Политех Петра Великого, 2 курс, осень 2022/23

Подготовка к экзамену по вычислительной математике

Лектор: Устинов Сергей Михайлович

Содержание

Вопрос 1. Конечные разности и их свойства. Таблица конечных разностей.

1.1 Конечные разности и их свойства.

Definition 1: Конечная разность

Пусть значения некоторой функции $f(x)$ известны лишь для дискретного множества значений независимой переменной $x \in \{x_0 \dots x_m\}$. Выражение

$$\Delta_h f(x_k) = f(x_k + h) - f(x_k) = f(x_0 + (k+1)h) - f(x_0 + kh) \tag{1}$$

называют *конечной разностью* (*разностным оператором*) первого порядка.

Поскольку величины x_0 и h постоянны для рассматриваемого множества, целесообразно, не умаляя общности, перейти к новой переменной $k = \frac{x_k - x_0}{h}$, которая принимает целые значения $0 \dots m-1$. Тогда функция $f(x)$ становится функцией целочесленной переменной $f(k)$, и можно будет опустить индекс $h = const$.

$$\Delta f(k) = \Delta f_k = f(k+1) - f(k) = f_{k+1} - f_k$$

Теперь обратимся к некоторым свойствам конечных разностейб отмечая тесную связь между ними и свойствами производных, что является основой большинства конечноразностных выражений.

1. $\alpha = const \Rightarrow \Delta\alpha = 0$

$$\alpha = const \Rightarrow \forall k \quad f(k+1) - f(k) = \alpha - \alpha = 0$$

2. $\Delta(\alpha f(k)) = \alpha \Delta f(k)$
3. $\Delta(f(k) \pm g(k)) = \Delta f(k) \pm \Delta g(k)$
4. $\Delta(f(k) \cdot g(k)) = \Delta f(k) \cdot g(k+1) + f(k)\Delta g(k)$

$$\begin{gathered}\Delta(f(k) \cdot g(k)) = f(k+1)g(k+1) - f(k)g(k) = \\ f(k+1)g(k+1) - f(k)g(k) + f(k)g(k+1) - f(k)g(k+1) = \\ \Delta f(k) \cdot g(k+1) + f(k)\Delta g(k)\end{gathered}$$

Заметим, что аналогичными преобразованиями можно было получить и другой вид, в котором функции идут в другом порядке:

$$\Delta(f(k) \cdot g(k)) = \Delta g(k) \cdot f(k+1) + g(k)\Delta f(k)$$

5. Конечная разность от полинома степени s равна полиному степени $s-1$.

$$\Delta k^s = (k+1)^s - k^s = sk^{s-1} + \frac{s(s-1)}{2}k^{s-2} + \dots$$

6. Конечная разность высокого порядка.
Подобно дифференциалам и производным высокого порядка, соответствующие конечные разности строятся на основе рекуррентных соотношений. Так конечная разность порядка $s+1$ строится следующим образом:
$$\Delta^{s+1} f_k = \Delta\left(\Delta^s f_k\right) = \Delta^s f_{k+1} - \Delta^s f_k$$
По индукции можно доказать следующее утверждение:

Theorem 1: О конечных разностях высокого порядка

$$\Delta^s f_k = \sum_{i=0}^{s} (-1)^i C_s^i f_{k+s-i} \tag{2}$$

1.2 Таблица конечных разностей.

Аналогично тому, как в непрерывном случае строилась таблица производных, рассмотрим конечные разности для наиболее популярных функций.

1. $\Delta a^k = a^{k+1} - a^k = a^k(a-1)$
Заметим, что число 2 в условиях конечных разностей играет роль, схожую с экспонентой в непрерывном случае: $(e^x)' = e^x$.
2. $\Delta \sin(k) = \sin(k+1) - \sin(k) = 2\sin\left(\frac{1}{2}\right)\cos\left(k+\frac{1}{2}\right)$
3. $\Delta \cos(k) = \cos(k+1) - \cos(k) = -2\sin\left(\frac{1}{2}\right)\sin\left(k+\frac{1}{2}\right)$
4. $\Delta \log(k) = \log(k+1) - \log(k) = \log\left(1+\frac{1}{k}\right)$

Вопрос 2. Суммирование функций. Формула Абеля суммирования по частям.

2.1 Суммирование функций.

Обратимся к уравнению
$$\Delta F(k) = \varphi(k) \tag{3}$$
До сих пор мы занимались прямой задачей: по заданной функции $F(k)$ необходимо определить функцию $\varphi(k)$. Теперь обратимся к обратной задаче: по заданной функции $\varphi(k)$ необходимо восстановить функцию $F(k)$. Ситуация подобно нахождению функции по ее производной в непрерывных терминах. В этом случае появляется возможность ее решения при помощи интеграла
$$\int_a^b h(x)dx = \int_a^b f'(x)dx = f(b) - f(a)$$

Аналогично, решение обратной задачи (3) позволяет, в свою очередь, успешно решать задачу суммирования функции $\varphi(k)$. Запишем уравнение (3) последовательно для $k = m, m+1, \ldots, N-1$ и результаты просуммируем.

$$\begin{aligned}
&F(m+1) - F(m) = \varphi(m) \\
&F(m+2) - F(m+1) = \varphi(m+1) \\
&F(m+3) - F(m+2) = \varphi(m+2) \\
&\ldots \\
&F(N) - F(N-1) = \varphi(N-1) \\
&F(N) - F(m) = \sum_{k=m}^{N-1} \varphi(k)
\end{aligned}$$

Иными словами

$$\sum_{k=m}^{N-1} \varphi(k) = \sum_{k=m}^{N-1} \Delta F(k) = F(N) - F(m) \tag{4}$$

Выражение (4) является дискретным аналогом формулы Ньютона-Лейбница. В дополнение следует заметить, что она выводилась в предположении, что $N > m$.

Рассмотрим некоторые примеры суммирования функций. Результаты отдаленно напоминают таблицу интегралов для непрерывных функций, а оператор суммы сопоставляется определенному интегралу:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \leftrightarrow \int_0^N$$

1. Найти $\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1} a^k$

   Функция $F(k)$, удовлетворяющая условию $\Delta F(k) = a^k$ легко находится из таблицы конечных разностей: $F(k) = \dfrac{a^k}{a-1}$. Тогда

   $$\sum_{k=0}^{N-1} a^k = \frac{\left(a^N - 1\right)}{a-1} - \frac{a^0 - 1}{a-1} = \frac{1 - a^N}{1 - a}$$

2. Найти $\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(k + \frac{1}{2}\right)$

   Аналогичным образом найдем функцию из таблицы конечных разностей.

   $$\sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(k + \frac{1}{2}\right) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\sin(k)}{2\sin\left(\frac{1}{2}\right)} = \frac{\sin(N)}{2\sin\left(\frac{1}{2}\right)}$$

3. Найти $\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1} k^2$

Воспользуемся свойством №5 конечных разностей: полином степени 2 является конечной разностью полинома степени 3. Рассмотрим

$$\begin{aligned}
&\Delta k^3 = (k+1)^3 - k^3 = 3k^2 + 3k + 1\\
&\Delta k^2 = (k+1)^2 - k^2 = 2k + 1\\
&\Delta k = (k+1) - k = 1
\end{aligned}$$

Используя также свойства №1 и 2, получаем

$$\Delta\left(\frac{k^3}{3} - \frac{k^2}{2} + \frac{k}{6}\right) = \frac{1}{3}\left(3k^2 + 3k + 1\right) - \frac{1}{2}\left(2k+1\right) + \frac{1}{6}\cdot 1 = k^2 + k + \frac{1}{3} - k - \frac{1}{2} + \frac{1}{6} = k^2$$

Получаем

$$\begin{aligned}
&F(k) = \frac{1}{3}k^3 - \frac{1}{2}k^2 + \frac{1}{6}k\\
&\sum_{k=0}^{N} k^2 = \frac{N^3}{3} - \frac{N^2}{2} + \frac{N}{6}
\end{aligned}$$

2.2 Суммирование по частям.

Суммирование по частям вводится как прием, аналогичный интегрированию по частям в непрерывном случае. Для вывода формулы запишем уравнение интегрирования по частям в несколько другом виде. Введем три функции: $u(t), v(t), U(t)$, где $U(t) = \int_0^t u(\tau)d\tau$. Рассмотрим производную выражения $U(t)v(t)$:
$\frac{d}{dt}\left(U(t)v(t)\right) = \frac{dU(t)}{dt}v(t) + U(t)\frac{dv(t)}{dt} = u(t)v(t) + U(t)\frac{dv(t)}{dt}$
Перенесем второе слагаемое из правой части равенства в левую и проинтегрируем

$$\int_a^b u(t)v(t)dt = \int_a^b \frac{d}{dt}\left(U(t)v(t)\right)dt - \int_a^b U(t)\frac{dv(t)}{dt}dt = U(t)v(t)\Big|_{t=a}^{t=b} - \int_a^b U(t)\frac{dv(t)}{dt}dt$$

Теперь обратимся к суммированию. Аналогично введем три функции: $u(k), v(k), U(k)$, где $U(k) = \sum_{i=0}^{k} u(i)$. $\Delta U(k) = U(k+1) - U(k) = u(k+1)$. Воспользуемся ранее полученной формулой конечной разности для произведения:
$\Delta\left(U(k)v(k)\right) = v(k+1)\Delta U(k) + U(k)\Delta v(k) = v(k+1)u(k+1) + U(k)\Delta v(k)$
Перенесем второе слагаемое из правой части равенства в левую и просуммируем обе его части:

Theorem 2: Формула Абеля суммирования по частям

$$\sum_{k=p}^{N} u(k+1)v(k+1) = U(k)v(k)\Big|_{k=p}^{k=N+1} - \sum_{k=p}^{N} U(k)\Delta v(k) \tag{5}$$

Пример: требуется найти $\sum\limits_{k=0}^{N} ka^k$.

Возьмем функции $u(k) = a^{k-1}, v(k) = k - 1$. Тогда

$$U(k) = \sum_{i=0}^{k} a^{k-1} = \frac{1}{a}\frac{a^{k+1}-1}{a-1}$$
$$\Delta v(k) = \Delta k = 1$$

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{N} ka^k &= \frac{1}{a}\frac{a^{N+2}-1}{a-1}\cdot(((N+1)-1)-(0-1)) - \sum_{k=0}^{N}\frac{1}{a}\frac{a^{k+1}-1}{a-1} = \\
&= \frac{(N+1)(a^{N+2}-1)}{a(a-1)} - \frac{1}{a(a-1)}\left(a\sum_{k=0}^{N}a^k - (N+1)\right) = \\
&= \frac{(N+1)(a^{N+2}-1)}{a(a-1)} - \frac{1}{a(a-1)}\left(a\frac{a^{N+1}-1}{a-1} - (N+1)\right) = \\
&= \frac{(a-1)(N+1)(a^{N+2}-1) - a^{N+3} + a^2 + (a-1)(N+1)}{a(a-1)^2} = \\
&= \frac{(a-1)(N+1)a^{N+1} - a^{N+2} + a}{(a-1)^2} = \frac{Na^{N+2} - (N+1)a^{N+1} + a}{(a-1)^2} = \\
&= \frac{a\left(Na^{N+1} - (N+1)a^N + 1\right)}{(a-1)^2}
\end{aligned}$$

Вопрос 3. Разностное уравнение, его порядок.

Линейные разностные уравнения первого порядка и порядка выше первого.

3.1 Разностное уравнение, его порядок.

Первоначально обратимся к дифференциальным уравнениям.

Definition 2: Дифференцильное уравнение

Соотношение

$$F\left(t, z(t), z'(t), \ldots, z^{(s-1)}(t)\right) = 0$$

где t – независимая переменная, функция F задана, функция $z(t)$ – искомая, называется *дифференциальным уравнением порядка* s.

При этом уравнение может быть разрешено относительно старшей производной

$$z^{(s)}(t) = f\left(t, z(t), z'(t), \ldots, z^{(s-1)}(t)\right) \tag{6}$$

Порядок уравнения s, определяемый номером старшей производной, является важной характеристикой уравнения (6). Так он определяет количество начальных условий, необходимых для однозначного решения. Если дифференциальное уравнение является линейным относительно функции $z(t)$ и ее производных, то величина s задает количество линейно независимых решений и т.д.
Рассмотрим разностный аналог дифференциального уравнения

$$F\left(k, f(k), \Delta f(k), \Delta^2 f(k), \ldots, \Delta^s f(k)\right) = 0 \tag{7}$$

где k – независимая целочисленная переменная, функция F задана, функция $f(k)$ – искомая. Казалось бы, логично считать порядок этого уравнения равным s, руководствуясь номером старшей конечной разности, как это было с производными в уравнении (6). Рассмотрим, однако, следующий пример:

$$2\Delta^3 f_k + 3\Delta^2 f_k - f_k = 0, \quad f_k \equiv f(k)$$

Выразим все конечные разности через значения функции в различных точках и получим

$$2(f_{k+3} - 3f_{k+2} + 3f_{k+1} - f_k) + 3(f_{k+2} - 2f_{k+1} + f_k) - f_k = 0,$$
$$2f_{k+3} - 3f_{k+2} = 0$$

Задаваясь только одним начальным условием f_0 вместо ожидаемых трех и последовательно полагая значение $k = -2, -1, 0, 1, \ldots$ шаг за шагом воспроизводим f_k для любого значения k. В этом и есть различие между дифференциальными и разностными уравнениями. Снижение ожидаемого порядка произошло за счет сокращения слагаемых. По этой причине в общем случае для определения порядка разностного уравнения будем выражать все конечные разности через значения функции. Тогда, после всех упрощений порядок разностного уравнения будет определяться разностью между наибольшим и наименьшим значениями аргумента функции $f(k)$. В дальнейшем будем записывать разностные уравнения в следующем виде.

Definition 3: Разностное уравнение

Уравнение вида

$$\Phi\left(k, f(k), f(k+1), \ldots, f(k+s)\right) = 0$$

где k – независимая переменная, функция Φ задана, функция $f(k)$ – искомая, называется *разностным уравнением порядка* $s = (k+s) - k$.

или в виде, разрешенном относительно функции с наибольшим значением аргумента

$$f(k+s) = \Phi_1\left(k, f(k), \ldots, f(k+s-1)\right)$$

Для его решения достаточно последовательно полагать $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$\begin{aligned} f(s) &= \Phi_1\left(0, f(0), \ldots, f(s-1)\right), \\ f(s+1) &= \Phi_1\left(1, f(1), \ldots, f(s)\right), \\ f(s+2) &= \Phi_1\left(2, f(2), \ldots, f(s+1)\right), \\ &\ldots \end{aligned}$$

Такое построение решения называют *пошаговым методом решения разностного уравнения*, который всегда дает решение, когда заданы s начальных условий.

3.2 Линейное разностное уравнение первого порядка

Обратимся к уравнению

$$y(k+1) = \alpha \cdot y(k) + \varphi(k), \quad y(0) = y_0 \tag{8}$$

где α – постоянный коэффициент, $\varphi_k = \varphi(k)$ – заданная функция k, $y_k = y(k)$ – искомая функция. Если $\varphi(k) = 0$, уравнение называется однородным, в противном случае – неоднородным. Начнем решать уравнение (8) пошаговым методом.

$$\begin{aligned}
&y_1 = \alpha \cdot y_0 + \varphi_0, \\
&y_2 = \alpha \cdot y_1 + \varphi_1 = \alpha\,(\alpha \cdot y_0 + \varphi_0) + \varphi_1 = \alpha^2 \cdot y_0 + \alpha \cdot \varphi_0 + \varphi_1, \\
&y_3 = \alpha \cdot y_2 + \varphi_2 = \alpha\left(\alpha^2 \cdot y_0 + \alpha \cdot \varphi_0 + \varphi_1\right) + \varphi_2 = \alpha^3 \cdot y_0 + \alpha^2 \cdot \varphi_0 + \alpha \cdot \varphi_1 + \varphi_2, \\
&\ldots
\end{aligned}$$

По индукции можно доказать, что

$$y_n = \alpha^n \cdot y_0 + \sum_{k=0}^{n-1} \alpha^k \cdot \varphi_{n-1-k}$$

Для важного частного случая, когда $\varphi(k)$ – постоянная функция ($\varphi_k = \beta = const$):

$$y_n = \alpha^n \cdot y_0 + \left(\sum_{k=0}^{n-1} \alpha^k\right) \cdot \beta = \alpha^n \cdot y_0 + \frac{1-\alpha^n}{1-\alpha} \cdot \beta$$

3.3 Линейное разностное уравнение порядка выше первого

Перейдем к уравнению порядка s:

$$y(k+s) + \alpha_1 y(k+s-1) + \alpha_2 y(k+s-2) + \cdots + \alpha_s y(k) = \varphi(k) \tag{9}$$

где α_i – постоянные коэффициенты, $\varphi(k)$ – заданная функция, $y(k)$ – искомая функция.

Рассмотрим некоторые свойства частных и общих решений систем линейных разностных уравнений.

Theorem 3

Пусть $y_1(k), y_2(k), \ldots, y_p(k)$ – частные решения линейного однородного уравнения

$$y(k+s) + \alpha_1 y(k+s-1) + \alpha_2 y(k+s-2) + \cdots + \alpha_s y(k) = 0 \tag{10}$$

то любая их линейная комбинация

$$c_1 y_1(k) + c_2 y_2(k) + \cdots + c_p y_p(k)$$

где c_i – произвольные постоянные, также будет частным решением этого уравнения.

Theorem 4

Если s частных решений однородного уравнения $y_1(k), y_2(k), \dots, y_s(k)$ – линейно независимы, то

$$y(k) = \sum_{i=1}^{s} c_i y_i(k) \tag{11}$$

является общим решением однородного уравнения.

Theorem 5

Общее решение линейного неоднородного уравнения (9) представляется в виде суммы частного его решения $y_{\textit{частн}}(k)$ и общего решения линейного уравнения (11)

$$y(k) = y_{\textit{частн}}(k) + \sum_{i=1}^{s} c_i y_i(k)$$

Решение неоднородного уравнения (9) начинается с решения однородного уравнения (10). Это решение будем искать в виде $u(k) = C\gamma^k$, где $C = const$. Здесь уместно вспомнить, что в дифференцальном уравнении порядка s с постоянными коэффициентами частные решения ищутся в форме $z(t) = C \cdot \exp(\lambda_k t)$. Подставим $u(k) = C\gamma^k$ в уравнение (10) и после сокращения получаем уравнение

$$\gamma^s + \alpha_1 \gamma^{s-1} + \dots + \alpha_s = 0 \tag{12}$$

которое получило название *характеристического уравнения*. Оно, с учетом кратности, имеет s корней, каждому из которых соответствует частное решение.

1. Каждому простому вещественному корню γ_r соответствует частное решение $u_r(k) = c_r \gamma_r^k$, являющееся одним из слагаемых в общем решении.
2. Каждой простой паре комплексно-сопряженных корней $\gamma_{r,r+1} = (\alpha_r \pm i\beta_r)$ соответствуют комплексные частные решения, являющиеся линейно независимыми

   $$u_r(k) = (\alpha_r + i\beta_r)^k, \quad u_{r+1}(k) = (\alpha_r - i\beta_r)^k$$

   или вещественные частные решения

   $$u_r(k) = \rho_r^k \cos(k\varphi_r), \quad u_{r+1}(k) = \rho_r^k \sin(k\varphi_r), \quad \rho_r = \sqrt{\alpha_r^2 + \beta_r^2}, \quad tg(\varphi_r) = \frac{\beta_r}{\alpha_r}$$

   В общем решении им сопоставляются два слагаемых (вещественный вариант)

   $$c_r \rho_r^k \cos(k\varphi_r) + c_{r+1} \rho_r^k \sin(k\varphi_r)$$

3. Если среди корней встречаются кратные, то корню γ_r кратности p соответствуют частные решения

   $$u_r(k) = \gamma_r^k, \quad u_{r+1}(k) = k\gamma_r^k, \dots, u_{r+p-1}(k) = k^{p-1}\gamma_r^k$$

   Решения эти линейно зависимы, и в общем решении им сопоставляются слагаемые

   $$c_r \gamma_r^k + c_{r+1} k \gamma_r^k + \dots + c_{r+p-1} k^{p-1} \gamma_r^k = Q_{p-1}(k)\gamma_r^k$$

   где $Q_{p-1}(k)$ – полином от k степени $p - 1$.

Вопрос 4. Разделенные разности и их связь с конечными разностями.

Для равноотстоящих узлов таблицы конечные разности являются хорошей характеристикой изменения функции, аналогичной производной для непрерывного случая. При произвольном расположении узлов таблицы целесообразно ввести понятие *разделенной разности.*

Definition 4: Разделенная разность

Разделенные разности нулевого порядка совпадают со значениями функции, а разности первого порядка определяются равенством

$$f(x_{n-1}; x_n) = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \tag{13}$$

Аналогично строятся разделенные разности высших порядков. При этом разности k-го порядка определяются через разности $(k-1)$-го порядка по формуле

$$f(x_0; x_1; \dots; x_k) = \frac{f(x_1; x_2; \dots; x_k) - f(x_0; x_1; \dots; x_{k-1})}{x_k - x_0} \tag{14}$$

Подобно конечным разностям, разделенные тоже можно выразить через значения функции в различных точках. По индукции можно доказать следующее равенство:

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k}) = \sum_{j=i}^{i+k} \frac{f(x_j)}{\prod\limits_{j \neq i}(x_j - x_i)} \tag{15}$$

Отсюда следует важное свойство разделенных разностей: они являются симметричными функциями своих аргументов.

$$f(x_n; x_{n-1}) = f(x_{n-1}; x_n)$$

Если в исходной таблице узлы равноотстоящие, то для описания поведения функции можно использовать как конечные разности, так и разделенные. Установим связь между ними. Обобщенную формулу можно доказать по индукции.

$$f(x_i; x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{\Delta f_i}{h} \quad \dots$$

Theorem 6: Связь конечных и разделенных разностей

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k-1}; x_{i+k}) = \frac{\Delta^k f_i}{k!\, h^k} \tag{16}$$

Вопрос 5. Аппроксимация функций. Задача интерполирования.

5.1 Аппроксимация функций.

В данной теме аппроксимация означает *замену одной функциональной зависимости другой*. Поскольку на практике часто возникает потребность дифференцировать, интегрировать или использовать эту функцию в различных расчетах, целесообразно выбирать аппроксимирующую фукнцию, исходя из простоты ее вида. Возможность выбора обосновывается следующей теоремой.

Theorem 7: Теорема Вейерштрасса

Пусть $f(x)$ непрерывна на $[a, b]$. Тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists P_n(x) \quad n = n(\varepsilon) : \quad \max |f(x) - P_n(x)| < \varepsilon$$

Однако, эта теорема лишь гарантирует существование, но не дает гарантии, что такой полином можно построить при помощи практического алгоритма.
Для того, чтобы можно было сравнивать различные варианты аппроксимации, следует ввести критерий близости. Например, максимум модуля отклонения исходной функции $f(x)$ от аппроксимирующей $g(x)$ на заданном промежутке:

$$\delta = \max_{x \in [a,b]} |f(x) - g(x)| \tag{17}$$

или так называемый «среднеквадратичный критерий»

$$\rho^2 = \int_a^b (f(x) - g(x))^2 \, dx \tag{18}$$

В случае если $f(x)$ определена таблично заданным набором точек, может быть использован аналог критерия (18)

$$\rho^2 = \sum_{k=1}^{m} (f(x_k) - g(x_k))^2 \tag{19}$$

Лучшей оказывается аппроксимирующая функция, обладающая наименьшей величиной δ или ρ^2. *Заметим, что* только решаемая задача диктует выбираемый критерий близости, который, в свою очередь, позволяет выбрать лучшую аппроксимацию.

5.2 Постановка задачи интерполирования

Будем приближать исходную функцию, заданную таблично $X = \{x_0, x_1, \ldots, x_m\}$, $F = \{f(x) \,|\, x \in X\}$ обощенным многочленом

$$Q_m(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k\varphi_k(x) \tag{20}$$

где $\{\varphi_k\}$ – заданный набор линейно независимых функций, а коэффициенты a_i подлежат определению. В качестве критерия близости выбирается совпадение значений $f(x)$ и $Q_m(x)$ в узлах таблицы

$$Q_m(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0,1,\ldots,m \tag{21}$$

Definition 5: Интерполяционный многочлен

Полином (20) называется *интерполяционным многочленом*, а x_k – *узлами интерполирования.*

Равенства (21) представляют собой СЛАУ относительно искомых коэффциентов обобщенного многочлена $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Эта система имеет единственное решение, если ее определитель отличен от нуля:

$$\det\begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \ldots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \ldots & \varphi_m(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_0(x_m) & \varphi_1(x_m) & \ldots & \varphi_m(x_m) \end{pmatrix} \neq 0$$

Наиболее популярной является полиномиальная аппроксимация:

$$\varphi_k(x) = x^k \qquad Q_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_mx^m$$

Definition 6: Определитель Вандермонда

Определитель СЛАУ для случая полиномиальной аппроксимации называется определителем Вандермонда и имеет следующий вид:

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix}$$

Определитель Вандермонда отличен от нуля, и задача имеет единственное решение, если узлы интерполирования $x_0, x_1, \ldots, x_m$ различны.

Вопрос 6. Интерполяционный полином Лагранжа. Остаточный член полинома Лагранжа.

Непосредственное численное решение представляет значительные трудности. С одной стороны, это связано с заметным объемом вычислений для нахождения a_k. С другой стороны, малое изменение данных таблицы $(x_k, f(x_k))$ часто приводит к сильному изменению решения (особенно для близко расположенных узлов интерполирования). В связи с этим, попробуем построить полином, не прибегая к решению системы.
С этой целью введем следующие функции:

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_m)$$
$$\omega_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k)} = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\dots(x - x_m)$$

В этих обозначениях запишем следующий полином

Definition 7: Интерполяционный полином Лагранжа

$$Q_m(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{\omega_k(x)}{\omega_k(x_k)} f(x_k) \tag{22}$$

По построению это многочлен степени m. Определим его значения в узлах интерполирования x_i. Так как для $x = x_i$ полином $\omega_k(x)$ равен нулю, если только $i \neq k$, то для $Q_m(x_i)$ получаем

$$Q_m(x_i) = \sum_{k=0}^{m} \frac{\omega_k(x_i)}{\omega_k(x_k)} f(x_k) = \frac{\omega_i(x_i)}{\omega_i(x_i)} f(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0,1,\dots,m$$

То есть в узлах интерполяции значения полинома совпадают со значениями функции. Теперь обратимся к погрешности интерполяционного полинома. Исходная функция $f(x)$ может быть представлена в виде

$$f(x) = Q_m(x) + R_m(x)$$

где $Q_m(x)$ – интерполяционный полином, а $R_m(x)$ носит название *остаточного члена интерполяционного полинома.*

Theorem 8: Об остаточном члене полинома Лагранжа

Пусть $f(x)$ на промежутке $[a, b]$ имеет непрерывные производные вплоть до $m+1$ порядка, то остаточный член $R_m(x)$ можно представить в виде:

$$R_m(x) = f(x) - Q_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\eta)}{(m+1)!}\omega(x), \qquad \eta \in [a, b] \tag{23}$$

При этом $\omega(x)$ определяется как и прежде.

Доказательство. Рассмотрим вспомогательную функцию

$$\varphi(z) = f(z) - Q_m(z) - K\omega(z) \tag{24}$$

где K – некоторая постоянная. Пусть x_k – узлы интерполирования, а x – точка, в которой оценивается погрешность ($x \neq x_k$). Легко заметить, что функция $\varphi(z)$ равна нулю во всех узлах интерполирования. Выберем константу K так, чтобы $\varphi(x) = 0$

$$K = \frac{f(x) - Q_m(x)}{\omega(x)} = \frac{R_m(x)}{\omega(x)}$$

Таким образом, $\varphi(z)$ имеет по меньшей мере $m+2$ нуля (все узлы интерполирования и точка x). Тогда по теореме Ролля первая производная $\varphi(z)$ имеет по меньшей мере $m+1$ нуль, вторая производная – не менее m нулей, а $(m+1)$-я производная $\varphi^{(m+1)}(z)$ имеет по меньшей мере один нуль. Обозначим такую точку за η. Тогда, последовательно дифференцируя (24), получаем

$$\varphi^{(m+1)}(\eta) = f^{(m+1)}(\eta) - 0 - K(m+1)! = 0$$

Подставляя в это равенство выражение для K, получаем формулу для $R_m(x)$, совпадающую с ожидаемой.

Эта теорема позволяет сделать очевидный, но важный вывод. Пусть $f(x)$ – это полином степени m. Тогда $f^{(m+1)}(\eta) = 0$. Следовательно, полином степени m *однозначно* воспроизводится интерполяционным полиномом по $m+1$ точке. Ясно также, что остаточный член во всех узлах интерполирования равен нулю.

В заключение стоит отметить, что, хотя о расположении точки η ничего не известно, очевидна зависимость величины η как от узлов интерполирования, так и от точки x, где оценивается погрешность, т.е. $\eta = \eta(x)$.

Остаточный член позволяет оценивать отклонение $L_m(x)$ от $f(x)$ для дифференцируемых функций тогда, когда удается оценить $f^{(m_1)}(x)$. Полагая $M_{m+1} = \max|f^{(m+1)}(x)|$, получим $R_m(x) \leq \dfrac{M_{m+1}}{(m+1)!}|\omega(x)|$.

Вопрос 7. Выбор узлов интерполирования. Интерполяционный полином Ньютона для равно и неравноотстоящих узлов.

7.1 Выбор узлов интерполирования

Для уменьшения погрешности интерполирования обратимся к теореме об остаточном члене полинома Лагранжа при заданной степени полинома m. Поскольку величиной $f^{(m+1)}(\eta)$ трудно управлять, и возможна лишь оценка пределов ее изменения, задача уменьшения погрешности сводится к управлению величиной $|\omega(x)|$ за счет выбора узлов интерполирования. Рассмотрим два типичных на практике случая.

Случай 1. Задана степень полинома m и имеется таблица достаточно большой длины. Точка x^*, в которой вычисляется значение полинома, заранее известна. Требуется выбрать $m+1$ узел так, чтобы величина $|\omega(x^*)|$ была бы минимальна.
Результат очевиден. Нужно выбирать узлы интерполирования из таблицы, *ближайшие* к x^*. Использование любого другого узла вместо ближайшего неизбежно увеличивает значение

$$|\omega(x^*)| = |\,(x^* - x_0)\,(x^* - x_1)\ldots(x^* - x_m)\,|$$

Случай 2. Заданы степень полинома m и промежуток интерполирования $[a,b]$. Точка x^*, в которой вычисляется значение полинома, заранее не известна. Требуется выбрать узлы интерполирования так, чтобы в самом неблагоприятном случае расположения x^* погрешность была бы минимальна (т.н. *минимаксный критерий*)

$$\max_{[a,b]} |\omega(x^*)| \to \min$$

Интуитивно напрашивающееся предложение о равномерном задании узлов на промежутке оказывается ошибочным. Значения $|\omega(x)|$ в узлах интерполирования равны нулю, график напоминает «колокольчики», максимум которых достигается между узлами интерполирования. При выборе равноотстоящих узлов погрешность для x^*, близких к центру промежутка интерполирования оказывается небольшой, однако ближе к концам она сильно возрастает. Узлы интерполирования нужно симметрично сместить ближе к концам промежутка. Тогда высота центрального «колокольчика» увеличится, в то время как высота крайних уменьшится. Оптимальный выбор узлов интерполирования отвечает нулям так называемых ортогональных полиномов Чебышева, когда все «колокольчики» будут одинаковыми по высоте.

7.2 Интерполяционный полином Ньютона для равно и неравноотстоящих узлов.

Оценка погрешности на основе формулы

$$R_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\eta)}{(m+1)!}\omega(x)$$

выполняется крайне редко из-за известных трудностей, связанных с оценкой производной $f^{(m+1)}(\eta)$ особенно для таблично заданной функции. Поэтому на практике о величине погрешности принято судить, сравнивая в заданной точке x^* значения интерполяционных полиномов соседних степеней $Q_m(x^*)$ и $Q_{m+1}(x^*)$. При недостаточной точности последовательно повышают степень полинома. Но для такой процедуры использование полинома Лагранжа оказывается неэффективным. При переходе к полиному следующей степени всю работу приходится выполнять заново. Целесообразно записать полином в таком виде, чтобы расчеты сводились к появлению лишь еще одного слагаемого в дополнение к ранее вычисленному $Q_m(x)$. С этой целью запишем первую разделенную разность

$$f(x;x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

и выразим из нее $f(x)$

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x;x_0) \tag{25}$$

Заметим, что первое слагаемое в первой части это интерполяционный полином нулевой степени, а второе слагаемое – погрешность полинома. Теперь запишем вторую разделенную разность

$$f(x; x_0; x_1) = \frac{f(x; x_0) - f(x_0; x_1)}{x - x_1}$$

выразим из нее первую разность через вторую и поставим в формулу (25)

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_1; x_0) + (x - x_0)(x - x_1)f(x; x_0; x_1) \tag{26}$$

Продолжая этот процесс, получаем

$$\begin{aligned} f(x) =& f(x_0) + (x - x_0)f(x_1; x_0) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0; x_1; x_2) + \dots + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{m-1})f(x_0; x_1; x_2; \dots x_m) + \\ &+ (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_m)f(x; x_0; x_1; x_2; \dots x_m) = \\ &= Q_m(x) + \omega(x)f(x; x_0; x_1; x_2; \dots x_m) \end{aligned}$$

Сумма первых k слагаемых порождает интерполяционный полином степени $k - 1latexpageoutofpage$, а последнее слагаемое является погрешностью интерполяционного полинома степени m. При этом структура полинома такова, что полином степени m получается как полином степени $m - 1$ с добавлением еще одного слагаемого.

Definition 8: Интерполяционный полином Ньютона

Это интерполяционный полином в форме

$$Q_m(x) = Q_{m-1}(x) + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{m-1})f(x_0; x_1; x_2; \dots x_m) \tag{27}$$

На практике вычисление разделенных разностей производится в рамках следующей таблицы, где появление новой разделенной разности более высокого порядка связано с построением еще одной диагонали

x_0	$f(x_0)$	$f(x_0; x_1)$	$f(x_0; x_1; x_2)$	$f(x_0; x_1; x_2; x_3)$	$f(x_0; x_1; x_2; x_3; x_4)$
x_1	$f(x_1)$	$f(x_1; x_2)$	$f(x_1; x_2; x_3)$	$f(x_1; x_2; x_3; x_4)$	
x_2	$f(x_2)$	$f(x_2; x_3)$	$f(x_2; x_3; x_4)$		
x_3	$f(x_3)$	$f(x_3; x_4)$			
x_4	$f(x_4)$				

Пускай узлы таблицы задания функции являются равноотстоящими. В этом случае разделенные разности можно заменить на конечные, тем самым избежав деления на разность значений аргумента. Используя

$$\frac{x - x_k}{h} = \frac{x - x_0 - kh}{h} = \frac{x - x_0}{h} - k = t - k$$

и формулу связи разделенных и конечных разностей

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k-1}; x_{i+k}) = \frac{\Delta^k f_i}{k!\, h^k}$$

получим версию полинома Ньютона для равноотстоящих узлов

$$Q_m(x_0+ht) = f(x_0)+\frac{t}{1!}\Delta f(x_0)+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)+\dots+\frac{t(t-1)\dots(t-m+1)}{m!}\Delta^m f(x_0) \tag{28}$$

Новая независимая переменная t принимает в узлах таблицы целые значения, а вычисление конечных разностей реализуется подобно разделенным разностям по следующей таблице

x_0	$f(x_0)$	Δf_0	$\Delta^2 f_0$	$\Delta^3 f_0$	$\Delta^4 f_0$
x_1	$f(x_1)$	Δf_1	$\Delta^2 f_1$	$\Delta^3 f_1$	
x_2	$f(x_2)$	Δf_2	$\Delta^2 f_2$		
x_3	$f(x_3)$	Δf_3			
x_4	$f(x_4)$				

Вопрос 8. Сплайн-интерполяция. Подпрограммы SPLINE и SEVAL. Интерполирование по Эрмиту. Обратная задача интерполирования.

8.1 Интерполирование сплайнами.

На практике интерполяционные полиномы высоких степеней строят крайне редко. Это связано с тем, что их коэффициенты крайне чувствительны к погрешностям исходных данных. Сравнительно малое изменение узлов интерполирования x_k или значений функции $f(x_k)$ приводит к сильному изменению вида самого полинома. Одним из возможных решений является разбиение большой исходной таблицы на участки, для каждого из которых строится интерполяционный полином относительно невысокой степени. Однако, в основном требуется, чтобы аппроксимирующая функция была гладкой, а функция, составленная из различных полиномов, в узлах сопряжения не имеет производной. Выходом из положения является использование сплайн-интерполяции. Вообще, сплайн – это некий инструмент, используемый при построении чертежей. Дадим математической модели более формальное определение.

Обратимся к таблично заданной функции: $X = \{x_1, \dots, x_N\}, F = \{f(x) \,|\, x \in X\}$. Число узлов равно N, а их нумерация начинается с единицы. На каждом промежутке $[x_k, x_{k+1}]$ будем строить интерполяционный полином третьей степени

$$S_k(x_{k+1}) = a_k + b_k(x-x_k) + c_k(x-x_k)^2 + d_k(x-x_k)^3 \tag{29}$$

Количество полиномов, как и промежутков, равно $N-1$, и каждый полином имеет 4 параметра. Таким образом, всего в наличии $4N-4$ параметра. Потребуем, чтобы во всех внутренних точках были равны значения соседних полиномов, их первых и вторых производных.

$$\begin{cases} S_k(x_{k+1}) = S_{k+1}(x_{k+1}) \\ S'_k(x_{k+1}) = S'_{k+1}(x_{k+1}) \\ S''_k(x_{k+1}) = S''_{k+1}(x_{k+1}) \end{cases} \qquad k = 1, \ldots, N-2$$

То есть выполнялось суммарно $3(N-2) = 3N-6$ уравнений. Еще N уравнений отражают требования интерполирования

$$S_k(x_k) = f_k; \qquad k = 1, \ldots, N-1; \qquad S_{N-1}(x_N) = f_N$$

Общее число задаваемых уравнений достигает $4N-6$. При наличии $4N-4$ параметров появляется возможность выполнить еще два условия. Их задание необязательно – все требования интерполяции и сопряжения соседних полиномов уже выполнены, но это целесообразно сделать для однозначного решения задачи. Различные кубические сплайны отличаются друг от друга этим заданием этих двух требований, которые, как правило, записываются для двух крайних точек x_1 и x_N. К этим двум дополнительным условиям целесообразно выдвинуть следующие два требования. С одной стороны, их лучше задавать так, чтобы полная система уравнений решалась по возможности более просто. С другой стороны, они должны максимально соответствовать характеру поведения функции в начале и в конце промежутка интерполирования. Рассмотрим на примерах.

Пример 1. $S''_1(x_1) = 0; \quad S''_{N-1}(x_N) = 0$. Этот сплайн получил название *естественного кубического сплайна*. Такие условия и название оправдываются только при использовании в механике. В общем случае равенство нулю второй производной на краях промежутка не является обязательным свойством экспериментальных данных, отражаемых таблицей. *Пример 2.* По первым четырем точкам таблицы строится интерполяционный полином третьей степени $Q_3(x)$, и его третья производная приравнивается третьей производной $S_1(x)$. Аналогично, по последним четырем точкам строится интерполяционный полином $\tilde{Q}_3(x)$, и его третья производная приравнивается третьей производной последнего полинома $S_{N-1}(x)$.

$$Q'''_3(x_1) = S'''_1(x_1); \qquad \tilde{Q}_3{}'''(x_N) = S'''_{N-1}(x_N)$$

Такие условия не только отвечают характеру поведения функции в начале и в конце промежутка интерполирования, но и достаточно просты (третья производная от полинома третьей степени постоянна). Именно они и учитываются в рассматриваемых программах `SPLINE` и `SEVAL`.

8.2 Подпрограммы SPLINE и SEVAL.

Первая из них – `SPLINE(N, X, F, B, C, D)`, оформленная как процедура, решает систему уравнений относительно b_k, c_k, d_k.

N – число точек;

X, **F** – векторы, элементами которых являются x_k и f_k;

B, **C**, **D** – векторы с коэффициентами b_k, c_k, d_k полиномов (29) – результаты работы `SPLINE`.

Вторая программа `SEVAL(N, U, X, F, B, C, D)`, оформленная как функция, использует результаты работы `SPLINE` и вычисляет значение сплайна в заданной точке **U**.

8.3 Интерполирование по Эрмиту.

До этого интерполяция происходила по значениям функции. Если в таблице помимо значений функции присутствуют ее производные и от интерполяционного полинома требуется совпадение с данными этой таблицы, то такая задача называется *интерполирование по Эрмиту.* Рассмотрим пример.
Для следующих входных данных требуется построить интерполяционный полином, удовлетворяющий всем условиям таблицы.

x	x_0	x_1	x_2
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$
$f'(x)$	$f'(x_0)$	$f'(x_1)$	—
$f''(x)$	—	$f''(x_1)$	—

Выпишем таблицу в виде системы уравнений:

$$\begin{cases} H(x_k) = f(x_k), \quad k = 0,1,2 \\ H'(x_k) = f'(x_k), \quad k = 0,1 \\ H''(x_k) = f''(x_k), \quad k = 1 \end{cases} \tag{30}$$

Система (30) содержит 6 уравнений. Для ее однозначного решения полином $H(x)$ должен иметь 6 коэффициентов, т.е. быть полиномом пятой степени. Общее правило очевидно: степень интерполяционного полинома Эрмита на единицу меньше общего числа условий таблицы. Вспоминая случай с полиномом Лагранжа, для построения которого решение системы оказалось необязательным, возникает вопрос – нельзя ли и полином Эрмита воспроизвести сразу в готовом виде? Ответ оказывается положительным, однако общая формула довольна громоздка. Форма записи будет проще, если исходная система симметрична, т.е. число и вид условий во всех узлах одинаковые.
Полином Эрмита второй степени

$$H_2(x) = f(x_0) + \frac{x - x_0}{1!} f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0)$$

с одной стороны является частичной суммой ряда Тейлора, а с другой удовлетворяет условиям

$$H_2(x_0) = f(x_0); \qquad H_2'(x_0) = f'(x_0); \qquad H_2''(x_0) = f''(x_0)$$

что позволяет назвать его еще и интерполяционным полиномом Эрмита с одним узлом интерполирования.

8.4 Обратная интерполяция.

До этого была рассмотрена так называемая *прямая* задача интерполирования, в рамках которой по заданному значению x^* требовалось оценить значение функции $f(x^*)$.

В обратной же задаче для такой же таблицы требуется восстановить такое значение аргумента, при котором функция принимает заданное значение. На практике чаще всего используется один из следующих способов.

Способ 1. Меняются местами строки таблицы, в качестве узлов интерполирования выступают значения функции, по которым строится интерполяционный полином для обратной функции. Подставляя в него данное f^* находим искомый x^*. Такой подход возможен, если обратная функция на заданном участке интерполирования существует, то есть исходная функция строго монотонна, что бывает совсем не всегда.

Способ 2. По исходной таблице строится обычный интерполяционный полином $Q_m(x)$ с узлами x_k, а затем решается уравнение $Q_m(x) = f^*$. Для полиномов до 4 степени ответ может быть получен даже аналитически, а в других случаях это уравнение решается численно. В случае немонотонной функции, краевом для предыдущего способа, в этот раз будет найдено несколько корней, из которых необходимо будет выбрать отвечающий поставленной задаче.

Вопрос 9. Квадратурные формулы левых, правых и средних прямоугольников, трапеций, Симпсона. Малые и составные формулы, их остаточные члены.

Вопрос 10. Общий подход к построению квадратурных формул. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса, Чебышева, Гаусса.

Вопрос 11. Адаптивные квадратурные формулы. Подпрограмма QUANC8.

Вопрос 12. Задача численного дифференцирования.

Влияние вычислительной погрешности.

Вопрос 13. Среднеквадратичная аппроксимация (дискретный случай). Понятие веса.

Вопрос 14. Среднеквадратичная аппроксимация (непрерывный случай). Понятие ортогональности.

Вопрос 15. Ортогонализация по Шмидту. Прмиеры ортогональных полиномов.

Вопрос 16. Обратная матрица, собственные числа и векторы. Задачи на матрицы. Норма матрицы, сходимость матричного степенного ряда, функции от матрицы.

Вопрос 17. 7 теорем о матричных функциях.

Вопрос 18. Решение систем линейных

дифференциальных и разностных уравнений с постоянной матрицей.

Вопрос 19. Устойчивость решений дифференциальных и разностных уравнений.

Вопрос 20. Метод Гаусса и явление плохой обусловленности. LU-разложение матрицы. Подпрограммы DECOMP и SOLVE.

Вопрос 21. Метод последовательных приближений для решения линейных систем.

Вопрос 22. Методы бисекции, секущих, обратной параболической интерполяции для решения нелинейных уравнений. Подпрограмма ZEROIN.

Вопрос 23. Методы последовательных приближений и Ньютона для решения нелинейных уравнений и систем.

Вопрос 24. Задача Коши решения обыкновенных

дифференциальных уравнений. Явный и неявный методы ломаных Эйлера, метод трапеций.

Вопрос 25. Методы Адамса. Локальная и глобальная погрешности, степень метода.

Вопрос 26. Методы Рунге-Кутты. Подпрограмма RKF45.

Вопрос 27. Глобальная погрешность. Устойчивость метода. Ограничение на шаг. Явление жесткости и методы решения жестких систем.

Вопрос 28. Метод Ньютона в неявных алгоритмах решения дифференциальных уравнений.

Вопрос 29. Сведение дифференциального уравнения высокого порядка к системе уравнений первого порядка. Метод стрельбы для решения краевых задач.
