_{22}-\mu_{21}^{(1)}a_{12})x_2+(a_{23}-\mu_{21}^{(1)}a_{13})x_3=(a_{24}-\mu_{21}^{(1)}a_{14}).$$

В силу равенств

$$(a_{21}-\mu_{21}^{(1)}a_{11})=(a_{21}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{11})=(a_{21}-a_{21})=0$$

коэффициент при x_1 в полученном уравнении окажется равным нулю, и уравнение формально примет тот же самый вид (4.6). Однако, коэффициенты при неизвестных x_1, x_2 и правая часть здесь, естественно, другие. Вместо формул (4.7) для их вычисления используются формулы

$$\mu_{21}^{(1)}=\frac{a_{21}}{a_{11}},\ a_{22}^{(1)}=a_{22}-\mu_{21}^{(1)}a_{12},\ a_{23}^{(1)}=a_{23}-\mu_{21}^{(1)}a_{13},\ a_{24}^{(1)}=a_{24}-\mu_{21}^{(1)}a_{14}. \quad (4.9)$$

Аналогично, выписывая пару уравнений

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3=a_{14}, \quad (4.1)$$

$$a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3=a_{34} \quad (4.3)$$

исходной системы, выполняя перекрестное перемножение этих уравнений на коэффициенты при неизвестном x_1 и вычитая первое из полученных уравнений

$$a_{31}a_{11}x_1+a_{31}a_{12}x_2+a_{31}a_{13}x_3=a_{31}a_{14}$$

из второго уравнения

$$a_{11}a_{31}x_1+a_{11}a_{32}x_2+a_{11}a_{33}x_3=a_{11}a_{34},$$

приходим к уравнению

$$a_{32}^{(1)}x_2+a_{33}^{(1)}x_3=a_{34}^{(1)} \quad (4.10)$$

не содержащему неизвестного x_1, с параметрами

$$a_{32}^{(1)}=a_{11}a_{32}-a_{31}a_{12},\quad a_{33}^{(1)}=a_{11}a_{33}-a_{31}a_{13},\quad a_{34}^{(1)}=a_{11}a_{34}-a_{31}a_{14}. \quad (4.11)$$

Аналогично, применение к выписанным только что уравнениям (4.1), (4.3) исключения Гаусса, которое теперь состоит в вычислении отношения

$$\mu_{31}^{(1)} = \frac{a_{31}}{a_{11}} \tag{4.12}$$

коэффициента a_{31} при неизвестном x_1 в уравнении (4.3), из которого это неизвестное должно быть исключено, к опорному коэффициенту a_{11}, и последующем вычитании из уравнения (4.3) опорного уравнения (4.1), взятого с множителем (4.12), приводит к уравнению вида (4.10), параметры которого задаются формулами

$$\mu_{31}^{(1)} = \frac{a_{31}}{a_{11}},\ a_{32}^{(1)} = a_{32} - \mu_{31}^{(1)}a_{12},\ a_{33}^{(1)} = a_{33} - \mu_{31}^{(1)}a_{13},\ a_{34}^{(1)} = a_{34} - \mu_{31}^{(1)}a_{14}. \tag{4.13}$$

На этом первый шаг прямого хода завершается. В результате его осуществления исходная система уравнений (4.1) – (4.3) оказывается замененной системой

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = a_{14}, \tag{4.14}$$

$$a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 = a_{24}^{(1)}, \tag{4.15}$$

$$a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 = a_{34}^{(1)} \tag{4.16}$$

неизвестное x_1 в которой содержится лишь в первом уравнении, а во втором и третьем уравнениях отсутствует. Параметры этой системы в случае использования перекрестного перемножения уравнений определяются по формулам (4.7), (4.11), а в случае использования исключений Гаусса – по формулам (4.9), (4.13).

Далее из полученной на первом шаге прямого хода системы (4.14) – (4.16) выделяем подсистему уравнений (4.15), (4.16), не содержащих неизвестного x_1, и применительно к этой подсистеме проводим второй шаг прямого хода. Уравнение (4.14) – опорное уравнение первого шага – на втором шаге не преобразуется.

Выбираем из уравнений (4.15), (4.16) уравнение с отличным от нуля коэффициентом при неизвестном x_2 и принимаем его в качестве *опорного уравнения* второго шага прямого хода. Без ограничения общности можно считать опорным уравнением второго шага уравнение (4.15).

Опорное уравнение (4.15) второго шага прямого хода на этом шаге не меняется, а используется для исключения неизвестного x_2 из остальных уравнений подсистемы (то есть в данном случае из уравнения (4.16)).

В результате проведения второго шага прямого хода уравнение (4.16) оказывается замененным уравнением вида

$$a_{33}^{(2)} x_3 = a_{34}^{(2)}. \tag{4.17}$$

При этом в случае использования перекрестного перемножения уравнений параметры уравнения (4.17) вычисляются по формулам

$$a_{33}^{(2)} = a_{22}^{(1)} a_{33}^{(1)} - a_{32}^{(1)} a_{23}^{(1)}, \quad a_{34}^{(2)} = a_{22}^{(1)} a_{34}^{(1)} - a_{32}^{(1)} a_{24}^{(1)}, \tag{4.18}$$

а в случае использования исключений Гаусса – по формулам

$$\mu_{32}^{(2)} = a_{32}^{(1)} / a_{22}^{(1)}, \quad a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - \mu_{32}^{(2)} a_{23}^{(1)}, \quad a_{34}^{(2)} = a_{34}^{(1)} - \mu_{32}^{(2)} a_{24}^{(1)}. \tag{4.19}$$

Заметим, что фигурирующая в последних формулах величина

$$\mu_{32}^{(2)} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \tag{4.20}$$

представляет собой отношение коэффициента $a_{32}^{(1)}$ при исключаемом неизвестном x_2 в уравнении (4.16) к опорному коэффициенту $a_{22}^{(1)}$ второго шага прямого хода.

На этом при рассматриваемой размерности системы второй шаг прямого хода, а с ним и весь прямой ход, заканчивается, и в результате исходная система уравнений (4.1) – (4.3) оказывается замененной системой

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = a_{14}, \tag{4.21}$$

$$a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 = a_{24}^{(1)}, \tag{4.22}$$

$$a_{33}^{(2)} x_3 = a_{34}^{(2)} \tag{4.23}$$

с верхней треугольной матрицей, параметры которой в случае перекрестного перемножения уравнений вычисляются с помощью последовательного использования формул (4.7), (4.11), (4.18), а в случае исключений Гаусса – с помощью последовательного использования формул (4.9), (4.13), (4.19).

Далее проводится обратный ход метода – нахождение неизвестных x_1, x_2, x_3 из системы (4.21) – (4.23). Именно, из уравнения (4.23) находим неизвестное x_3. Далее, подставляем найденное значение x_3 в уравнение (4.22) и находим из получившегося соотношения неизвестное x_2. Наконец, подстановка найденных значений x_2, x_3 в уравнение (4.21) дает равенство для нахождения x_1.

Отметим, что нахождение неизвестных на этапе обратного хода производится в *обратном порядке* их номеров.

Замечание 4.1. Описанный выше метод последовательного исключения неизвестных, основанный на исключениях Гаусса, называют *методом Гаусса*, а используемые в этом методе величины (4.8), (4.12) и величина (4.20) носят названия *множителей Гаусса* соответственно первого и второго шагов прямого хода.

Упражнение 4.2. Найти методом последовательного исключения неизвестных с использованием перекрестного перемножения уравнений решение линейной системы

$$2x_1+3x_2+4x_3=3, \tag{4.24}$$

$$5x_1+6x_2+7x_3=6, \tag{4.25}$$

$$8x_1+9x_2+11x_3=10. \tag{4.26}$$

Решение. Поскольку целью упражнения является иллюстрация идеи метода последовательного исключения неизвестных, вместо формальных вычислений по выведенным выше формулам (4.7), (4.11) и (4.18) мы просто повторим действия, которые мы производили над уравнениями с произвольными коэффициентами и правыми частями, применительно к системе (4.24) – (4.26) с конкретными числовыми коэффициентами и правыми частями.

Именно, принимаем уравнение (4.24) в качестве опорного уравнения первого шага прямого хода и производим перекрестное перемножение уравнений (4.24), (4.25) на коэффициенты при неизвестном x_1. При этом уравнение (4.24) умножится на 5, а уравнение (4.25) – на число 2. В результате получим пару уравнений

$$10x_1+15x_2+20x_3=15,$$

$$10x_1+12x_2+14x_3=12,$$

и вычитание первого из этих уравнений из второго дает уравнение

$$-3x_2-6x_3=-3,$$

не содержащее неизвестного x_1.

Аналогично, перекрестное перемножение уравнений (4.24), (4.26) на коэффициенты при неизвестном x_1 приведет к паре уравнений

$$16x_1+24x_2+32x_3=24,$$

$$16x_1+18x_2+22x_3=20,$$

а вычитание первого из этих уравнений из второго даст уравнение

$$-6x_2-10x_3=-4,$$

не содержащее неизвестного x_1.

На этом первый шаг прямого хода завершен. В результате его осуществления исходная система уравнений (4.24) – (4.26) оказалась замененной системой

$$2x_1+3x_2+4x_3=3, \qquad (4.27)$$

$$-3x_2-6x_3=-3, \qquad (4.28)$$

$$-6x_2-10x_3=-4. \qquad (4.29)$$

Далее, выделяем в системе (4.27) – (4.29) подсистему, состоящую из уравнений (4.28), (4.29), и применяем к ней второй шаг прямого хода, приняв в качестве опорного уравнения уравнение (4.28). Перекрестное перемножение уравнений (4.28), (4.29) на коэффициенты при неизвестном x_2 приводит к паре уравнений

$$18x_2+36x_3=18,$$

$$18x_2+30x_3=12.$$

Вычитание первого из этих уравнений из второго дает уравнение

$$-6x_3=-6,$$

не содержащее неизвестного x_2. На этом при рассматриваемой размерности n системы ($n=3$) второй шаг прямого хода завершен, а с ним завершен и весь прямой ход.

В результате прямого хода исходная система уравнений (4.24) – (4.26) заменена системой

$$2x_1+3x_2+4x_3=3, \tag{4.30}$$

$$-3x_2-6x_3=-3, \tag{4.31}$$

$$-6x_3=-6 \tag{4.32}$$

с нижней треугольной матрицей.

Затем осуществляется обратный ход метода. Именно, из уравнения (4.32) получаем равенство $x_3=1$. Далее, подстановка этого значения в уравнение (4.31) приводит к равенству $x_2=-1$. Наконец, подстановка найденных значений x_2, x_3 в уравнение (4.30) дает для неизвестного x_1 значение $x_1=1$.

<u>Замечание 4.3</u>. При решении квадратной системы линейных алгебраических уравнений на компьютере прямой ход метода последовательного исключения неизвестных сводится к преобразованию двумерного массива, который изначально заполняется элементами расширенной матрицы системы. При этом блок программы, реализующий прямой ход, оформляется в виде трех вложенных циклов. Параметром первого («внешнего») цикла служит номер шага прямого хода j, который

меняется от 1 до $n–1$ (n – размерность системы). Параметром вложенного в него следующего («среднего») цикла является номер i уравнения с исключаемым неизвестным, принимающий значения от $j+1$ до n. Наконец, параметром третьего («внутреннего») цикла служит изменяющийся от $j+1$ до $n+1$ номер m элемента a_{im} строки расширенной матрицы с номером i.

После выполнения этого блока программы в упомянутом двумерном массиве в позициях (i, m) с $m \geq i$ окажутся элементы расширенной матрицы преобразованной системы, нужные для реализации обратного хода. В позициях же (i, m) с $i<m$ при использовании исключений Гаусса можно расположить множители Гаусса с соответствующими нижними индексами. Эти множители несут важную информацию относительно матрицы исходной системы уравнений и могут быть, в частности, использованы для нахождения собственных чисел и собственных векторов упомянутой матрицы с помощью так называемого LU-алгоритма.

Формулы для программирования арифметических операторов внутреннего цикла, которые обеспечивают преобразование элементов расширенной матрицы на этапе прямого хода, и формулы для программирования арифметических операторов на этапе обратного хода приведены в пособии [2] для произвольной размерности системы n. При этом следует иметь в виду, что фигурирующий в указанных формулах верхний индекс введен исключительно для понимания структуры метода и при программировании упомянутых арифметических операторов не используется, поскольку новые элементы расширенной матрицы, вычисленные с помощью этих операторов, записываются в двумерный массив на место старых элементов с теми же нижними индексами.

Замечание 4.4. Отметим интересный факт, относящийся к связи между описанными выше двумя вариантами метода последовательного исключения неизвестных.

Разделим опорное уравнение (4.1) первого шага прямого хода на опорный коэффициент a_{11} этого шага. Тогда получим уравнение

$$x_1+(a_{12}/a_{11})x_2+(a_{13}/a_{11})x_3=a_{14}/a_{11}, \tag{4.33}$$

называемое *нормированным опорным уравнением первого шага прямого хода*. Далее, рассмотрим уравнение (4.2) исходной системы и произведем перекрестное перемножение уравнений (4.33), (4.2) на коэффициенты при исключаемом неизвестном x_1. При этом нормированное опорное уравнение (4.33) перейдет в уравнение

$$a_{21}\,x_1+a_{21}\,(a_{12}/a_{11})x_2+a_{21}\,(a_{13}/a_{11})x_3=a_{21}(\,a_{14}/a_{11}), \tag{4.34}$$

а уравнение (4.2) останется прежним, поскольку коэффициент при x_1 в нормированном опорном уравнении (4.33) равен единице. Последующее вычитание из уравнения (4.2) уравнения (4.34) даст уравнение

$$(a_{22}-a_{21}(a_{12}/a_{11}))x_2+(a_{23}-a_{21}(a_{13}/a_{11}))x_3=(a_{24}-a_{21}(a_{14}/a_{11})).$$

Если во всех членах этого уравнения выделить присутствующую в них величину a_{21}/a_{11} и обозначить эту величину через μ_{21}, то получим уравнение вида (4.6) с теми же параметрами (4.9), которые ранее были нами получены с использованием исключений Гаусса. Тем самым приходим к выводу, что метод Гаусса можно трактовать как метод последовательного исключения неизвестных с перекрестным перемножением уравнений с дополнительной *нормировкой опорных уравнений на каждом шаге прямого хода*.

Замечание 4.5. При решении систем линейных уравнений методом Гаусса на бумаге или компьютере не следует пользоваться результатом предыдущего замечания и применять перекрестное перемножение уравнений с предварительной нормировкой опорных уравнений. Разумнее использовать *принцип Гаусса*, согласно которому, как это видно из формул (4.9), (4.13), (4.19), для исключения неизвестного из данного уравнения *нужно вычесть из этого уравнения опорное (ненормированное) уравнение, взятое с соответствующим множителем Гаусса*.

Упражнение 4.6. Решить с использованием принципа Гаусса систему (4.24) – (4.26). Провести вычисления на прямом ходе метода в двух вариантах: сначала применяя упомянутый принцип к преобразованию уравнений, а затем к преобразованию строк расширенной матрицы.

Замечание 4.7. Изложенный простейший вариант метода Гаусса называется *схемой единственного деления*. С другими многочисленными модификациями этого метода можно ознакомиться по учебной литературе.

Замечание 4.8. Напомним, что построение многочлена наилучшего среднеквадратического приближения сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов многочлена. При применении метода Гаусса к решению таких систем в случае, когда степень многочлена высока, наблюдается сильная зависимость полученных значений коэффициентов от вычислительных погрешностей, возникающих из-за ошибок округлений при вводе параметров системы (коэффициентов при неизвестных и правых частей) в память компьютера («непрерывный» и «полудискретный» варианты метода наименьших квадратов). Причина этой неприятности (она называется *плохой обусловленностью вычислительной задачи*) коренится не в свойствах метода Гаусса, а в свойствах набора базисных функций (2.4) (степеней независимой переменной), в виде разложения (2.5) по которым ищется приближающий многочлен. Чтобы избавиться от плохой обусловленности, приходится переходить к базису из так называемых *ортогональных многочленов*. Описание таких многочленов дано, например, в [3].

Следует отметить, что кроме описанного в настоящем пособии непрерывного и полудискретного вариантов метода наименьших квадратов, имеется и *дискретный вариант*, применяемый в тех случаях, когда приближаемая функция задана на отрезке $[a, b]$ таблицей своих значений в точках x_k, $k=0,\ 1,\dots,K$ этого отрезка. В этом варианте для нахождения коэффициентов приближающего многочлена используется система того же вида (2.14), с тем лишь отличием, что фигурирующие в этой системе скалярные произведения задаются формулой:

$$\langle v, w\rangle = \frac{1}{K+1}\sum_{k=0}^{K} v(x_k)\cdot w(x_k).$$

С описанием особенностей этого варианта рекомендуем ознакомиться по учебнику [3].

Для углубленного изучения вопросов, связанных с тематикой настоящей главы, следует обратиться к классическому учебнику численных методов [4].

Задания для самостоятельного выполнения

Задание 1. Составить программу для вычисления значений многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения произвольной степени n в заданной точке x отрезка $[a,\ b]$, используя полудискретный вариант метода наименьших квадратов с применением метода Гаусса для решения линейных систем. Применительно к функции Рунге

$$f(x) = 1 / (1+25x^2) \quad , \qquad -1 \le x \le 1$$

исследовать визуально поведение полученного приближающего многочлена при увеличении его степени n, уделив особое внимание выбору параметра N в локально интерполяционных квадратурных формулах трапеций и Симпсона.

Задание 2. Дополнить программу из предыдущего задания дополнительным блоком, включив в него алгоритм решения линейных систем методом последовательного исключения неизвестных, использующим:

а) перекрестное перемножение уравнений

и

б) перекрестное перемножение уравнений с нормировкой опорных уравнений.

Применить эту дополненную программу к визуальному исследованию поведения приближающих многочленов для функции Рунге, имея целью сравнительный анализ устойчивости к вычислительным погрешностям этих трех вариантов метода последовательного исключения неизвестных при больших значениях степени приближающего многочлена.

Задание 3. Изучить визуально применительно к функции Рунге поведение графиков приближающих многочленов при изменении их степеней в случае дискретного варианта метода наименьших квадратов. Придавая параметру K таблицы значений функции с равноотстоящими узлами различные значения, выяснить, при каких значениях степеней приближающих многочленов (в зависимости от K) наблюдается максимальная близость графиков многочленов к графику функции.

Литература к главе 3

1. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Численное интегрирование : учебное пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – Вып. IV. – 36 с.

2. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Интерполяция кубическими сплайнами : учебное пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – Вып. III. – 36 с.
3. Волков Е.А. Численные методы : учебное пособие / Е.А. Волков. – Санкт-Петербург : Лань, 2004. – 256 с.
4. Бахвалов Н.С. Численные методы : учебное пособие / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – Москва : Физматлит, 2002. – 630 с.

Глава 4. Интерполяция кубическими сплайнами

§ 1. Понятие сплайна.

В настоящем параграфе мы познакомимся с другим классом приближающих функций – с так называемыми сплайнами.

Разделим отрезок $[a, b]$, на котором требуется приблизить заданную функцию f, на N подотрезков точками

$$a= x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{i-1} < x_i < \ldots < x_N =b. \tag{1.1}$$

Подотрезок $[x_{i-1}, x_i]$, образованный соседними точками x_{i-1}, x_i, условимся называть i-тым ($i= 1, 2, \ldots , N$) частичным отрезком разбиения отрезка $[a,b]$.

<u>Определение 1.1</u> Функция φ, рассматриваемая на всем отрезке $[a, b]$, называется *сплайном на $[a, b]$ степени n порядка m*, если она удовлетворяет двум требованиям.

<u>Первое требование</u> состоит в том, что функция φ на каждом частичном отрезке разбиения $[x_{i-1}, x_i]$ должна совпадать с некоторым

многочленом степени не выше n. Для разных частичных отрезков разбиения указанные многочлены, вообще говоря, различны; общим же является то обстоятельство, что эти многочлены имеют степень не выше n. Многочлен, с которым функция φ совпадает на i-том частичном отрезке разбиения $[x_{i-1}, x_i]$, обозначается через φ_i и называется *локальным представителем сплайна* на этом отрезке разбиения (см. рис. 1.1).

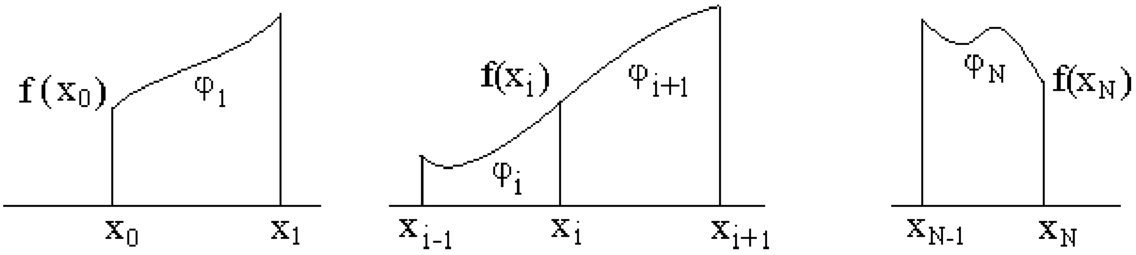

Рис. 1.1

Поскольку этот многочлен имеет степень не выше n, в силу только что сформулированного требования для функции φ на i-том частичном отрезке разбиения справедливо представление

$$\varphi(x)= \varphi_i(x) = a_0^{(i)} + a_1^{(i)} x + \ldots +a_n^{(i)} x^n, \; x_{i-1} \le x \le x_i. \tag{1.2}$$

С изменением номера i частичного отрезка многочлен φ_i, вообще говоря, меняется, а значит, меняются и его коэффициенты. На это как раз и указывает верхний индекс i в обозначении коэффициентов многочлена φ_i.

Второе требование заключается в том, что локальные представители φ_i должны быть согласованы между собой. Именно, во всех внутренних точках x_i, то есть при $i= 1, 2, \ldots , N-1$, значения производных многочленов φ_i, φ_{i+1}, отвечающих соседним частичным отрезкам разбиения $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_i, x_{i+1}]$, до порядка m включительно должны совпадать:

$$\varphi_i^{(k)}(x_i) = \varphi_{i+1}^{(k)}(x_i), \; k= 0, 1, 2, \ldots , m. \tag{1.3}$$

В условии (1.3) индекс k означает порядок производной. Это условие называют *условием гладкости сплайна*, поскольку его выполнение обеспечивает принадлежность сплайна φ пространству $C^m[a, b]$, то есть принадлежность к совокупности функций, имеющих на отрезке $[a, b]$ непрерывные производные до порядка m включительно. Условно это изображено в средней части рис. 1.1, где график локального представителя φ_i в точке x_i плавно переходит в график следующего локального представителя φ_{i+1}.

Концы (1.1) частичных отрезков разбиения называют *узлами* сплайна.

Определение 1.2. Сплайн φ степени n порядка m называют *интерполяционным* для заданной на отрезке $[a, b]$ функции f, если во всех узлах сплайна (1.1) значения сплайна равны значениям функции, то есть если выполнены условия:

$$\varphi(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0, 1, \dots , N \tag{1.4}$$

(см. рис. 1.1).

Интерполяционные для функции f сплайны рассматривают как приближения к этой функции на отрезке $[a, b]$. При этом степень сплайна n и порядок сплайна m считают фиксированными, а в качестве параметра, за счет увеличения которого стараются добиваться лучшего приближения функции, принимают число N частичных отрезков разбиения.

Замечание 1.3. Термин «сплайн» (spline) имеет техническое происхождение: этим словом английские чертежники-кораблестроители прошлых веков называли длинную гибкую рейку для вычерчивания деталей корпуса корабля в натуральную величину, то есть чертежный инструмент для проведения гладких кривых. В современной же математике под сплайном понимают функцию φ, которая локально (то есть на частичных отрезках разбиения) задается многочленами φ_i фиксированной степени n. При этом упомянутые многочлены считаются подобранными так, чтобы в любом внутреннем узле x_i производные соседних многочленов φ_i, φ_{i+1} до порядка m включительно совпадали. Такое условие на значения производных многочленов φ_i, φ_{i+1} в узле x_i приходится налагать, поскольку в этой точке определены оба этих многочлена, и каждый из них при отсутствии требований (1.3) мог бы иметь в указанном узле различные значения производных. Последнее же исключало бы принадлежность функции φ, составленной из таких многочленов, классу гладкости $C^m[a, b]$. Во всех же других точках x гладкость функции φ обеспечена автоматически, поскольку в таких точках эта функция совпадает лишь с одним из многочленов, а всякий многочлен обладает в этих точках непрерывными производными любого порядка.

§ 2. Кубические сплайны

На практике чаще всего используют сплайны третьей степени ($n=3$) второго порядка ($m=2$). Такие сплайны называют *кубическими*, поскольку график такого сплайна составлен из отрезков графиков многочленов третьей степени, а графики многочленов третьей степени принято называть кубическими параболами. Выбор для m значения 2 объясняется в том числе и тем, что при движении обрабатывающего инструмента в станках с числовым программным управлением (ЧПУ) по дважды непрерывно дифференцируемой кривой удается избежать ударных нагрузок, которые в силу 2-го закона Ньютона возникали бы в случае разрывов 2-й производной и которые могли бы привести к разрушению обрабатывающего инструмента или обрабатываемой поверхности. Значение же $n=3$ – минимальное значение, обеспечивающее существование интерполяционного сплайна класса $C^2[a, b]$ при любом наборе $\{f(x_i)\}$ значений функции f в узлах (1.1).

Локальные представления (1.2) для кубического сплайна имеют вид:

$$\varphi_i(x) = a_0^{(i)} + a_1^{(i)} x + a_2^{(i)} x^2 + a_3^{(i)} x^3, \quad x_{i-1} \le x \le x_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \tag{2.1}$$

поэтому для задания кубического сплайна следует задать 4N коэффициентов $a_j^{(i)}$ (каждый из многочленов (2.1) имеет 4 коэффициента, а всего таких многочленов N). Выбор этих коэффициентов должен быть подчинен условиям интерполяционности (1.4), которые для данного случая удобно записать в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$a_0^{(1)} + a_1^{(1)} x_0 + a_2^{(1)} x_0^2 + a_3^{(1)} x_0^3 = f(x_0), \tag{2.2}$$

$$a_0^{(i)} + a_1^{(i)} x_i + a_2^{(i)} x_i^2 + a_3^{(i)} x_i^3 = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \tag{2.3}$$

$$a_0^{(i+1)} + a_1^{(i+1)} x_i + a_2^{(i+1)} x_i^2 + a_3^{(i+1)} x_i^3 = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \tag{2.4}$$

$$a_0^{(N)} + a_1^{(N)} x_N + a_2^{(N)} x_N^2 + a_3^{(N)} x_N^3 = f(x_N). \tag{2.5}$$

Заметим, что уравнение (2.3) получено приравниванием значения $\varphi_i(x_i)$ локального представителя φ_i в внутреннем узле x_i значению $f(x_i)$ приближаемой функции f, а уравнение (2.4) для того же значения i - приравниванием тому же значению $f(x_i)$ значения $\varphi_{i+1}(x_i)$ соседнего локального представителя φ_{i+1} в том же внутреннем узле x_i. Выписав эту пару уравнений, мы сразу убили двух зайцев: обеспечили выполнение условия гладкости (1.3) с $k=0$ в любом внутреннем узле x_i (то есть обеспечили непрерывность сплайна φ на отрезке $[a, b]$) и одновременно обеспечили выполнение условия интерполяционности в любом внутреннем узле.

Выполнение условия интерполяционности в краевых узлах x_0, x_N обеспечивается соответственно уравнениями (2.2) и (2.5).

Выписанные выше уравнения (2.2) – (2.5) должны быть дополнены уравнениями, вытекающими из условий гладкости (1.3) с $k=1$и $k=2$.

Для вывода этих уравнений дифференцируем представление (2.1) по переменной x. В результате для первой производной локального представителя φ_i получаем формулу

$$\varphi_i'(x) = a_1^{(i)} + 2a_2^{(i)}\,x + 3a_3^{(i)}\,x^2, \tag{2.6}$$

а, заменяя здесь индекс i на $i+1$, и формулу

$$\varphi_{i+1}'(x) = a_1^{(i+1)} + 2a_2^{(i+1)}\,x + 3a_3^{(i+1)}\,x^2 \tag{2.7}$$

для первой производной соседнего локального представителя φ_{i+1}. Придавая затем в формулах (2.6), (2.7) переменной x значение x_i и приравнивая в соответствии с требованием (1.3) при k, равным единице, полученные значения $\varphi_i'(x_i)$, $\varphi_{i+1}'(x_i)$, приходим к следующей группе уравнений

$$a_1^{(i)} + 2a_2^{(i)}\,x_i + 3a_3^{(i)}\,x_i^2 = a_1^{(i+1)} + 2a_2^{(i+1)}\,x_i + 3a_3^{(i+1)}x_i^2,\ \ i= 1,\, 2,\, \dots\, ,\, N\text{-}1, \tag{2.8}$$

которая должна быть добавлена к системе (2.2) – (2.5).

Далее, дифференцированием равенств (2.6), (2.7) получаем формулы

$$\varphi_i''(x) = 2a_2^{(i)} + 6a_3^{(i)}\,x, \tag{2.9}$$

$$\varphi_{i+1}''(x) = 2a_2^{(i+1)} + 6a_3^{(i+1)}\,x \tag{2.10}$$

для вторых производных соседних локальных представителей φ_i, φ_{i+1}. Придавая в формулах (2.9), (2.10) переменной x значение x_i и приравнивая получившиеся при этом значения вторых производных, приходим к еще одной группе уравнений

$$2a_2^{(i)} + 6a_3^{(i)} x_i = 2a_2^{(i+1)} + 6a_3^{(i+1)} x_i, \qquad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad (2.11)$$

которые так же должны быть добавлены к уравнениям (2.2) – (2.5).

Уравнения (2.11) обеспечивают выполнения условия гладкости (1.3) при значении k равном двум.

Система (2.2) – (2.5), (2.8), (2.11) есть система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $a_j^{(i)}$. Число неизвестных в этой системе равно $4N$, а всего этих уравнений $4N-2$. Для получения замкнутой системы уравнений (то есть системы с числом уравнений, равным числу неизвестных) не хватает двух уравнений. Эти уравнения получаются из двух дополнительных условий, которые задаются на концах отрезка $[a, b]$ и потому называются *краевыми условиями*. Например, можно задать значения γ и δ вторых производных сплайна в узлах x_0, x_N соответственно. В этом случае с учетом формулы (2.9) получим следующую пару дополнительных уравнений:

$$2a_2^{(1)} + 6a_3^{(1)} x_0 = \gamma, \qquad 2a_2^{(N)} + 6a_3^{(N)} x_N = \delta. \quad (2.12)$$

Другая возможность получить пару дополнительных уравнений – это задать в указанных узлах значения не вторых производных сплайна, а значения μ, η его первых производных. В силу формулы (2.6) тогда получится другая пара дополнительных уравнений

$$a_1^{(1)} + 2a_2^{(1)} x_0 + 3a_3^{(1)} x_0^2 = \mu, \quad a_1^{(N)} + 2a_2^{(N)} x_N + 3a_3^{(N)} x_N^2 = \eta. \quad (2.13)$$

Замечание 2.1. Если в формуле положить $\gamma = \delta = 0$, то получим сплайн, который называют *естественным кубическим сплайном*. Дело в том, что условия (2.12) являются математическим аналогом ситуации, когда в точках плоскости $(x_0, f(x_0))$, $(x_N, f(x_N))$ гибкая рейка (« физический сплайн») закреплена шарнирно, то есть может свободно поворачиваться вокруг этих точек. В этом случае концы рейки, расположенные соответственно левее и правее геометрических прямых на плоскости, параллельных оси oy и проходящих через точки с абсциссами x_0, x_N, займут естественное в данной ситуации прямолинейное положение, а значит, функция $\varphi(x)$, описывающая кривую, по которой изогнется рейка, проходящая через точки $(x_i, f(x_i))$ $(i= 0, 1, 2, \dots , N)$, вне отрезка $[a, b]$ будет совпадать с многочленами первой степени. А так как вторые производные многочленов первой степени равны нулю, то вне отрезка [a, b] будет иметь место равенство $\varphi''(x) \equiv 0$. По непрерывности нулевые значения вторых производных перейдут и в точки x_0, x_N.

Замечание 2.2. Сплайн с дополнительными условиями (2.13) называют *сплайном с жестко заделанными концами.* Физически этот случай соответствует тому, что концы рейки, расположенные левее и правее упомянутых выше геометрических прямых, жёстко закреплены на плоскости oxy вдоль некоторых геометрических прямых, образующих с осью ox заданные углы (параметры μ и η в уравнениях (2.13) есть тангенсы этих углов).

Замечание 2.3. Выбор коэффициентов $a_j^{(i)}$ в качестве неизвестных при построении кубических сплайнов, естественный и наглядный с теоретической и методической точек зрения, на практике оказывается не рациональным, поскольку при выборе в качестве параметров других характеристик сплайна, а именно значений

$$s_i = \varphi''(x_i) \quad , \qquad i = 0, 1, \dots , N, \tag{2.14}$$

вторых производных сплайна в узлах x_i , задача построения интерполяционного кубического сплайна после простых аналитических преобразований сведётся к решению линейной системы с существенно меньшим количеством неизвестных и более простой матрицей.

§ 3. Вторые производные кубического сплайна

Обозначим через h_i длину i-го отрезка разбиения

$$h_i = x_i - x_{i-1}. \tag{3.1}$$

Рассмотрим набор чисел

$$s_0,\ s_1,\ \dots,\ s_{i-1},\ s_i,\ \dots,\ s_N \tag{3.2}$$

и набор значений функции f

$$f(x_0), f(x_1),\ \dots,\ f(x_{i-1}), f(x_i),\ \dots,\ f(x_N). \tag{3.3}$$

Теорема 3.1. Для любых $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$, s_{i-1}, s_i из наборов (3.2), (3.3) найдется единственный многочлен степени не выше третьей, значения которого в точках x_{i-1}, x_i совпадают соответственно с $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$, а значения второй производной которого в этих точках равны соответственно числам s_{i-1}, s_i.

Доказательство.

Запишем многочлен степени не выше третьей в виде разложения

$$a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3 \tag{3.4}$$

по степеням независимой переменной x.

Рассмотрим систему уравнений

$$a_0 + a_1 x_{i-1} + a_2 (x_{i-1})^2 + a_3(x_{i-1})^3 = f(x_{i-1}), \tag{3.5}$$

$$a_0 + a_1 x_i + a_2 (x_i)^2 + a_3(x_i)^3 = f(x_{i-1}), \qquad (3.6)$$

$$2a_2 + 6a_3(x_{i-1}) = s_{i-1}, \qquad (3.7)$$

$$2a_2 + 6a_3(x_i) = s_i, \qquad (3.8)$$

первые два из которых получены приравниванием значений многочлена (3.4) в точках x_{i-1}, x_i значениям $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$ функции f, а последние два – приравниванием числам s_{i-1}, s_i значений второй производной многочлена (3.4) в этих точках.

Вопрос о существовании и единственности многочлена (3.4) с указанными в формулировке теоремы свойствами эквивалентен, очевидно, вопросу об однозначной разрешимости системы (3.5) – (3.8) относительно коэффициентов a_j.

Покажем, что такая разрешимость действительно имеет место.

Система (3.5) – (3.8) есть система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных a_j. Чтобы установить ее разрешимость (и притом однозначную), достаточно в силу известного факта линейной алгебры убедиться в отличии от нуля определителя этой системы.

Преобразуем матрицу

$$\begin{array}{cccc}
1 & x_{i-1} & (x_{i-1})^2 & (x_{i-1})^3 \\
1 & x_i & (x_i)^2 & (x_i)^3 \\
0 & 0 & 2 & 6(x_{i-1}) \\
0 & 0 & 2 & 6(x_i)
\end{array}$$

этой системы с помощью операций над ее строками, которые не меняют определитель.

Именно, оставим первую и третью строки без изменений, а для получения новой второй и новой четвертой строки вычтем соответственно из второй строки исходной матрицы ее первую строку, а из четвертой строки исходной матрицы – ее третью строку. Тогда придем к верхней треугольной матрице

$$
\begin{matrix}
1 & x_{i-1} & (x_{i-1})^2 & (x_{i-1})^3 \\
0 & x_i - x_{i-1} & (x_i)^2 - (x_{i-1})^2 & (x_i)^3 - (x_{i-1})^3 \\
0 & 0 & 2 & 6(x_{i-1}) \\
0 & 0 & 0 & 6(x_i - x_{i-1})
\end{matrix}
$$

с определителем, равным, очевидно, числу $12(x_i - x_{i-1})^2$. Поскольку $x_i \neq x_{i-1}$, это число отлично от нуля, а значит, отличен от нуля определитель выписанной только что верхней треугольной матрицы, и как следствие, отличен от нуля определитель ранее выписанной матрицы системы (3.5) – (3.8).

Теорема доказана.

Замечание 3.2. В силу сказанного выше для нахождения многочлена, о котором идет речь в формулировке теоремы 3.1, следует решить систему (3.5) – (3.8) и подставить найденные значения неизвестных a_j в формулу (3.4). Для нас, однако, полезно не разложение этого многочлена по степеням x, а некоторое другое его представление, к выводу которого мы и переходим.

Рассмотрим многочлен степени не выше третьей

$$
\frac{1}{6}\left[s_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{h_i} + s_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{h_i} \right], \tag{3.9}
$$

вторая производная которого имеет, очевидно, вид

$$s_{i-1}\frac{x_i - x}{h_i} + s_i\frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

и потому принимает в точках x_{i-1}, x_i нужные нам значения s_{i-1}, s_i. Однако сам этот многочлен в точках x_{i-1}, x_i вместо требуемых значений $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$ принимает, вообще говоря, другие значения, а именно значения

$$\frac{1}{6}s_{i-1}h_i^2,\ \frac{1}{6}s_i h_i^2. \qquad (3.10)$$

Вычтем из многочлена (3.9) интерполяционный многочлен Лагранжа первой степени, принимающий в узлах интерполяции x_{i-1}, x_i значения (3.10) соответственно, то есть вычтем многочлен

$$\frac{h_i}{6}s_{i-1}(x_i - x) + \frac{h_i}{6}s_i(x - x_{i-1}). \qquad (3.11)$$

Поскольку вторая производная от многочлена первой степени равна нулю, вторая производная от разности многочленов (3.9), (3.11) будет принимать в точках x_{i-1}, x_i те же значения, что и многочлен (3.9), то есть значения s_{i-1}, s_i. Значения же самой этой разности в точках x_{i-1}, x_i равны нулю ввиду того, что многочлены (3.9), (3.11) в указанных точках принимают одинаковые значения.

Для получения многочлена, о котором идет речь в теореме 3.1, остается прибавить к упомянутой разности многочленов интерполяционный многочлен Лагранжа

$$f(x_{i-1})\frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} + f(x_i)\frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = f(x_{i-1})\frac{x_i - x}{h_i} + f(x_i)\frac{x - x_{i-1}}{h_i} \qquad (3.12)$$

первой степени для функции f с узлами интерполяции x_{i-1}, x_i, обладающий, как и многочлен (3.11), нулевой второй производной и принимающий в указанных узлах значения $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$.

Заметим. что многочлены, о которых идет речь в теореме 3.1 (а этих многочленов N штук, поскольку каждому значению i от единицы до N, то есть каждому частичному отрезку разбиения $[x_{i-1}, x_i]$, отвечает свой многочлен), определены на всей вещественной оси. Для нас, однако, интерес представляют лишь сужения этих многочленов на свои отрезки разбиения. Если обозначить через φ_i сужение на отрезок $[x_{i-1}, x_i]$ многочлена, построенного по параметрам s_{i-1}, s_i, $f(x_{i-1})$, $f(x_i)$, то в силу сказанного выше о многочленах (3.9), (3.11), (3.12) эти сужения будут иметь представления

$$\varphi_i(x) = f(x_{i-1})\frac{x_i - x}{h_i} + f(x_i)\frac{x - x_{i-1}}{h_i} + \frac{1}{6}\left[s_{i-1}\frac{(x_i - x)^3}{h_i} + s_i\frac{(x - x_{i-1})^3}{h_i}\right] -$$
$$- \frac{h_i}{6}\left[s_{i-1}(x_i - x) + s_i(x - x_{i-1})\right], \quad x_{i-1} \le x \le x_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \tag{3.13}$$

Обозначим через φ функцию, заданную на отрезке $[a,b]$ локальными представлениями (3.13). Так как соседние многочлены φ_i, φ_{i+1} в точке x_i принимают одно и то же значение $f(x_i)$, функция φ непрерывна на отрезке $[a,b]$ при любом наборе значений $s_0, s_1, \dots, s_N$. Дифференцируемость же этой функции в точках x_i, $i = 1, 2, \dots, N-1$ при произвольном выборе параметров s_i места не имеет; чтобы её обеспечить, на выбор s_i приходится налагать условия

$$\varphi_i'(x_i) = \varphi_{i+1}'(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \tag{3.14}$$

представляющие собой в подробной записи линейные алгебраические уравнения относительно s_i.

Для вывода этих уравнений выпишем производную функции (3.13)

$$\varphi_i'(x) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_i} + \frac{1}{2}\left[-s_{i-1}\frac{(x_i - x)^2}{h_i} + s_i\frac{(x - x_{i-1})^2}{h_i} \right] - \frac{h_i}{6}\left[-s_{i-1} + s_i \right] \tag{3.15}$$

и положим здесь $x = x_i$. Тогда получим следующее значение

$$\varphi_i'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_i} + \frac{1}{2}h_i s_i - \frac{h_i}{6}\left[-s_{i-1} + s_i \right] \tag{3.16}$$

для производной функции φ_i в точке i. Затем, увеличивая в (3.15) индекс i на единицу и опять полагая $x = x_i$, получим выражение

$$\varphi'_{i+1}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_{i+1}} - \frac{1}{2}h_{i+1} s_i - \frac{h_{i+1}}{6}\left[-s_i + s_{i+1} \right] \tag{3.17}$$

и для значения производной следующего многочлена φ_{i+1} в той же точке x_i.

Наконец, приравнивая выражения (3.16), (3.17), приходим к записи условий (3.14) в виде системы уравнений

$$h_i s_{i-1} + 2(h_i + h_{i+1})s_i + h_{i+1}s_{i+1} = \nu_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{3.18}$$

где ν_i – заданные правые части вида

$$v_i = 6\left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_{i+1}} - \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_i}\right].$$

(3.19)

Непрерывность же второй производной функции φ в точках x_i следует из того, что по построению многочленов φ_i вторые производные φ''_i, φ''_{i+1} соседних многочленов φ_i, φ_{i+1} принимают в точке x_i одно и то же значение s_i.

Выполнение же условия интерполяционности (1.4), то есть условия совпадения значений функции φ в точках i со значениями (3.3) функции f очевидно.

Итак, доказана

Теорема 3.3. Для того, чтобы формулы (3.13) давали локальные представления интерполяционного кубического сплайна для функции f, необходимо и достаточно, чтобы фигурирующие в них величины s_i, $i = 0, 1, \dots, N$ удовлетворяли системе (3.18) с правыми частями (3.19).

Замечание 3.4. В силу этой теоремы для построения интерполяционного кубического сплайна для функции f следует вычислить по значениям (3.3) правые части (3.19) системы (3.18) и найденные из этой системы неизвестные s_i подставить в формулы (3.13) для локальных представителей сплайна.

Замечание 3.5. Система (3.18) есть система $N-1$ уравнений с $N+1$ неизвестным. В силу этого факта решение такой системы не единственно, а значит, не является единственным и построенный по описанной в замечании 3.4 методике интерполяционный кубический сплайн для функции f. Для того чтобы уйти от этой неопределенности, следует дополнить уравнения (3.18) двумя уравнениями, сформулировав два дополнительных условия на сплайн. Эти условия могут быть двух типов: начальными и краевыми.

Дополнительные краевые условия уже обсуждались в предыдущем пункте. Остается лишь записать их в виде уравнений, дополняющих систему (3.18).

Краевые условия первого типа состоят в задании значений второй производной сплайна в крайних узлах x_0, x_N, то есть в задании величин s_0, s_N. Это соответствует дополнительным уравнениям

$$s_0 = \gamma, \quad s_N = \delta. \tag{3.20}$$

Заметим, что правые части γ, δ этих уравнений те же, что и правые части уравнений (2.12).

В частном случае, когда γ и δ взяты равными нулю, уравнения (3.20) есть уравнения

$$s_0 = 0, \quad s_N = 0. \tag{3.21}$$

Эти уравнения соответствуют естественному сплайну.

Краевые же условия второго типа состоят в задании значений первых производных сплайна в крайних узлах, то есть в задании значения первой производной локального представителя φ_1 в точке x_0 и значения первой производной локального представителя φ_N в точке x_N. Это соответствует заданию двух дополнительных уравнений вида

$$2h_1 s_0 + h_1 s_1 = 6\frac{f(x_1) - f(x_0)}{h_1} - 6\mu \ ,$$

$$h_N s_{N-1} + 2h_N s_N = 6\eta - 6\frac{f(x_N) - f(x_{N-1})}{h_N}. \qquad (3.22)$$

Эти уравнения выводятся с использованием формулы (3.15).

Именно, придаем в этой формуле индексу i значение, равное единице, а переменной x – значение x_0, и приравниваем полученное значение производной многочлена φ_1 в точке x_0 заданной величине μ. В результате приходим к первому из уравнений (3.22).

Второе из уравнений (3.22) выводится аналогично.

Наконец, в качестве дополнительных к системе (3.18) уравнений можно принять и уравнения

$$s_0 = s_1 \ , \qquad s_{N-1} = s_N \ . \qquad (3.23)$$

В этом случае сплайн называют *сплайном с параболическими концевыми отрезками.*

Поясним происхождение этого названия.

Многочлен φ_1 есть многочлен третьей степени. Поэтому его вторая производная есть линейная функция. Если линейная функция в двух различных точках (в данном случае в точках x_0, x_1) принимает одинаковые значения, то она является константой. Таким образом, вторая производная многочлена φ_1 есть константа, а значит, сама функция φ_1 есть многочлен второй степени, и потому ее график на концевом отрезке $[x_0, x_1]$ является параболой.

В заключение укажем вид, который принимает система (3.18) и дополнительные к ней уравнения в случае равноотстоящих узлов.

Итак, пусть узлы (1.1) равноотстоящие. Тогда длины (3.1) частичных отрезков разбиения одинаковы и совпадают с одним и тем же числом h, а именно, с числом $(b-a)/N$. Заменяя в равенствах (3.18), (3.19) величины h_{i-1}, h_i общим значением h, деля на h получившиеся равенства и приводя подобные при $f(x_i)$, приходим к соотношениям

$$s_{i-1} + 4s_i + s_{i+1} = \kappa_i \ , \qquad i = 1, 2, \dots , N-1, \qquad (3.24)$$

$$\kappa_i = \frac{\nu_i}{h} = 6\,\frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots , N-1, \qquad (3.25)$$

которые и заменяют равенства (3.18), (3.19) в случае равноотстоящих узлов.

Вид дополнительных уравнений (3.20), (3.21), (3.23) при этом не меняется, а дополнительные уравнения (3.22) приобретают вид

$$2s_0 + s_1 = 6\,\frac{\dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \mu}{h},$$

$$s_{N-1} + 2s_N = 6\,\frac{\eta - \dfrac{f(x_N) - f(x_{N-1})}{h}}{h}. \qquad (3.26)$$

§ 4. Кубический сплайн с начальными условиями

Простейший способ замкнуть систему (3.18) – задать значения s_0, s_1 . В результате получим систему

$$s_0 = \gamma\ ,\quad s_1 = \delta, \tag{4.1}$$

$$h_i\, s_{i-1} + 2\,(h_i + h_{i+1})\, s_i + h_{i+1}\, s_{i+1} = \nu_i.\quad i = 1, 2, \dots, N\text{-}1\ . \tag{4.2}$$

Алгоритм решения такой системы чрезвычайно прост – он сводится к вычислениям по рекуррентной формуле

$$s_0 = \gamma,\ \ s_1 = \delta,\ \ s_{i+1} = (1/h_{i+1})\,(\,\nu_i - h_i\, s_{i-1} - 2(\,h_i + h_{i+1}\,)\, s_i\,),\quad i = 1, 2, \dots, N\text{-}1.$$

Однако при больших N хороших сплайн-приближений на этом пути не получается, поскольку задача (4.1) – (4.2) является некорректно поставленной.

Напомним, что под корректностью математической задачи понимают ситуацию, когда изменение решения, вызванное изменением данных задачи, имеет равномерно по N тот же порядок малости, что и изменение входных данных. Покажем, что система (4.1) – (4.2) таким свойством как раз и не обладает.

Дадим правой части γ в (4.1) приращение $\Delta\gamma$ и выясним, как это скажется на решении системы. Обозначим новое решение через $\bar{s} = \{\ \bar{s}_i\ \}$; это решение удовлетворяет системе

$$\bar{s}_0 = \gamma + \Delta\gamma,\ \ \bar{s}_1 = \delta, \tag{4.3}$$

$$h_i\ \bar{s}_{i-1} + 2(\,h_i + h_{i+1})\ \ \bar{s}_i + h_{i+1}\ \bar{s}_{i+1} = \nu_i,\quad i = 1, 2, \dots, N\text{-}1\ . \tag{4.4}$$

Вычитание уравнений (4.1), (4.2) из соответствующих уравнений системы (4.3), (4.4) даёт для приращения решения $\varepsilon = \{ \varepsilon_i \} = \{ \bar{s}_i - s_i \}$ систему уравнений

$$\varepsilon_0 = \Delta\gamma,\ \varepsilon_1 = 0, \tag{4.5}$$

$$h_i\, \varepsilon_{i-1} + 2(h_i + h_{i+1})\, \varepsilon_i + h_{i+1}\, \varepsilon_{i+1} = 0, \qquad i = 1, 2, \dots , N-1. \tag{4.6}$$

Проанализируем эту систему, предположив для простоты, что узлы x_i являются равноотстоящими, а, значит, что величины h_i не зависят от i: $h_i = h$. Система (4.5), (4.6) примет при этом вид

$$\varepsilon_0 = \Delta\gamma,\ \varepsilon_1 = 0, \tag{4.7}$$

$$\varepsilon_{i-1} + 4\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1} = 0\ , \quad i = 1, 2, \dots , N-1. \tag{4.8}$$

Сначала выпишем решение подсистемы (4.8).

Будем искать его в виде

$$\varepsilon_i = q^i, \quad i = 0, 1, \dots , N, \tag{4.9}$$

где q – параметр, подлежащий определению. Подстановка (4.9) в (4.8) и сокращение на q^{i-1} дают для нахождения q уравнение

$$1 + 4q + q^2 = 0. \tag{4.10}$$

Уравнение (4.10) имеет два различных корня

$$q_1 = -2 + \sqrt{3} \quad , \quad q_2 = -2 - \sqrt{3}, \tag{4.11}$$

соответственно получаем два различных решения подсистемы (4.8)

$$\left\{(q_1)^i\right\}_{i=0}^{N} \quad , \quad \left\{(q_2)^i\right\}_{i=0}^{N} \ .$$

А так как система (4.8) – линейная и однородная, ей удовлетворяет и любая линейная комбинация этих решений

$$C_1\left\{(q_1)^i\right\} + C_2\left\{(q_2)^i\right\} = \left\{C_1\,(q_1)^i + C_2\,(q_2)^i\right\}$$

с независящими от i константами C_1, C_2, т.е. любой набор чисел вида

$$\varepsilon_i = C_1 q_1^{\,i} + C_2 q_2^{\,i} \quad , \quad i = 0, 1, ... , N \tag{4.12}$$

(здесь и далее скобки в обозначении $(q_1)^i$, $(q_2)^i$ i-тых степеней чисел q_1, q_2 опускаем).

Фигурирующие в формуле (4.12) константы C_1, C_2 ищем из начальных условий (4.7). Подстановка туда величин $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ даёт

$$C_1 + C_2 = \Delta\gamma \ , \quad C_1 q_1 + C_2 q_2 = 0,$$

откуда для этих констант получаем значения

$$C_1 = \frac{q_2}{q_2 - q_1}\Delta\gamma, \qquad C_2 = \frac{q_1}{q_1 - q_2}\Delta\gamma. \tag{4.13}$$

Итак, в силу (4.3) решение системы (4.7), (4.8) имеет вид

$$\varepsilon_i = \left(\frac{q_2}{q_2 - q_1} q_1^{\,i} + \frac{q_1}{q_1 - q_2} q_2^{\,i} \right) \Delta\gamma \ , \qquad i = 0, 1, \ldots, N,$$

(4.14)

где q_1, q_2 - вещественные числа, заданные формулами (4.11).

Оценим величину ε_i при $i = N = 100$. Согласно (4.11), (4.14) имеем

$$\varepsilon_{100} = \left[\frac{-2-\sqrt{3}}{-2\sqrt{3}} \left(-2+\sqrt{3}\right)^{100} + \frac{-2+\sqrt{3}}{2\sqrt{3}} \left(-2-\sqrt{3}\right)^{100} \right] \Delta\gamma.$$

Первое слагаемое в квадратных скобках пренебрежимо мало: его модуль равен примерно $6{,}9 \cdot 10^{-57}$, в то время как модуль второго примерно равен $1{,}2 \cdot 10^{56}$. Такой порядок модулей объясняется тем, что в качестве множителей в этих слагаемых фигурируют сотые степени чисел q_1, q_2 с модулем, существенно меньшим ($|q_1| \cong 0{,}268$) и существенно большим ($|q_2| \cong 3{,}732$) единицы.

Итак, отношение

$$\frac{|\Delta s_N|}{|\Delta\gamma|} > 10^{56}$$

абсолютной величины приращения решения $\Delta s_N = \varepsilon_N$ к абсолютной величине приращения правой части $\Delta\gamma$ чрезвычайно велико, причём из формулы (4.14) ясно, что с ростом N это отношение будет быстро увеличиваться. А это и говорит о том, что задача построения интерполяционного кубического сплайна в том случае, когда дополнительные условия – начальные, поставлена некорректно.

На практике эта некорректность проявляется, прежде всего, в высокой чувствительности алгоритма к вычислительным погрешностям: допущенная на некотором шаге алгоритма погрешность округления (например, при вводе значения γ в память компьютера) распространяется на последующие шаги алгоритма с многократным усилением и при большом N способна полностью исказить решение. Но дело не только в этом. Некорректность математической постановки в задаче приближения функций с абстрактной точки зрения соответствует тому, что норма оператора, сопоставляющего исходной функции f приближающую функцию (в нашем случае – интерполяционный кубический сплайн) при больших значениях параметра задачи (в нашем случае – параметра N) весьма велика. А это значит, что норма приближающей функции в пространстве $C[a, b]$ может быть намного большей, чем норма приближаемой функции, а в этом случае говорить о близости приближающей функции к приближаемой не приходится.

Чтобы убедиться в обоснованности этого суждения, рекомендуется выполнить задание 4, сформулированное в конце настоящей главы.

В заключение следует обратить внимание читателя на новый математический объект, с которым мы встретились в данном параграфе.

Если считать ε_i значением функции целочисленного переменного в точке i , то на (4.8) можно смотреть как на уравнение, связывающее значения этой функции в соседних точках i-1, i, i+1. Уравнения такого типа называют *уравнениями в конечных разностях.*

Существует глубокая аналогия между уравнениями в конечных разностях и обыкновенными дифференциальными уравнениями.

В частности, аналогом общего линейного однородного уравнения в конечных разностях с постоянными коэффициентами

$$d\cdot\varepsilon_{i-1} + r\cdot\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1} = 0,$$

частным случаем которого является уравнение (4.8), служит линейное однородное дифференциальное уравнение 2-го порядка с постоянными коэффициентами

$$d\cdot\varepsilon(x) + r\cdot\varepsilon'(x) + \varepsilon''(x) = 0. \qquad (4.15)$$

Аналогом решений вида (4.9) в дифференциальном случае служат решения вида

$$\varepsilon(x) = e^{\lambda x}.$$

Если подставить эту экспоненту в уравнение (4.15) и затем сократить на нее получившееся равенство, то получим аналогичное (4.10) уравнение для нахождения параметра λ:

$$d + r\lambda + \lambda^2 = 0.$$

При этом в случае, когда последнее уравнение имеет различные корни λ_1, λ_2, общее решение дифференциального уравнения (4.15) ищут как линейную комбинацию

$$C_1 e^{\lambda_1 x} + C_2 e^{\lambda_2 x},$$

аналогичную линейной комбинации (4.12), и т.п.

Подробнее указанная аналогия описана в [1].

§ 5. Метод прогонки решения трёхдиагональных систем

Системы (3.18), (3.24) для нахождения параметров s_i кубического сплайна с краевыми условиями указанных в пункте § 3 типов есть системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, то есть с матрицей, все ненулевые элементы которой расположены на главной диагонали и двух с ней смежных. В общем случае такая система имеет вид:

$$\begin{aligned}
&a_{00}s_0 + a_{01}s_1 = \kappa_0\\
&a_{10}s_0 + a_{11}s_1 + a_{12}s_2 = \kappa_1\\
&\qquad a_{21}s_1 + a_{22}s_2 + a_{23}s_3 = \kappa_2\\
&\qquad\qquad . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; . \; .\\
&\qquad\qquad a_{N-1\,N-2}s_{N-2} + a_{N-1\,N-1}s_{N-1} + a_{N-1\,N}s_N = \kappa_{N-1}\\
&\qquad\qquad\qquad a_{N\,N-1}s_{N-1} + a_{N\,N}s_N = \kappa_N .
\end{aligned} \tag{5.1}$$

Чтобы понять структуру матрицы такой системы, следует обратить внимание на приведенный ниже рисунок, где изображены верхний правый и нижний левый углы матрицы.

$$\begin{bmatrix}
a_{00} & a_{01} & 0 & 0 & & a_{N-2\,N-3} & a_{N-2\,N-2} & a_{N-2\,N-1} & 0\\
a_{10} & a_{11} & a_{12} & 0 & & 0 & a_{N-1\,N-2} & a_{N-1\,N-1} & a_{N-1\,N}\\
0 & a_{21} & a_{22} & a_{23} & & 0 & 0 & a_{N\,N-1} & a_{N\,N}
\end{bmatrix}$$

Для решения таких систем имеется экономичный с точки зрения числа требуемых арифметических операций и устойчивый к ошибкам округлений при выполнении этих операций метод, который называется *методом прогонки.*

С абстрактной точки зрения метод прогонки можно рассматривать как вариант метода последовательного исключения неизвестных с нормировкой опорных уравнений применительно к системам с трехдиагональной матрицей. Как и общий метод последовательного исключения неизвестных, он имеет прямой и обратный ход, которые называются соответственно *прямой и обратной прогонкой.*

Опишем этот метод, используя для системы (5.1) с трехдиагональной матрицей более простую запись:

$$d_0s_0+e_0s_1=\kappa_0,\ \ c_is_{i-1}+d_is_i+e_is_{i+1} = \kappa_i\ ,\ \ i =1,\ 2,\ \dots\ ,\ N\text{-}1,\ \ c_Ns_{i-1}+d_Ns_N = \kappa_N. \qquad (5.2)$$

Цель первого этапа метода последовательного исключения неизвестных состоит, как известно, в преобразовании этой системы к системе с верхней треугольной матрицей. Укажем, с помощью каких операций над уравнениями это делается.

Именно, если разделить уравнение

$$d_0s_0+e_0s_1=\kappa_0$$

системы (5.2) с номером *0* (ввиду специфики задачи нумерацию неизвестных и уравнений естественно начинать с нуля, а не с единицы, как принято в линейной алгебре), то оно примет вид

$$s_0+\frac{e_0}{d_0}s_1=\frac{\kappa_0}{d_0},$$

а значит, окажется уравнением вида

$$s_0+L_1s_1=M_1, \qquad (5.3)$$

с параметрами L_1, M_1, которые задаются формулами

$$L_1 = \frac{e_0}{d_0} \quad , \qquad\qquad M_1 = \frac{\kappa_0}{d_0}.$$

(5.4)

Далее, выражаем из равенства (5.3) неизвестное s_0 через неизвестное s_1 и подставляем это выражение

$$s_0 = - L_1 s_1 + M_1$$

в уравнение системы (5.2) с номером 1, то есть в уравнение

$$c_1 s_0 + d_1 s_1 + e_1 s_2 = \kappa_1. \tag{5.5}$$

В результате такой подстановки и последующего приведения подобных при s_1 уравнение (5.5) примет форму:

$$(d_1 - c_1 L_1) s_1 + e_1 s_2 = \kappa_1 - c_1 M_1).$$

После деления этого соотношения на коэффициент при s_1 придем к уравнению вида

$$s_1 + L_2 s_2 = M_2 \tag{5.6}$$

с параметрами L_2, M_2, которые задаются формулами

$$L_2 = \frac{e_1}{d_1 - c_1 L_1}, \quad M_2 = \frac{\kappa_1 - c_1 M_1}{d_1 - c_1 L_1}. \tag{5.7}$$

Далее проводим аналогичное преобразование уравнения системы (5.2) с номером 2, то есть уравнения

$$c_2 s_1 + d_2 s_2 + e_2 s_3 = \kappa_2. \tag{5.8}$$

С этой целью выражаем из уравнения (5.6) неизвестное s_1 через s_2, подставляем это выражение для s_1 в уравнение (5.8), приводим в полученном уравнении подобные члены, содержащие s_2, и производим деление на получившийся коэффициент при s_2. В результате приходим к уравнению вида

$$s_2 + L_3 s_3 = M_3 \tag{5.9}$$

с параметрами L_3, M_3, выражающимися через предыдущую пару параметров L_2, M_2 согласно формулам

$$L_3 = \frac{e_2}{d_2 - c_2 L_2}, \quad M_3 = \frac{\kappa_2 - c_2 M_2}{d_2 - c_2 L_2}. \tag{5.10}$$

Обозревая полученные формулы (5.3) – (5.4), (5.6) – (5.7) и (5.9) – (5.10), приходим к гипотезе о том, решение системы (5.2) удовлетворяет системе уравнений

$$s_i + L_{i+1} s_{i+1} = M_{i+1}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, N\text{-}1, \tag{5.11}$$

с параметрами L_1, M_1, которые находятся по формулам

$$L_1 = \frac{e_0}{d_0} \quad , \qquad M_1 = \frac{\kappa_0}{d_0}. \tag{5.12}$$

и парами $(L_i,\ M_i)$ остальных параметров, которые определяются друг за другом с помощью рекуррентных соотношений

$$L_{i+1} = \frac{e_i}{d_i - c_i L_i} \quad , \qquad M_{i+1} = \frac{\kappa_i - c_i M_i}{d_i - c_i L_i} \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1. \tag{5.13}$$

Доказательство справедливости этой гипотезы проводится методом математической индукции.

Обозначаем параметр индукции через r.

Утверждение $P(r)$, справедливость которого для всех $r = 2, 3, \ldots, N$ мы хотим доказать с помощью принципа математической индукции, состоит в том, что решение $\{s_j\}$ исходной системы уравнений (5.2) удовлетворяет системе уравнений

$$s_i + L_{i+1} s_{i+1} = M_{i+1}, \qquad i = 0, 1, \ldots, r-1 \tag{5.14}$$

с параметрами L_1, M_1, которые находятся по формулам

$$L_1 = \frac{e_0}{d_0} \quad , \qquad M_1 = \frac{\kappa_0}{d_0}, \tag{5.15}$$

и парами (L_i, M_i) остальных параметров, которые определяются друг за другом с помощью рекуррентных соотношений

$$L_{i+1} = \frac{e_i}{d_i - c_i L_i}, \qquad M_{i+1} = \frac{\kappa_i - c_i M_i}{d_i - c_i L_i} \quad , \qquad i = 1, 2, ..., r-1. \tag{5.16}$$

Ранее было доказано (см. формулы (5.3), (5.4), (5.6), (5.7)) утверждение о том, что решение $\{s_j\}$ исходной системы (5.2) удовлетворяет системе уравнений

$$s_i + L_{i+1}\, s_{i+1} = M_{i+1}, \qquad i = 0, 1 \tag{5.17}$$

с параметрами L_1, M_1, заданными равенствами

$$L_1 = \frac{e_0}{d_0} \quad , \qquad M_1 = \frac{\kappa_0}{d_0}, \tag{5.18}$$

и параметрами L_2, M_2, выражающимися через предшествующие параметры L_1, M_1 согласно формулам

$$L_2 = \frac{e_1}{d_1 - c_1 L_1}, \quad M_2 = \frac{\kappa_1 - c_1 M_1}{d_1 - c_1 L_1}. \tag{5.19}$$

Легко видеть, что равенства (5.17), (5.18), (5.19) в точности совпадают с равенствами (5.14), (5,15), (5.16) при $r=2$; следовательно, мы доказали, что решение системы (5.2) удовлетворяет соотношениям (5.14) – (5.16) при указанном значении r, то есть доказали справедливость утверждения $P(2)$.

Проведем теперь индукционный переход.

Именно, предположим, что решение системы (5.2) удовлетворяет системе уравнений

$$s_i + L_{i+1} s_{i+1} = M_{i+1}, \qquad i = 0, 1, \ldots, r-1 \tag{5.20}$$

с параметрами

$$L_1 = \frac{e_0}{d_0}, \qquad M_1 = \frac{\kappa_0}{d_0} \tag{5.21}$$

в уравнении системы (5.20), отвечающем $i=0$, и с параметрами L_{i+1}, M_{i+1} в остальных уравнениях системы (5.20), которые вычисляются последовательно друг за другом с помощью рекуррентных соотношений

$$L_{i+1} = \frac{e_i}{d_i - c_i L_i}, \qquad M_{i+1} = \frac{\kappa_i - c_i M_i}{d_i - c_i L_i}, \qquad i = 1, 2, \ldots, r-1, \tag{5.22}$$

и докажем, что тогда это решение удовлетворяет и системе уравнений

$$s_i + L_{i+1} s_{i+1} = M_{i+1}, \qquad i = 0, 1, \ldots, r \tag{5.23}$$

того же вида, что и уравнения (5.20), но с дополнительным уравнением при $i=r$, и с параметрами, которые определяются формулами (5.21), (5.22) и дополнительными формулами

$$L_{r+1} = \frac{e_r}{d_r - c_r L_r}, \qquad M_{r+1} = \frac{\kappa_r - c_r M_r}{d_r - c_r L_r}. \tag{5.24}$$

В самом деле, по предположению индукции решение исходной системы уравнений (5.2) удовлетворяет системе уравнений (5.20), а значит, удовлетворяет и последнему уравнению этой системы, то есть уравнению

$$s_{r-1} + L_r s_r = M_r.$$

Выражая отсюда s_{r-1} через s_r, приходим к уравнению

$$s_{r-1} = - L_r s_r + M_r. \tag{5.25}$$

С другой стороны, поскольку компоненты s_i решения системы (5.2) удовлетворяют уравнению системы (5.2) с $i=r$, то есть уравнению

$$c_r s_{r-1} + d_r s_r + e_r s_{r+1} = \kappa_r,$$

подстановка в это уравнение вместо s_{r-1} правой части равенства (5.25) даст уравнение, связывающее значения неизвестных s_r, s_{r+1}, а именно уравнение

$$c_r(-L_r s_r + M_r) + d_r s_r + e_r s_{r+1} = \kappa_r.$$

Приведение здесь подобных при s_r и деление на получившийся при этом неизвестном коэффициент дадут уравнение системы (5.23) с $i=r$ с параметрами L_{r+1}, M_{r+1}, которые задаются формулами (5.24).

Таким образом, показано, что утверждение $P(2)$ справедливо и что справедливость утверждения $P(r)$ влечет за собой и справедливость утверждения $P(r+1)$, а тогда в силу принципа математической индукции все утверждения $P(r)$ с $r = 2, 3, \ldots, N$ справедливы, а значит, справедливо и утверждение $P(N)$. Справедливость же последнего утверждения как раз и означает, что решение системы (5.2) удовлетворяет системе уравнений (5.11) с параметрами, которые задаются формулами (5.12), (5.13).

Остается добавить к указанной системе (5.11) последнее уравнение. Для этого выражаем из уравнения системы (5.11) с $i=N-1$ величину s_{N-1} через s_N, подставляем это выражение в последнее уравнение системы (5.2),

приводим подобные при s_N и делим получившееся равенство на коэффициент при s_N. Тогда получим уравнение

$$s_N = \frac{\kappa_N - c_N M_N}{d_N - c_N L_N}, \tag{5.26}$$

которое и следует добавить к системе (5.11).

Мы описали прямой ход метода – *прямую прогонку*. На практике прямая прогонка состоит из вычисления по формулам (5.12), (5.13) параметров L_i, M_i (они называются *прогоночными коэффициентами*) и вычисления правой части уравнения (5.26). После того, как это сделано переходят к следующему этапу метода – к *обратной прогонке*. На этом этапе находим неизвестные $s_{N-1}, s_{N-2}, \dots, s_1, s_0$ в порядке убывания их номеров из переписанных в виде

$$s_i = -L_{i+1} s_{i+1} + M_{i+1} \quad , \qquad i = N-1, N-2, \dots, 1, 0 \tag{5.27}$$

уравнений (5.11), подставляя при $i = N-1$ вместо s_N его значение согласно формуле (5.26).

Замечание 5.1. Описанный нами метод решения системы (5.2) с трехдиагональной матрицей, который мы, следуя традиции, назвали методом прогонки, может быть реализован лишь в том случае, когда окажутся отличными от нуля все знаменатели формул (5.12), (5.13), (5.26). В учебнике [2] указано достаточное условие на коэффициенты уравнений (5.2), обеспечивающее отличие от нуля всех этих знаменателей, то есть указано достаточное условие теоретической реализуемости метода. В случае задачи построения кубического сплайна с краевыми условиями первого и второго типов, то есть в случае системы (3.24) с дополнительными уравнениями (3.20) или (3.26), это условие выполнено, так что для применения метода прогонки для решения таких систем нет теоретических препятствий.

Замечание 5.2. Изложенный метод решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональной матрицей – метод прогонки – обладает высокой степенью эффективности как с точки зрения требуемой оперативной памяти ЭВМ, так и с точки зрения необходимого числа арифметических операций. С точки зрения объёма оперативной памяти его эффективность объясняется тем, что при вычислениях по формулам (5.12), (5.13), (5.26), (5.27) обрабатывать приходится массив с числом элементов порядка $O(N)$, а не массив с числом элементов порядка $O(N^2)$, как в случае произвольной квадратной системы из $N+1$ уравнений. С точки же зрения числа арифметических операций эффективность метода прогонки очень высока, поскольку вычисления по только что упомянутым формулам требуют порядка $O(N)$ арифметических операций, а не порядка $O(N^3)$ арифметических операций, как при решении системы из $N+1$ уравнений методом Гаусса.

По указанным только что причинам метод прогонки позволяет весьма быстро решать трёхдиагональные системы с большим числом неизвестных.

Замечание 5.3. При практических вычислениях одной только теоретической реализуемости метода недостаточно. Нужно, чтобы используемый алгоритм обладал численной устойчивостью относительно вычислительных погрешностей, то есть погрешностей ввода начальных данных и погрешностей округлений при выполнении арифметических операций. Исследование численной устойчивости метода прогонки проведено, например, в учебном пособии [3].

§ 6. Пример численного алгоритма

Выпишем систему уравнений

$$s_{i-1} + 4s_i + s_{i+1} = \kappa_i \quad , \qquad i = 1,2,\dots,N-1, \tag{6.1}$$

$$s_0 = \varphi \quad , \qquad s_N = \psi . \tag{6.2}$$

Такую задачу при κ_i, заданных формулой (3.25), приходится решать при построения интерполяционного кубического сплайна с равноотстоящими узлами и краевыми условиями первого типа.

Рассмотрим следующий алгоритм решения системы (6.1)-(6.2).

1. Находим решение $s^* = \{s_i^*\}$ системы (6.1), удовлетворяющее начальным условиям

$$s_0^* = \varphi \quad , \qquad s_1^* = 0; \tag{6.3}$$

значения s_i^* этого решения для $i = 2, 3, \ldots , N$ вычисляются по рекуррентной формуле

$$s_{i+1}^* = \kappa_i - 4s_i^* - s_{i-1}^* \quad , \qquad i = 1,2,\ldots,N-1. \tag{6.4}$$

2. Находим решение s^{**} однородной ($\kappa_i \equiv 0$) системы (6.1), удовлетворяющее начальным условиям

$$s_0^{**} = 0 \quad , \qquad s_1^{**} = 1; \tag{6.5}$$

значения s_i^{**} этого решения для $i = 2, 3, \ldots , N$ вычисляются по рекуррентной формуле

$$s_{i+1}^{**} = -4s_i^{**} - s_{i-1}^{**} \quad , \qquad i = 1,2,\ldots,N-1. \tag{6.6}$$

3. Рассматриваем линейную комбинацию этих решений вида

$$s = s^* + Cs^{**}, \tag{6.7}$$

которая в силу первых из равенств (6.3), (6.5) при любом C удовлетворяет краевому условию на левом конце отрезка, и подбираем константу C так, чтобы удовлетворялось и условие на правом конце:

$$s_N^* + C s_N^{**} = \psi.$$

4. Подставляем в (6.7) найденное отсюда значение C, а именно, значение

$$C = \frac{\psi - s_N^*}{s_N^{**}}, \tag{6.8}$$

и получаем набор значений неизвестных

$$s_i = s_i^* + \frac{\psi - s_N^*}{s_N^{**}} s_i^{**} \quad , \qquad i = 0, 1, \ldots, N. \tag{6.9}$$

Заметим, что решение (6.9) по построению удовлетворяет краевым условиям (6.2). Чтобы убедиться в том, что это решение удовлетворяет и уравнениям (6.1), достаточно переписать рекуррентные соотношения (6.4), (6.6) в виде

$$\begin{aligned} s_{i-1}^* + 4 s_i^* + s_{i+1}^* &= \kappa_i \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1, \\ s_{i-1}^{**} + 4 s_i^{**} + s_{i+1}^{**} &= 0 \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1, \end{aligned}$$

умножить второе из этих соотношений на C и сложить с первым соотношением. Тогда получим соотношения

$$(s_{i-1}^* + C s_{i-1}^{**}) + 4 (s_i^* + C s_i^{**}) + (s_{i+1}^* + C s_{i+1}^{**}) = \kappa_i \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1 \ ,$$

которые в силу (6.7) представляют собой равенства (6.1)

$$s_{i-1} + 4s_i + s_{i+1} = \kappa_i \quad , \qquad i = 1,2,\dots,N-1.$$

Следовательно, формула (6.9), если отвлечься от неизбежных погрешностей округления при вычислениях по формулам (6.4), (6.6), (6.8), (6.9), действительно даёт решение поставленной задачи (6.1) - (6.2). При этом с точки зрения объёма требуемой оперативной памяти ЭВМ и числа требуемых арифметических операций рассматриваемый алгоритм вполне аналогичен методу прогонки.

Читателю рекомендуется выполнить задание 5, чтобы провести сравнение описанного алгоритма с методом прогонки.

Упражнения и задания к главе 4

Упражнение 1. Построить сплайн порядка 1 степени 2, принимающий в узлах $x_0 = -1,\ x_1 = 0,\ x_2 = 1$ соответственно значения $0,\ 0{,}5,\ 0$ и имеющий в точке x_0 касательную, составляющую с осью ox угол $45°$.

Указание. Составить и решить систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов $a_j^{(i)}$, $j = 0,1,2$, $i = 1,2$ локальных представлений сплайна

$$\varphi_1(x) = a_0^{(1)} + a_1^{(1)}x + a_2^{(1)}x^2 \quad , \qquad x_0 \le x \le x_1,$$

$$\varphi_2(x) = a_0^{(2)} + a_1^{(2)}x + a_2^{(2)}x^2 \quad , \qquad x_1 \le x \le x_2.$$

Упражнение 2. Рассматривается естественный кубический сплайн, принимающий в узлах $x_0 = -1,\ x_1 = 0,\ x_2 = 1$ значения f_{-1}, f_0, f_1 .

Выразить значение сплайна в точке $x \in [-1,1]$ как функцию переменных f_{1}, f_{0}, f_{1}.

Упражнение 3. Рассматривается кубический сплайн с параболическими концевыми отрезками, принимающий в узлах $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $x_3 = 2$ значения f_{-2}, f_{-1}, f_{1}, f_{2}. Выразить значение сплайна в точке $x \in [-2, 2]$ как функцию f_{-2}, f_{-1}, f_{1}, f_{2}.

Задание 4. Составить программу приближения функции интерполяционным кубическим сплайном с начальными условиями и равноотстоящими узлами. Предусмотреть возможность одновременного вывода на экран графиков приближаемой функции и приближающего её сплайна. Для отладки программы в качестве приближаемой функции взять функцию Рунге

$$f(x) = \frac{1}{1+25x^2}, \qquad -1 \le x \le 1,$$

выбрав в качестве s_0, s_1 вторые производные этой функции в узлах x_0, x_1. Исследовать визуально на примере этой функции поведение сплайна при увеличении числа частичных отрезков разбиения N.

Задание 5. Составить программу приближения функции интерполяционным кубическим сплайном с равноотстоящими узлами и краевыми условиями первого типа, используя в качестве алгоритмов решения систем:

а) метод прогонки ;

б) алгоритм, описанный в § 6.

Применительно к функции Рунге исследовать визуально поведение сплайна при увеличении N в случаях а) и б), принимая в качестве s_0, s_N вторые производные функции Рунге в точках x_0, x_N.

Задание 6. Модифицировать предшествующую программу применительно к сплайнам с параболическими концевыми отрезками и с жёстко заделанными концами с использованием для решения линейных систем метода прогонки.

Литература к главе 4

1. Волков Е.А. Численные методы : учеб. пособие / Е.А. Волков. – Спб. : Лань, 2004. – 256 с.
2. Бахвалов Н.С. Численные методы : учеб. пособие / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – М. : Физматлит, 2002. – 630 с.
3. Гудович Н.Н. Избранные вопросы курса численных методов. Интерполяция кубическими сплайнами : учебное пособие / Н.Н. Гудович. – Воронеж. : Лаборатория оперативной полиграфии ВГУ, 2002. – Вып. 3. – 36 с.

Содержание

Учебное издание

Гудович Анастасия Николаевна,

Гудович Николай Николаевич

КРАТКИЙ КУРС ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Выпуск 1

Приближение функций

алгебраическими многочленами

Учебное пособие

Издано в авторской редакции

Подписано в печать 06.12.2017. Формат 60×84/16
Уч.-изд. л. 6,7. Усл. печ. л. 8,2. Тираж 50 экз. Заказ 740

Издательский дом ВГУ
394018 Воронеж, пл. им. Ленина, 10

Отпечатано с готового оригинал-макета
в типографии Издательского дома ВГУ
394018 Воронеж, ул. Пушкинская, 3