Фамилия И.О.

Название

Новосибирск, 2024

Оборот титула
УДК
Фамилия И.О. Название с. Новосибирск: СибГУТИ, 2024.
Аннотация.
Издание рассчитано на

Содержание

- 1. Основные понятия курса
 - 1.1. Основные понятия
- 2. Приближенные числа и действия над ними
 - 2.1. Абсолютная и относительная погрешность
 - 2.2. Изменение абсолютной и относительной погрешности при арифметических операциях
 - 2.3. Изменение абсолютной и относительной погрешности при вычислении функций
- 3. Методы решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)
 - 3.1. Разновидности методов решения СЛАУ
 - 3.2. Точные методы решения СЛАУ
 - 3.2.1. Метод Гаусса
 - 3.2.2. Модифицированный метод Гаусса
 - 3.3. Приближенные методы решения СЛАУ
 - 3.3.1. Нормы векторов и матриц
 - 3.3.2. Метод простой итерации (МПИ)
 - 3.3.3. Метод Зейделя
 - 3.4. Оценки трудоемкости решения СЛАУ различными методами
- 4. Методы решения нелинейных уравнений и систем нелинейных уравнений (НУ и СНУ)
 - 4.1. Метод половинного деления (МПД)
 - 4.2. Метод хорд
 - 4.3. Метод касательных (Ньютона)
 - 4.4. Скорость сходимости методов решения НУ
 - 4.4.1. Скорость сходимости МПД
 - 4.4.2. Скорость сходимости метода хорд
 - 4.4.3. Скорость сходимости метода Ньютона
 - 4.4.3.1. Тонкие места метода Ньютона
 - 4.5. Вариации метода Ньютона
 - 4.5.1. Комбинированный метод Ньютона
 - 4.5.2. Видоизменённый метод Ньютона
 - 4.6. Многомерный метод Ньютона
- 5. Метод итераций (МИ)
 - 5.1. Одномерный вариант МИ
 - 5.1.1. Графическая интерпретация МИ
 - 5.2. Многомерный вариант МИ
- 6. Таблица сравнительных характеристик методов решения НУ и СНУ
- 7. Интерполяция
 - 7.1. Постановка задач интерполяции и общий поход к ее применению
 - 7.2. Интерполяция многочленами
 - 7.2.1. Интерполяционный многочлен Лагранжа
 - 7.2.2. Схема Эйткена
 - 7.2.3. Конечные разности. Формулы Ньютона. Интерполяционный многочлен Ньютона
 - 7.2.4. Центральные интерполяционные формулы (Стирлинга и Бесселя)
 - 7.3. Интерполяция кубическими сплайнами
 - 7.3.1 Свойства кубического сплайна
 - 7.3.2 Формулы для расчета кубического сплайна
 - 7.3.3 Алгоритм расчета кубического сплайна
 - 7.4. Тригонометрическая интерполяция

- 7.4.1. Формулы тригонометрической интерполяции
- 7.4.2. Быстрое преобразование Фурье
- 7.5. Многомерная интерполяция
- 8. Применение интерполяции
 - 8.1. Обратное интерполирование
 - 8.2. Численное дифференцирование
 - 8.2.1. Постановка задачи численного дифференцирования
 - 8.2.2. Формулы численного дифференцирования
 - 8.2.3. Оценка погрешности численного дифференцирования
 - 8.3. Численное интегрирование
 - 8.3.1. Постановка задачи численного интегрирования
 - 8.3.2. Формулы численного интегрирования
 - 8.3.3. Погрешности формул численного интегрирования
 - 8.3.4. Общие формулы интегрирования (метод трапеций и методы Симпсона)
 - 8.3.5. Погрешности общих формул метода трапеции и метода Симпсона
 - 8.3.6. Метод двойного пересчета для определения погрешностей
- 9. Численные методы решения дифференциальных уравнений и систем дифференциальных уравнений (ДУ и СДУ)
 - 9.1. Постановка задачи и общая идея решения
 - 9.1.1. Постановка задачи
 - 9.1.2. Простейший вариант задачи и простейший метод ее решения
 - 9.1.3. Общая идея всех методов решения ДУ и СДУ
 - 9.2. Методы решения ДУ
 - 9.2.1. Простейший метод решения ДУ метод Эйлера, его геометрическая интерполяция
 - 9.2.2. Простейшие модификации метода Эйлера (метод Рунге-Кутта 2-ого порядка)
 - 9.2.3. Другая интерполяция методом Эйлера (с усреднением по времени)
 - 9.2.4. Сведение дифференциальных уравнений высших порядков к системе дифференциальных уравнений первого порядка
 - 9.2.5. Метод Рунге-Кутта 4-ого порядка
 - 9.2.6. Локальные и глобальные погрешности одношаговых методов Эйлера и Рунге-Кутта
 - 9.2.7. Оценка погрешности решения ДУ и СДУ методом двойного пересчета. Коррекция решения.
 - 9.2.8. Многомерные методы решения ДУ и СДУ
 - 9.3. Краевые задачи для дифференцирования уравнений
 - 9.4. Что делать, если дифференциальное уравнение не может быть решено относительно старшей производной
- 10. Аппроксимация
 - 10.1. Постановка задачи аппроксимации и общий подход к решению
 - 10.2. Метод наименьших квадратов
- 11. Нелинейная оптимизация. Метод градиента (метод наискорейшего спуска).
 - 11.1. Сведение СНУ к задаче нелинейной оптимизации (ЗНО) и наоборот
 - 11.2. Метод градиента (метод наискорейшего спуска).

1 Введение и основные понятия курса

1.1 Введение

Вычислительная математика одновременно объединяет в себе математический анализ, линейную алгебру, численные методы и алгоритмы, которые позволяют значительно упростить решение задач, возникающие в различных областях науки и техники, например, в таких как моделирование физических процессов.

Данное методическое пособие предназначено для студентов и преподавателей, изучающих курс вычислительной математики. В нем представлены основные концепции и методы, углубить понимание численных методов и лучше понять стратегию их применения. Пособие включает в себя теоретические материалы, сформулированные алгоритмы решения, а также примеры решения задач, которые позволят лучше понять механизм работы алгоритмов.

В процессе изучения данного курса студенты познакомятся с такими ключевыми темами, как численные методы решения линейных и нелинейных уравнений, и систем линейных и нелинейных уравнений, дифференцирования уравнений, а также методы интерполяции, аппроксимации и интегрирования.

1.1 Основные понятия курса

Вычислительная математика: Область математики, изучающая численные методы и алгоритмы для решения математических задач с использованием компьютерных технологий.

Численные методы: Алгоритмические подходы, позволяющие приближенно решать математические задачи, такие как уравнения, интегралы и дифференциалы, когда аналитическое решение невозможно или сложно получить.

Системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ): Совокупность алгебраических уравнений первой степени. В данном курсе будут встречаться два вида записи СЛАУ.

Общий вид:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_2 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

Здесь m — количество уравнений, n — количество переменных, a_{ij} — коэффициенты при переменных x_i — сами переменные, которые нужно найти, b_i — свободные члены.

Матричный вид:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

или:

$$A = b$$
;

Здесь A — это матрица системы, x — вектор неизвестных, b — вектор свободных членов. Если к матрице A добавить вектор b, то мы получим расширенную матрицу.

Системы нелинейных уравнений (СНУ): Наборы нелинейных уравнений. Это системы вида:

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_m(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

Здесь f_i – некоторая непрерывная нелинейная функция.

Сходимость: Характеристика численного метода, описывающая, как быстро и насколько точно метод приближается к истинному решению задачи по мере увеличения количества итераций или уменьшения шага.

Интерполяция: Процесс нахождения значений функции в промежуточных точках на основе известных значений в заданных узлах. Основным условием интерполяции является то, что найденная функция g должна проходить через все заданные точки заданной функции f.

Численное интегрирование: Методы, позволяющие вычислить приближенные значения определенных интегралов, когда аналитическое интегрирование невозможно или затруднительно.

Численное дифференцирование: Процесс нахождения производных функции с использованием конечных разностей, что позволяет оценить скорость изменения функции в заданной точке.

2 Приближенные числа и действия над ними

2.1 Абсолютная и относительная погрешность

Определения:

Абсолютной погрешностью величины х называется величина

$$\Delta \mathbf{x} = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|,\tag{2.1}$$

где x — приближенное значение, x_0 — точное значение, тогда $x = x_0 \pm \Delta x$. Обычно $\Delta x \ll x$ (существенно меньше).

Относительной погрешностью измерения величины x называется величина

$$\delta x = \frac{\Delta x}{|x_0|} \approx \frac{\Delta x}{|x|},\tag{2.2}$$

где x – приближенное значение, x_0 – точное значение, Δx – абсолютная погрешность, тогда $x = x_0 \cdot (1 \pm \delta x)$.

2.2 Изменение абсолютной и относительной погрешностей при арифметических операциях

Теорема 2.1. При сложении абсолютные погрешности складываются, то есть абсолютная погрешность суммы не превосходит суммы абсолютных погрешностей.

Доказательство. Пусть x, y — данные приближенные числа. Из определения абсолютной погрешности следует:

$$x = x_0 \pm \Delta x$$

$$y = y_0 \pm \Delta y$$

Складываем х и у:

 $x + y = (x_0 + y_0) \pm (\Delta x + \Delta y)$ – абсолютная погрешность измерений;

x + y – приближенное значение суммы;

 $x_0 + y_0$ – точное значение суммы;

 $\pm \Delta x \pm \Delta y$ — погрешность суммы, она не превышает $\Delta x + \Delta y$ — суммы абсолютных погрешностей.

Аналогично для вычитания: абсолютная погрешность разности не превосходит суммы абсолютных погрешностей.

$$x - y = x_0 - y_0 \pm (\Delta x + \Delta y)$$

Теорема 2.2. При умножении и делении складываются относительные погрешности, т.е. относительная погрешность произведения (частного) не превосходит сумму относительных погрешностей.

Пусть:

$$x = x_0 \pm \Delta x$$

$$y = y_0 \pm \Delta y$$

Перейдем от записи с абсолютными погрешностями, к записи с относительными погрешностями:

$$x = x_0 \pm \Delta x = x_0 \left(1 \pm \frac{\Delta x}{x_0} \right) = x_0 (1 \pm \delta x)$$

$$y = y_0 \pm \Delta y = y_0 \left(1 \pm \frac{\Delta y}{y_0} \right) = y_0 (1 \pm \delta y)$$

Перемножим x и y:

 $xy = x_0y_0(1 \pm \delta x)(1 \pm \delta y) = x_0y_0(1 \pm \delta x \pm \delta y \pm \delta x \delta y)$, где $\delta x \delta y \ll \delta x$, δy , поэтому $\delta x \delta y$ можно отбросить.

 x_0y_0 – точное значение произведения

ху – приближенное значение произведения

Итак, $xy = x_0y_0(1 \pm \delta x \pm \delta y)$ – мы пренебрегли величиной $\delta x \delta y$.

Замечание. Как мы видим из полученной записи, относительная погрешность произведения, равная $\pm \delta x \pm \delta y$, не превосходит $\delta x + \delta y$ – суммы относительных погрешностей.

 $\delta x \pm \delta y$ – относительная погрешность произведения.

Ниже приведена таблица с формулами для расчета абсолютной и относительной погрешности при выполнении простейших арифметических действий.

Таблица 1.1

Операция	Абсолютная погрешность	Относительная погрешность
x + y	$\Delta x + \Delta y$	$\frac{ x_0 }{ x_0 } \cdot \delta x + \frac{ y_0 }{ x_0 } \cdot \delta y$
		$\frac{1}{ x_0+y_0 } \cdot \delta x + \frac{1}{ x_0+y_0 } \cdot \delta y$
x-y	$\Delta x + \Delta y$	$\frac{ x_0 }{ x_0 } \cdot \delta x + \frac{ y_0 }{ x_0 } \cdot \delta y$
		$ x_0 - y_0 $ $ x_0 - y_0 $ $ x_0 - y_0 $
$x \cdot y$	$ y_0 \cdot \Delta x + x_0 \cdot \Delta y$	$\delta x + \delta y$
<u>x</u>	$ y_0 \cdot \Delta x + x_0 \cdot \Delta y$	$\delta x + \delta y$
у	y_0^2	

2.3 Изменение абсолютной и относительной погрешности при вычислении функции

Как известно из математического анализа, вычисление значения функции с помощью дифференциала выглядит следующим образом

$$f(x) = f(x_0 \pm \Delta x) \approx f(x_0) \pm f'(x_0) \Delta x$$

Итак, при вычислении функции абсолютная погрешность результата

$$\Delta f(x) = |f'(x_0)| \cdot \Delta x, \tag{2.3}$$

т.е. при вычислении функции абсолютная погрешность увеличивается в $|f'(x_0)|$ раз.

Исходя из формул (2.3) и (2.2) можно получить формулу расчета относительной погрешности при вычислении функций

$$\delta f(x) = \frac{\Delta f(x)}{|f(x)|} = \frac{|f'(x_0)| \cdot \Delta x}{|f(x)|}$$
 (2.4)

Следствие 2.1. При возведении в степень относительная погрешность увеличивается в $|\alpha|$ раз.

Следствие 2.2. Пусть
$$f(x) = e^x$$
, где $x = x_0 \pm \Delta x$

$$e^x = e^{x_0 \pm \Delta x} = e^{x_0} e^{\pm \Delta} = e^{x_0} (1 \pm \Delta x)$$

 $e^{x} = e^{x_0}(1 \pm \Delta x)$. При вычислении экспоненты абсолютная погрешность аргумента становится относительной погрешностью результата.

Следствие 2.3. При вычислении логарифмической функции ln(x) относительная погрешность аргумента становится абсолютной погрешностью результата.

Пусть,
$$f(x) = \ln(x)$$
 , тогда $\ln(x) = \ln(x_0) \pm \frac{1}{x_0} \Delta x = \ln(x_0) \pm \delta x$ $\ln(x) = \ln(x_0) \pm \delta x$

В таблице 1.2 представлены формулы расчета абсолютной и относительной погрешности при вычислении элементарных математических функций

Таблица 1.2

Функция $f(x)$	Абсолютная	Относительная погрешность
	погрешность $\Delta f(x)$	$\delta f(x)$
χ^n	$n \cdot x_0 ^{n-1} \cdot \Delta x$	$n \cdot \delta x$
$\sqrt{\chi}$	Δx	1
	$\frac{1}{2\sqrt{x_0}}$	$\frac{1}{2} \cdot \delta x$
1	Δx	δx
$\frac{\overline{x}}{x}$	$\overline{x_0}^2$	

r	Υ.,	1 1 0
e^x	$e^{x}\Delta x$	$ x_0 \cdot \delta x$
a^x	$a^x \ln(a) \cdot \Delta x$	$ x_0 \cdot \ln(a) \cdot \delta x$
ln (x)	Δx	δx
	$\overline{x_0}$	$\overline{\ln(x_0)}$
$\lg(x)$	Δx	δx
	$\overline{x_0 \ln 10}$	$\overline{\ln(x_0)}$
sin(x)	$ \cos(x_0) \cdot \Delta x$	$ x_0 \cdot \operatorname{ctg}(x_0) \cdot \delta x$
cos(x)	$ \sin(x_0) \cdot \Delta x$	$ x_0 \cdot tg(x_0) \cdot \delta x$
tg (x)	Δx	$2 \cdot x_0 $
	$\frac{\overline{\cos^2(x_0)}}{\Delta x}$	$\frac{ x_0 \cdot \operatorname{tg}(x_0) \cdot \delta x}{ x_0 \cdot \operatorname{tg}(x_0) \cdot \delta x}$ $\frac{2 \cdot x_0 }{\sin(2x_0)} \cdot \delta x$ $\frac{2 \cdot x_0 }{\sin(2x_0)} \cdot \delta x$
$\operatorname{ctg}\left(x\right)$	Δx	$2 \cdot x_0 $
	$\overline{\sin^2(x_0)}$	5111(211)
arcsin(x)	Δx	$ \gamma_{\alpha} $
	$\sqrt{1-{x_0}^2}$	$\frac{1x_0}{\arcsin(x_0)\cdot\sqrt{1-x_0^2}}\cdot\delta x$
arccos(x)	Δx	$ x_0 $
	$\frac{\sqrt{1-{x_0}^2}}{\Delta x}$	$\frac{1}{\arccos(x_0) \cdot \sqrt{1 - x_0^2}} \cdot \delta x$
arctg(x)	Δx	1 1 0 1
	$\frac{1+x_0^2}{\Delta x}$	$\frac{1}{\operatorname{arctg}(x_0) \cdot (1 + x_0^2)} \cdot \delta x$
arcctg(x)	Δx	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
	$\overline{1+{x_0}^2}$	$\frac{1}{\operatorname{arcctg}(x_0) \cdot (1 + x_0^2)} \cdot \partial x$
x^y	$\frac{1 + x_0^2}{x^y \cdot \left(y \frac{\Delta x}{x} + \ln(x) \right)}$	$ y \cdot \ln(x) \cdot \delta x + y \cdot \delta x$
	$\cdot \Delta y$	

Пример.

$$x = 2,3805 \pm 0,024$$

$$y = 1,2974 \pm 0,012$$

$$x + y = 2,3805 + 1,2974 \pm (0,024 + 0,012) = 3,6779 \pm 0,036$$

$$x - y = 2,3805 - 1,2974 \pm (0,024 + 0,012) = 1,0831 \pm 0,036$$

$$x^{2} = 2,3805^{2} \left(1 \pm 2 \cdot \frac{0,024}{2,3805}\right) = 5,6667(1 \pm 0,021) = 5,6667 \pm 0,119$$

$$\sqrt{y} = 1,2974^{\frac{1}{2}} \left(1 \pm \frac{1}{2} \cdot \frac{0,012}{1,2974}\right) = 1,139(1 \pm 0,0046) = 1,139 \pm 0,005$$

$$x \cdot y = 2,3805 \left(1 \pm \frac{0,024}{2,3805}\right) \cdot 1,2974 \left(1 \pm \frac{0,012}{1,2974}\right) =$$

$$= 2,3805(1 \pm 0,01) \cdot 1,2974(1 \pm 0,009) = 3,088(1 \pm 0,019) =$$

$$= 3,088 \pm 0,058$$

$$\frac{x}{y} = \frac{2,3805(1\pm0,01)}{1,2974(1\pm0,009)} = 1,8348(1\pm0,019) = 1,8348\pm0,034$$

$$y^{x} = e^{\ln yx} = e^{(2,3805 \pm 0,024) \cdot \ln(1,2974 \pm 0,012)} =$$

$$= e^{(2,3805 \pm 0,024) \cdot (0,2604 \pm 0,003)} = e^{0,6199 \pm 0,028} = 1,8587 \pm 0,054$$

$$\frac{x - \sqrt{y}}{x^{2} + y^{x}} = \frac{(2,3805 \pm 0,024) - (1,139 \pm 0,005)}{(5,6667 \pm 0,119) + (1,8587 \pm 0,054)} = 0,1649 \pm 0,194$$

3 Методы решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

3.1 Разновидности методов решения СЛАУ

Методы решения СЛАУ делятся на две группы:

- 1. Точные методы.
- 2. Приближенные методы (итерационные).

Точные методы решения СЛАУ – методы, при которых через некоторое количество шагов будет получен точный результат при условии, что все действия выполнялись точно (метод Гаусса, метод квадратных корней).

Приближенные методы не позволяют получить точное решение на конечном шаге. Вместо этого, вычисления будут производиться до тех пор, когда будет достигнута нужная точность (метод простой итерации, метод Зейделя).

3.2 Точные методы решения СЛАУ.

3.2.1 Метод Гаусса

Основная идея метода Гаусса:

С помощью элементарных преобразований строк (учитывая правые части) привести исходную матрицу А к треугольному виду.

Метод Гаусса делится на два этапа:

1. Прямой ход (приводим матрицу к треугольному виду)

На этом этапе необходимо занулить коэффициенты под главной диагональю. Для этого следуем следующему алгоритму:

Делим i-ю строку на a_{ii} коэффициент, где i=1,2,...,n. После этого из j-й строки вычитаем i-ю строку, при этом домножая i-ю строку на a_{ji} коэффициент, где j=i+1,i+2,...,n. Продолжать до тех пор, пока i< n. Важно не забывать, что правая часть строки так же участвует в вычислениях.

Для наглядности рассмотрим матрицу после первого шага:

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} & b_3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

И после прохождения полного цикла:

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & 1 & a_{23} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & a_{3n} & b_3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & b_n \end{pmatrix}$$

Если нам встречается $a_{ii}=0$, то меняем строки так, чтобы $a_{ii}\neq 0$. Если же подобный обмен строк невозможен, (т.е. все элементы i столбца ниже диагонали нулевые), то матрица вырожденная. Мы этот случай не рассматриваем.

2. Обратный ход (вычисляем значения переменных)

Все коэффициенты на главной диагонали теперь равны единице, следовательно, мы можем посчитать значение переменных методом подстановки, так как x_n нам уже известен. Для этого

$$x_i = b_i - a_{in} - a_{i[n-1]} - \dots - a_{ii}$$
, где $i = n, n-1, \dots, 1$.

Пример.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 4 & 7 \\ -3 & 2 & 1 & 4 \\ 1 & -3 & 8 & 13 \end{pmatrix} \stackrel{.}{\to} 2 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ -3 & 2 & 1 & 4 \\ 1 & -3 & 8 & 13 \end{pmatrix} II \text{ строка} - I \text{ строка} \cdot (-3) \Rightarrow \\ \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 0.5 & 7 & 14.5 \\ 0 & -2.5 & 6 & 9.5 \end{pmatrix} - \text{шаг } 1.$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 0.5 & 7 & 14.5 \\ 0 & -2.5 & 6 & 9.5 \end{pmatrix} \stackrel{.}{\to} 0.5 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 1 & 14 & 29 \\ 0 & -2.5 & 6 & 9.5 \end{pmatrix} III \text{ строка} - II \text{ строка} \cdot (-2.5) \Rightarrow \\ \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 1 & 14 & 29 \\ 0 & 0 & 41 & 82 \end{pmatrix} - \text{шаг } 2.$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 1 & 14 & 29 \\ 0 & 0 & 41 & 82 \end{pmatrix} \stackrel{.}{\to} 41 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -0.5 & 2 & 3.5 \\ 0 & 1 & 14 & 29 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} - \text{получили } x_3 = 2.$$

Теперь выполняем обратный ход, подставляем полученное значение в уравнения для нахождения остальных переменных:

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 2x_3 = 3.5 \\ x_2 + 14x_3 = 29 \\ x_3 = 2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 2x_3 = 3.5 \\ x_2 = 29 - 14 \cdot 2 = 1 \\ x_3 = 2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 = 3.5 + 0.5 \cdot 1 - 2 \cdot 2 = 0 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = 2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = 2 \end{cases}$$

3.2.2 Модифицированный метод Гаусса

На прямом ходе метода Гаусса в ходе решения системы при обнулении первого столбца ведущим элементом был a_{11} , а ведущим элементом второго столбца – a_{22} .

Отличие метода Гаусса с выбором наибольшего элемента от обычного метода Гаусса состоит в том, что на каждом шаге в качестве ведущего элемента выбирается наибольший по модулю элемент среди возможных (т.е. стоящих не выше главной диагонали). После этого осуществляется перестановка строк, чтобы наибольший ведущий элемент стоял на главной диагонали. Остальные этапы решения аналогичны обычному методу Гаусса.

Превосходство модифицированного метода Гаусса особо ощутимо для СЛАУ больших размеров погрешностей. из-за возможных Модифицированный метод работает лучше.

Пример.

Необходимо поменять строки местами таким образом, чтобы ведущим элементом был максимальный по модулю среди элементов данного столбца, расположенных ниже главной диагонали.

В данном примере вторую строку нужно поставить на место первой.

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & -3 & -8 \\ 3 & 1 & -6 & -9 \\ 1 & -1 & 2 & 5 \end{pmatrix}$$

После перестановки строк местами делаем первый шаг:

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -6 & | & -9 \\ -2 & 1 & -3 & | & -8 \\ 1 & -1 & 2 & | & 5 \end{pmatrix} \stackrel{\div}{\to} 3 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 & | & -3 \\ -2 & 1 & -3 & | & -8 \\ 1 & -1 & 2 & | & 5 \end{pmatrix} \stackrel{II}{II} \text{ строка} - I \text{ строка} \cdot (-2) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 & | & -3 \\ 0 & \frac{5}{3} & -7 & | & -14 \\ 0 & -\frac{4}{3} & 4 & | & 8 \end{pmatrix} -$$
видим, что на главной диагонали и так наибольший по модулю элемент $\left| \frac{5}{3} \right| > \left| -\frac{4}{3} \right|$, значит ничего не меняем и продолжаем вычисления.

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 \\ 0 & \frac{5}{3} & -7 \\ 0 & -\frac{4}{3} & 4 \end{pmatrix} \stackrel{-3}{=} \begin{pmatrix} -3 \\ -14 \\ 8 \end{pmatrix} \div \begin{pmatrix} \frac{5}{3} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & -\frac{4}{3} & 4 \end{pmatrix} \stackrel{-3}{=} \begin{pmatrix} -3 \\ 8 \end{pmatrix} III \text{ строка} - II \text{ строка} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{-3}{=} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{-3}{=} \begin{pmatrix} -3 \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & -2 \\ 0 & 1 & -\frac{21}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{-3}{=} \begin{pmatrix} -3 \\ -\frac{42}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Обратный ход выполняется по тому же принципу:

$$\begin{cases} x_1 + \frac{x_2}{3} - 2x_3 = -3 \\ x_2 - \frac{21x_3}{5} = -\frac{42}{5} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 + \frac{x_2}{3} - 2x_3 = -3 \\ x_2 = -\frac{42}{5} + \frac{21 \cdot 2}{5} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -3 + 2 \cdot 2 = 1 \\ x_2 = 0 \\ x_3 = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 0 \\ x_3 = 2 \end{cases}$$

3.3 Приближенные методы решения СЛАУ

Приближенные методы – методы, у которых точное решение – предел бесконечной последовательности приближений. Эту последовательность мы обрываем в некоторый момент, когда будет достигнута заданная точность.

3.3.1 Нормы векторов и матриц

Пусть x - n-мерный вектор нормой вектора x называется число ||x||, удовлетворяющее аксиомам.

$$||x|| \ge 0$$
, если $||x|| = 0$, то $x = 0 = (0,0,...,0)$
 $||\alpha x|| = a \cdot ||x||$
 $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$ (неравенство треугольников)

Замечание: Норма вектора – фактически его длина.

1. Эвклидова норма

$$||x|| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = ||x||_2}$$

2. Первая норма

$$||x||_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

3. Бесконечная норма

$$||x||_{\infty} = \lim_{p \to \infty} \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} (a_i)^p} = \max|a_i|$$

Пример вычисления бесконечной нормы:

$$||x||_{\infty} = \lim_{p \to \infty} \sqrt[p]{2^p + 5^p} = 5$$

Нормой матрицы А называется число:

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

Теорема 3.1:

О субмультипликативности матричной нормы $||AB|| \le ||A|| \cdot ||B||$

Доказательство по определению нормы.

$$||Bx|| = y$$

$$||AB|| = \max_{||x|| \neq 0} \frac{||ABx||}{||x||} = \max_{||x|| \neq 0} \left(\frac{||ABx||}{||Bx||} \cdot \frac{||Bx||}{||x||} \right) \le \max_{||x|| \neq 0} \frac{||ABx||}{||Bx||} \cdot \max_{||x|| \neq 0} \frac{||Bx||}{||x||} =$$

$$= \max_{||x|| \neq 0} \frac{||Ay||}{||y||} \max_{||y|| \neq 0} \cdot \frac{||Bx||}{||x||} = ||A|| \cdot ||B||$$

Следствие: $||A^k|| \le ||A||^k$

Теорема 3.2: Пусть $A = n \cdot n$ – матрица.

$$||A||_{1} = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||_{1}};$$
$$||A||_{\infty} = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_{\infty}}{||x||_{\infty}};$$

Можно доказать, что первой нормой матрицы, то есть $||A||_1$, будет максимальное значение из суммы модулей элементов столбцов.

$$||A||_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \tag{3.1}$$

Соответственно бесконечная норма матрицы $||A||_{\infty}$ будет максимальное значение из суммы модулей элементов строк.

$$||A||_{\infty} = \max_{i} \sum_{j=1}^{m} |a_{ij}|$$
(3.2)

Пример:

$$\left\| \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ -5 & 6 \end{pmatrix} \right\|_{1} = \max(2 + |-5|, |3| + 6) = 9$$
$$\left\| \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ -5 & 6 \end{pmatrix} \right\|_{\infty} = \max(2 + |-3|, |-5| + 6) = 11$$

Доказательство.

$$\begin{aligned} &\|Ax\|_{1} = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|_{1}} = \max_{x \neq 0} \frac{\sum_{i=1}^{n} |Ax|_{i}}{\sum_{j=1}^{m} |x_{i}|} = \max_{x \neq 0} \frac{\sum_{j=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}x_{j}|}{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}|} \leq \\ &\leq \max_{x \neq 0} \frac{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| |x_{j}|}{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}|} = \max_{x \neq 0} \frac{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}| \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|}{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}|} \leq \\ &\leq \max_{x \neq 0} \frac{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}| \max_{j} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|}{\sum_{j=1}^{m} |x_{j}|} = \max_{j} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \end{aligned}$$

Таким образом, формула (3.1) доказана наполовину. Докажем противоположное неравенство. Для этого достаточно предъявить ненулевой вектор \bar{x} .

$$\begin{split} &\|A\bar{x}\|_1 = C\|\bar{x}\|_1 \;;\\ &\frac{\|A\bar{x}\|_1}{\|\bar{x}\|_1} = C \;;\\ &\text{Так как } \|A_1\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|A\bar{x}\|_i}{\|\bar{x}\|_i} \geq C \;; \end{split}$$

В качестве вектора \bar{x} рассмотрим вектор, в котором все координаты равны нулю, кроме координаты j_0 , где j_0 — номер столбца в котором достигается максимальная сумма.

Доказательство.

$$\begin{aligned} lj_0 &= (0, \dots, 0, 1, \dots, 0) \ A \cdot \bar{x} = A lj_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1j_0} \\ \vdots \\ a_{nj_0} \end{pmatrix} \\ \|\bar{x}\|_1 &= 1; \\ \|\overline{Ax}\|_i &= \sum_{i=1}^n (a_{ij_0}) \end{aligned}$$

3.3.2 Метод простой итерации

Пусть СЛАУ задана квадратичной невырожденной матрицей $A=n\times n$ и вектором свободных членов B.

$$Ax = B$$

Предположим, что все диагональные элементы матрицы A не равны 0. Приведем матрицу к более удобному виду:

Поделим i строки СЛАУ на соответствующие диагональные элементы, равные a_{ii} , где i=1,2,...,n. Получим СЛАУ, аналогичную данной, диагональные элементы которой будут состоять из единиц.

Представим матрицу A как сумму матриц A = E + C

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

С – имеет нулевую диагональ.

$$C = \begin{pmatrix} 0 & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Исходную СЛАУ представляем в виду:

$$(E+C)\cdot x=B$$

$$E \cdot x + C \cdot x = B$$

$$x + C \cdot x = B$$

x = B - Cx (3.3) вид удобный для интеграции

Рассмотрим итерационный процесс:

 $x^{(k+1)} = b - Cx^{(k)}$ (3.4) по вектору $x^{(k)}$, k —порядок интеграции. Стартовый вектор $x^{(0)}$ задается произвольно, обычно равный 0.

Теорема 3.3. Если итерационный процесс сходится, то есть существует предельный вектор $x^{(\infty)} = \lim_{k \to \infty} x^{(k)}$, то этот предел и будет решением исходной СЛАУ (3.3).

$$x^{(\infty)} = b - Cx^{(\infty)} \tag{3.5}$$

Доказательство.

Рассмотрим формулу (3.4) и прейдем в ней к пределу:

$$x^{(k+1)} = b - Cx^{(k)} \lim_{k \to \infty} x^{(k)} = x^{(\infty)}$$

$$\lim_{k \to \infty} x^{(k+1)} = \lim_{k \to \infty} (b - Cx^{k}) = b - C\lim_{k \to \infty} x^{(k)} = b - Cx^{(\infty)}$$

Теперь необходимо решить вопрос о том, когда итерационный процесс (3.4) сходится. Ответ на этот вопрос дает теорема 3.4

Теорема 3.4. Достаточное условие сходимости итерационного процесса. Если $\|C\| < 1$ (любая норма 1, 2, ..., ∞), то итерационный процесс (3.4) – сходится.

То есть, перед решением СЛАУ необходимо проверить, что каждый элемент главной диагонали по модулю больше, чем сумма модулей элементов этой строки.

Доказательство.

Рассмотрим поведение итерационного процесса (3.4)

$$x^{(1)} = b - x^{(0)}$$

$$x^{(2)} = b - Cx^{(1)} = b - C \cdot (b - Cx^{(0)}) = b \cdot Cb + C^2 \cdot x^{(0)}$$

$$x^{(n)} = b - Cb + C^2b - C^3b + (-1)^{n-1} \cdot C^{n-1}b + (-1)^n \cdot C^nx^{(0)} = \left(\sum_{i=0}^{n-1} (-1)^i C^i\right) \cdot b + (-1)^n \cdot C^n \cdot x^{(0)}$$

Чтобы доказать сходимость последовательности $x^{(n)}$, докажем, что последовательность фундаментальная, то есть для неё выполняется условие:

$$\forall \varepsilon > 0. \exists N, \forall k, l \ge N, ||x^{(k)} - x^{(l)}|| < \varepsilon,$$

при $||x^{(k)} - x^{(l)}|| \to 0; k, l \to \infty$ (3.6)

Чтобы доказать формулу (3.6) будем считать, что k > l и подставим выражение для $x^{(k)} - x^{(l)}$ из формулы (3.5).

$$|| \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^{i} C^{i} b + (-1)^{k} C^{k} \cdot x^{(0)} - \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^{i} C^{i} \cdot b \cdot (-1)^{l} \cdot C^{l} x^{(0)} || =$$

$$= || \sum_{i=l}^{x-1} (-1)^{i} C^{i} b + (-1)^{k} C^{k} \cdot x^{(0)} - (-1)^{l} \cdot C^{l} x^{(0)} ||$$

(Неравенство треугольников + свойство):

$$||Ax|| \le ||A|| \cdot ||x||$$

Получаем:

$$\sum_{i=0}^{k-1} \|C^{i}\| \cdot \|b\| + \|C^{i}\| \cdot \|x^{(0)}\| + \|C^{l}\| \cdot \|x^{(0)}\|$$

$$\sum_{i=0}^{k-1} \|C^{i}\| \cdot \|b\| + \|C^{i}\| \cdot \|x^{(0)}\| + \|C^{l}\| \cdot \|x^{(0)}\| \le \left(\sum_{i=l}^{k-1} \|C\|^{i} \cdot \|b\| + \|C\|^{k} + \|C\|^{l}\right) \cdot \|x^{(0)}\|$$

По формуле геометрической погрешности со знаменателем $q = \|C\|$

так как $\|C\|^k \to 0$, $\|C\|^l \to 0$

Теорема доказана

$$x^{(k)} - x^{(l)} = \frac{\|c\|^k - \|c\|^l}{\|c\| - 1} \cdot \|b\| \to 0$$
(3.7)

Следствие: Если ||C|| < 1, то МПИ сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q=||C||. Считаем, что стартовый вектор $x^{(0)}=0$, имеет место формула:

$$||x^{(k)} - x^{\infty}|| \le \frac{||C||^k}{1 - ||C||} \cdot ||b||$$
 (3.8)

Чтобы доказать (3.8) надо в формулу (3.7) вместо \boldsymbol{l} подставить ∞ . При этом $\|\boldsymbol{C}\|^{\infty}=0$. Получим исходную формулу (3.8), учитывая, что $\boldsymbol{x}^{(0)}=0$

Следствие: Если задана допустимая погрешность ε (то есть нам надо найти решение, отличающаяся от точного значения по норме не больше чем на ε), то для этого нам достаточно сделать N шагов, где N вычисляется по формуле (3.9)

$$N = \left\lceil \log_{\|C\|} \left(\frac{(1 - \|C\|)\varepsilon}{\|b\|} \right) \right\rceil = \left\lceil \frac{\ln \frac{(1 - \|C\|)\varepsilon}{\|b\|}}{\ln \|C\|} \right\rceil, \tag{3.9}$$

где [x] — округление вещественного числа x вверх до ближайшего целого, например [2,2]=3.

Доказательство: Решим неравенство для оценки погрешности итерации относительно k.

$$\begin{aligned} \left\| x^{(k)} - x^{\infty} \right\| &\leq \frac{\|C\|^{k}}{1 - \|C\|} \cdot \|b\| \leq \varepsilon \\ \|C\|^{k} &\leq \frac{(1 - \|C\|)\varepsilon}{\|b\|}; \qquad k \geq \log_{\|C\|} \frac{(1 - \|C\|)\varepsilon}{\|b\|}; \end{aligned}$$

Откуда и получаем искомое выражение $N = \left\lceil \log_{\|C\|} \frac{(1-\|C\|)\varepsilon}{\|b\|} \right\rceil$.

Формула (3,9) дает точную оценку необходимого количества итераций. То есть при выполнении N шагов мы гарантированно получаем заданную точность ε .

Зачастую на практике используют другой метод, который в теории уступает по точности данному, но тем не менее его вполне хватает.

Этот заключается в том, что на каждой итерации будем считать разницу между настоящим и предыдущим векторами

$$\Delta x = \left| x^k - x^{k-1} \right| = \sqrt{(x_1^k - x_1^{k-1})^2 + (x_2^k - x_2^{k-1})^2 + (x_3^k - x_3^{k-1})^2}$$
 (3.10)

и если $\Delta x \leq \varepsilon$, то точность достигнута, и результатом будет последний рассчитанный вектор x^k .

Пример.

Исходная СЛАУ:

$$\begin{cases} 5x_1 - x_2 - x_3 = 3 \\ -x_1 - 3x_2 = 7 \\ x_1 + x_2 + 4x_3 = 3 \end{cases} \qquad \varepsilon = 10^{-4}$$

Приведем СЛАУ к матричному виду и разделим строки на соответствующие элементы главной диагонали:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & -1 & -1 & | & 3 \\ -1 & -3 & 0 & | & 7 \\ 1 & 1 & 4 & | & 3 \end{pmatrix} \div 5 \\ \vdots & (-3) \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{5} & -\frac{1}{5} & | & \frac{3}{5} \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 & | & -\frac{7}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 1 & | & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

Теперь проведем проверку условия сходимости:

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{5} & -\frac{1}{5} & \frac{3}{5} \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 & -\frac{7}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 1 & \frac{3}{4} \end{pmatrix} 1 > \begin{vmatrix} -\frac{1}{5} & | & + & -\frac{1}{5} \\ 1 & -\frac{1}{5} & | & + & -\frac{1}{5} \\ 1 & 1 & -\frac{1}{3} & | & + & \frac{1}{4} \\ 1 & 1 & -\frac{1}{4} & | & + & \frac{1}{4} \end{vmatrix}$$

Приводим СЛАУ к удобному для решения виду

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{5} & -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

Возьмем стартовый вектор $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$;

Вычисляем:

$$x^{(1)} = b - cx^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{5} & -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

$$x^{(2)} = b - cx^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{5} & -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{19}{60} \\ \frac{2}{10} \\ -\frac{13}{30} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{60} \\ -\frac{38}{15} \\ \frac{71}{60} \end{pmatrix}$$

Делаем проверку:

$$\Delta x = \sqrt{\left(\frac{17}{60} - \frac{3}{5}\right)^2 + \left(-\frac{38}{15} - \left(-\frac{7}{3}\right)\right)^2 + \left(\frac{71}{60} - \frac{3}{4}\right)^2} = 0,2569$$

 $\Delta x > \varepsilon$, значит продолжаем вычисления.

3.3.3 Метод Зейделя

Отличие метода Зейделя от МПИ состоит в том, что при вычислении координат вектора $x^{(k+1)}$, мы используем не только координаты вектора $x^{(k)}$ с предыдущего шага, но и уже найденные координаты вектора $x^{(k+1)}$. Запишем формулы МПИ не в матричной, а в координатной записи.

$$x^{(k+1)} = b - Cx^{(k)} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ C_{n1} & C_{n2} & C_{n2} & C_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

$$x_1^{(k+1)} = b_1 - (C_{11}x_1^{(k)} + C_{12}x_2^{(k)} + C_{13}x_3^{(k)} + \dots + C_{1n}x_n^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = b_2 - (C_{21}x_1^{(k)} \cdot C_{22}x_2^{(k)} + C_{23}x_3^{(k)} + \dots + C_{2n}x_n^{(k)})$$

$$x_3^{(k+1)} = b_3 - (C_{31}x_1^{(k)} + C_{32}x_2^{(k)} + C_{33}x_3^{(k)} + \dots + C_{3n}x_n^{(k)})$$

$$\dots$$

$$x_n^{(k+1)} = b_n - (C_{n1}x_1^{(k)} + C_{n2}x_2^{(k)} + C_{n3}x_3^{(k)} + \dots + C_{nn}x_n^{(k)})$$

$$A \text{ вот так выглядит формула метода Зейделя:}$$

$$x_1^{(k+1)} = b_1 - (C_{11}x_1^{(k)} + C_{12}x_2^{(k)} + C_{13}x_3^{(k)} + \dots + C_{1n}x_n^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = b_2 - (C_{21}x_1^{(k+1)} + C_{22}x_2^{(k)} + C_{23}x_3^{(k)} + \dots + C_{2n}x_n^{(k)})$$

$$x_3^{(k+1)} = b_3 - (C_{31}x_1^{(k+1)} + C_{32}x_2^{(k+1)} + C_{33}x_3^{(k)} + \dots + C_{3n}x_n^{(k)})$$

$$x_n^{(k+1)} = b_n - (C_{n1}x_1^{(k+1)} + C_{n2}x_2^{(k+1)} + C_{n3}x_3^{(k+1)} + \dots + C_{nn}x_n^{(k)})$$

Аналогично, достаточным условием сходимости метода Зейделя будут: теорема 3.4, или условие диагонального преобразования по строке или по столбцам для матрицы.

Пример.

$$\begin{pmatrix} 10 & -3 & 1 & | & -1 \\ -2 & 10 & 2 & | & 14 \\ 2 & 1 & -5 & | & -9 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 10 & -3 & 1 & | & -1 \\ -2 & 10 & 2 & | & 14 \\ 2 & 1 & -5 & | & -9 \end{pmatrix} \stackrel{I}{II} \stackrel{CTPOKA}{CTPOKA} \stackrel{.}{\div} \stackrel{10}{10} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{3}{10} & \frac{1}{10} & | & -\frac{1}{10} \\ -\frac{2}{10} & 1 & \frac{2}{10} & | & \frac{14}{10} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{1}{5} & 1 & | & \frac{9}{5} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^1 = -0, 1 - (-0, 3 \cdot 0 + 0, 1 \cdot 0) = -0, 1 \\ x_2^1 = 1, 4 - (-0, 2 \cdot (-0, 1) + 0, 2 \cdot 0) = 1, 38 \\ x_3^1 = 1, 8 - (-0, 4 \cdot (-0, 1) + (-0, 2) \cdot 1, 38) = 2, 036 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^2 = -0, 1 - (-0, 3 \cdot 1, 38 + 0, 1 \cdot 2, 036) = 0, 1104 \\ x_2^2 = 1, 4 - (-0, 2 \cdot 0, 1104 + 0, 2 \cdot 2, 036) = 1, 01488 \\ x_3^2 = 1, 8 - (-0, 4 \cdot 0, 1104 + (-0, 2) \cdot 1, 01488) = 2, 04714 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^3 = -0, 1 - (-0, 3 \cdot 1, 01488 + 0, 1 \cdot 2, 04714) = -0, 00025 \\ x_2^3 = 1, 4 - (-0, 2 \cdot (-0, 00025) + 0, 2 \cdot 2, 04714) = 0, 99007 \\ x_3^3 = 1, 8 - (-0, 4 \cdot (-0, 00025) + (-0, 2) \cdot 0, 99007) = 1, 99701 \end{pmatrix}$$

3.4 Оценки трудоемкости решения СЛАУ различными методами

Метод Гаусса состоит из двух независимых частей — прямого и обратного хода. Трудоемкость прямого хода метода Гаусса будет порядка Cn^3 , так как в прямом ходе метола Гаусса будут три вложенных друг в друга цикла порядка n. В обратном ходе у нас будут два вложенных цикла, поэтому трудоемкость обратного метода Гаусса будет Cn^2 . Итого общая трудоемкость метода Гаусса $Cn^3 + Cn^2 = Cn^3$.

Трудоемкость метода простой интеграции, а также метода Зейделя – Cn^2N , где Cn^2 – трудоемкость одной операции (произведения матрицы на столбец),

N – число итераций, которое зависит от заданной точности. В том случае, если n мало, выгоднее применить метод Гаусса, если же n велико, то будет эффективнее использовать итерационные методы.

4 Методы решения нелинейных уравнений и систем нелинейных уравнений (НУ и СНУ)

4.1 Постановка задачи

Мы должны научиться решать нелинейные уравнения, то есть уравнение вида f(x) = 0, где f — некоторая непрерывная нелинейная функция. И системы нелинейных уравнений, то есть системы вида

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

Также, как и при решении систем линейных уравнений будем рассматривать только квадратные СНУ (т.е, когда число уравнений равно числу неизвестных).

4.2 Метод половинного деления (МПД)

Метод половинного деления, или бисекции — простейший метод решения нелинейных уравнений. Как известно из математического анализа, если непрерывная функция на концах интервала [a,b] принимает значение разных знаков, т.е. $f(a) \cdot f(b) < 0$, то на интервале [a,b] найдется хотя бы одна точка $c \in [a,b]$, такая, что f(c) = 0. Для нахождения корня уравнения, точки c, будет применять алгоритм МПД:

- 1. Находим интервал [a,b], на котором функция меняет свой знак, т.е $f(a) \cdot f(b) < 0$
 - 2. Делим точкой *c* интервал [a,b] пополам. $c = \frac{a+b}{2}$.
- 3. Из 2-х новых интервалов [a,c] и [c,b] выбираем тот, на котором происходит смена знака. На этой половине и будет находится искомый корень.
- 4. Повторяем до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность, пока половина длины последнего интервала не станет меньше ε , то есть не станет выполняться условие $\frac{(b-a)}{2} < \varepsilon$.

(4.1)

5. В качестве решения возьмем середину последнего интервала, то есть $x=\frac{(b+a)}{2}$. Расстояние от точки x до любой другой точки этого интервала не превосходит половины длины последнего интервала, то есть $\frac{(b-a)}{2}$, т. е ε

Замечание. В приведенном выше методе мы контролируем точность по x, т.е добиваемся чтобы выполнялось условие $|x-x_{\text{точное}}|<\varepsilon$. Иногда вместо контроля точности по x осуществляют контроль точности по y т.е следят за выполнением требования $|f(x)|<\varepsilon$.

Обычно под наперед заданной точностью подразумевается точность по x.

Пример.

$$x^2 - 3 = 0$$
, [1; 2], $\varepsilon = 10^{-3}$.
IIIar 1 – [1; 2]

$$c = \frac{a+b}{2} = \frac{1+2}{2} = 1,5$$

Делаем проверку $\frac{|2-1|}{2} > \varepsilon$, продолжаем расчеты.

[1; 1,5]
$$f(a) \cdot f(c) = -2 \cdot (-0.75) = 1.5$$

$$[1,5;2] \, f(c) \cdot f(b) = (-0,75) \cdot 1 = -0,75 \,\, o \,\, (-0,75) < 0,$$
 значит

сдвигаем левый край отрезка, т.е. присваиваем переменной a значение точки c=1.5.

IIIar 2 - [1,5; 2]

$$c = \frac{1,5+2}{2} = 1,75$$

$$\frac{|2-1,5|}{2} > \varepsilon$$

$$[1,5; 1,75]f(a) \cdot f(c) = -0,75 \cdot 0,0625 = -0,0469$$

$$[1,75; 2] f(c) \cdot f(b) = 0,0625 \cdot 1 = 0,0625$$
IIIar 3 - [1,5; 1,75]

$$c = \frac{1,5+1,75}{2} = 1,625$$

$$\frac{|1,75-1,5|}{2} > \varepsilon$$

$$[1,5; 1,625] f(a) \cdot f(c) = -0,75 \cdot (-0,36) = 0,27$$

$$[1,625; 1,75]f(c) \cdot f(b) = (-0,36) \cdot 0,0625 = -0,0225$$
IIIar 4 - [1,625; 1,75]

$$c = \frac{1,625+1,75}{2} = 1,6875$$

$$\frac{|1,75-1,625|}{2} > \varepsilon$$

$$[1,625; 1,6875]f(a) \cdot f(c) = -0,36 \cdot 2,848 = -1,025$$

$$[1,6875; 1,75] f(c) \cdot f(b) = 2,848 \cdot 0,0625 = 0,178$$

4.3 Метод хорд

Пусть на отрезке [a,b] функция f(x) меняет знак всего один раз и не имеет точек перегиба (т.е. ее вторая производная не меняет знака).

Если в $M\Pi\Pi$ на каждом шаге в качестве претендента на роль корня выбиралась середина интервала — точка c, то в методе хорд в качестве точки c

выбирается точка пересечения хорды, соединяющая точки A(a, f(a)) и B(b, f(b)) с осью Ox, как показано на рисунке 4.1.

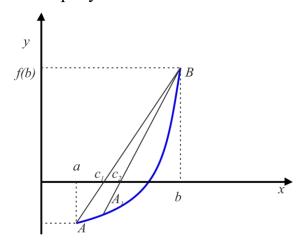


Рис. 4.1 – графическое представление метода хорд

Из полученных интервалов [a, c] и [c, b] выбираем тот, на котором происходит смена знака.

Замечание. Отличие от МПД состоит в критерии прерывания. Как видно из рисунка 4.1, в методе хорд длина интервала не стремится к 0. Как правило, одна граница интервала сохраняется неизменной, а другая достаточно быстро стремится к $x_{\text{точное}}$, следовательно критерий прерывания (4.1) не сработает. По этой причине применяют универсальный критерий прерывания: если разница двух последних значения $|C^{(i)} - C^{(i-1)}| \le \varepsilon$ (4.2), то в качестве решения нелинейного уравнения берем последний C_i .

При этом будет выполняться искомое требование: $|\mathcal{C}^{(i)} - x_{\text{точное}}| < \varepsilon$.

В принципе, универсальный критерий прерывания можно использовать и в других итерационных методах, хоть для решений HY и CHY, хоть для решения CЛAY. Как правило, этот критерий успешно работает. Обычно так и поступают, если нет других способов отследить достижение заданной точности.

Как искать точку c в методе хорд:

Напишем уравнение хорды, проходящей через точки (a, f(a)) и (b, f(b))

$$\frac{y-f(b)}{x-h} = \frac{y-f(a)}{x-a}.$$

Приравниваем в этом уравнении y = 0 и находим x, который берем в качестве c

$$c = \frac{f(b) \cdot a - f(a) \cdot b}{f(b) - f(a)} \tag{4.3}$$

Пример.

$$x^2 - 3 = 0$$
, $[1; 2]$, $c^0 = 0$, $\varepsilon = 10^{-3}$.

Шаг 1

$$c^{(1)} = \frac{a \cdot f(b) - b \cdot f(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{1 \cdot 1 - 2 \cdot (-2)}{1 - (-2)} = \frac{5}{3} = 1,6667$$

Проводим проверку критерия прерывания (4.2)

 $\left|c^{(1)}-c^{(0)}\right|=1,6667 \to 1,6667 > \varepsilon$, заданная точность не достигнута, значит продолжаем вычисления.

$$[1; 1,6667] f(a) \cdot f(c) = 0,4442$$

 $[1,6667;2] f(c) \cdot f(b) = -0,2221 \rightarrow (-0,2221) < 0$, значит сдвигаем левый край отрезка. И так как в методе хорд приближение всегда идет с одного края, больше нет необходимости производить эту проверку.

Шаг 2

$$c^{(2)} = \frac{1,6667 \cdot 1 - 2 \cdot (-0,2221)}{1 - (-0,2221)} = 1,7273$$

$$\left|c^{(2)}-c^{(1)}\right|=|1,7273-1,6667|=0,0606 \rightarrow 0,0606>\varepsilon$$

Шаг 3

$$c^{(3)} = \frac{1,7273 \cdot 1 - 2 \cdot (-0,164)}{1 - (-0,0164)} = 1,7317$$

$$\left|c^{(3)}-c^{(2)}\right| = |1,7317-1,7273| = 0.0044 \ \to \ 0.0044 > \varepsilon$$

Шаг 4

$$c^{(4)} = \frac{1,7317 \cdot 1 - 2 \cdot (-0,0012)}{1 - (-0,0012)} = 1,73202$$

$$\left|c^{(4)}-c^{(3)}\right|=|1,73202-1,7317|=0,00032\ \to\ 0,00032<\varepsilon,$$

следовательно алгоритм достиг заданной точности и значение $x = c^{(4)} = 1,73202$.

4.4 Метод касательных (Ньютона)

Как и в методе хорд условия остаются теми же. На отрезке [a, b] функция f(x) меняет знак всего один раз и не имеет точек перегиба.

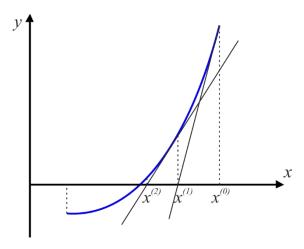


Рис. 4.2 – графическое представление метода Ньютона

Берем за $x^{(0)}$ один из концов отрезка, строим касательную к графику функции f(x) в этой точке. Пересечение касательной и оси Ox как раз и будет следующей точкой приближения $x^{(1)}$. Теперь проводим касательную в точке $x^{(1)}$ и так до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность по правилу (4.2).

Теперь необходимо понять, как выбрать, какой из концов отрезка брать за начальную точку.

Теорема 4.1. Если знак f(a) совпадает со знаком f''(a), то берем за $x^{(0)}$ точку a, иначе точку b.

Теорема 4.2. Если знак приращения аргумента положительный, то знак приращения функции второго порядка и знак второй производной будут совпадать.

Замечание. При реализации алгоритма может быть затруднительным использование в расчетах второй производной. Поэтому легче будет сравнивать знак функции с ее приращением второго порядка.

Приращения функции первого порядка в нашем случае выглядят следующим образом:

$$\Delta f(a) = f(a+h) - f(a), \tag{4.4}$$

$$\Delta f(a+h) = f(a+2h) - f(a+h),$$
 (4.5)

где h — приращение аргумента, h > 0 и достаточно мало, например . $h = \frac{b-a}{100}$.

Из формул (4.4) и (4.5) можем получить формулу приращения второго порядка:

$$\Delta^{2} f(a) = f(a+2h) - 2f(a+h) + f(a). \tag{4.6}$$

Теперь рассмотрим уравнение касательной:

$$y = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

Приравниваем y = 0, получаем $x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

Итак, окончательная формула метода Ньютона:

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, k = 1, 2, ...$$
 (4.7)

Пример.

$$x^2 - 3 = 0$$
, [1; 2], $\varepsilon = 10^{-3}$.

Подготовка:

Посчитаем первую производную функции f(x):

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

Подставляем значение левого края в функцию:

$$f(a) = 1^2 - 3 = -2$$

Проверим, можем ли мы взять эту точку за начальный x_0 с помощью (4.6):

$$h = \frac{b-a}{100} = \frac{2-1}{100} = 0.01$$

$$\Delta^2 f(a) = f(1.02) - 2f(1.01) + f(1) = 0.0002,$$

Так как знаки $f(a) \neq \Delta^2 f(a)$, то выбираем за начальную точку правый край отрезка $x_0 = b$.

Шаг 1

Теперь посчитаем x_1 исходя из (4.7):

$$x^{1} = 2 - \frac{f(2)}{f'(2)} = 2 - \frac{1}{4} = 1,75$$

Сравним результаты и проверим на условие прерывания (4.2):

$$|1,75-2| = 0.25$$
 → $0,25 > \varepsilon$, значит продолжаем вычисления.

Шаг 2

$$x^2 = 1,75 - \frac{f(1,75)}{f'(1,75)} = 1,75 - \frac{0,0625}{3.5} = 1,73214$$

$$|1,732 - 1,75| = 0.018 \rightarrow 0.018 > \varepsilon$$

Шаг 2

$$x^3 = 1,73214 - \frac{f(1,73214)}{f'(1,73214)} = 1,73214 - \frac{-0,000176}{0,464} = 1,73216$$

 $|1,73216-1,73214|=0.00002 \rightarrow 0.00002 < \varepsilon,$ следовательно x_3 является ответом.

4.5 Скорости сходимости методов решения нелинейных уравнений

4.5.1 Скорость сходимости МПД

На каждом шаге длина интервала [a, b] уменьшается вдвое, следовательно, и возможная погрешность уменьшается вдвое, а именно за k шагов получаем оценку погрешности

$$\varepsilon \le \left| \frac{b-a}{2^{k+1}} \right|$$

Решаем это неравенство относительно k. Получаем $k \ge \log_2 \left| \frac{b-a}{\varepsilon} \right| - 1$. Следовательно, для достижения заданной точности необходимо сделать N шагов, где $N = \left\lfloor \log_2 \left| \frac{b-a}{\varepsilon} \right| \right\rfloor$. Здесь $\lfloor x \rfloor$ — округление числа x до целого значения вниз, например $\lfloor 2,8 \rfloor = 2$.

Таким образом, МПД сходится со скоростью геометрической погрешности со знаменателем 1/2. Для нахождения каждого верного десятичного знака, (т.е., для уменьшения погрешности в 10 раз), понадобится 3—4 шага итерации.

4.5.2 Скорость сходимости метода хорд

Теорема 4.3. Если на интервале [a, b] функция f непрерывна и дифференцируема, а ее производная f' на этом интервале имеет постоянный знак (т.е., f монотонна), то верна следующая оценка:

$$\left| \chi_{\text{точн}} - \chi^{(k+1)} \right| \le \frac{M_1 - m_1}{m_1} \left| \chi^{(k)} - \chi^{(k+1)} \right|,$$
 (4.8)

где $x^{(k)}$ – решение, найденное на k-том шаге метода хорд,

 $x_{\text{точн}}$ – решение уравнения

 ${\rm M_{1}}$ — тах модуля первой производной, т.е.

$$M_1 = \max_{t \in [a,b]} |f'(t)|, \quad m_1 = \min_{t \in [a,b]} |f'(t)|$$

Следствие. Если M_1 близко к m_1 , т.е. $M_1 \leq 2m_1$, и если $|x^{(k)} - x^{(k+1)}| < \varepsilon$, то $|x_{(k)} - x_{\text{точн}}| < \varepsilon$, т.е. универсальный критерий прерывания срабатывает корректно.

Теорема 4.4. Скорость сходимости в методе хорд не хуже геометрической прогрессии со знаменателем $\frac{M_1-m_1}{m_1}$, а именно имеет место следующая оценка:

$$\left|x^{(k)} - x^{(k+1)}\right| \le \left(\frac{M_1 - m_1}{m_1}\right)^k \cdot const$$

Если M_1 очень близко к m_1 , то есть $M_1 \le 1,1 m_1$, то по теореме 4.4, скорость сходимости в методе хорд будут не хуже геометрической прогрессии со знаменателем 0, 1, что лучше чем в МПД.

Близость M_1 и m_1 можем обеспечить за счет сужения интервала, на котором работаем (чем меньше интервал, тем ближе M_1 и m_1). Но, как мы знаем, в методе хорд длина интервала к нулю не стремится, поэтому выгодно комбинировать МПД и метод хорд. В целом метод хорд работает лучше, чем МПД.

4.5.3 Скорость сходимости метода Ньютона

Теорема 4.5. Если функция f(x) непрерывна и дифференцируема на отрезке [a, b], и f' и f'' не меняют своих знаков на интервале [a, b], т.е. функция f(x) монотонная и не меняет характер выпуклости, то имеет место следующее неравенство:

$$|x_k - x_{\text{точн}}| \le \frac{1}{2} \cdot \frac{M_2}{m_1} |x_k - x_{\text{точн}}|^2,$$
 (4.9)
где $M_2 = \max_{t \in [a,b]} |f''(t)|, \quad m_1 = \min_{t \in [a,b]} |f'(t)|$

Пусть $\frac{1}{2} \cdot \frac{M_2}{M_1} \le 1$, тогда количество верных десятичных знаков будет с каждым шагом удваиваться. Это достигается благодаря 2 в показателе степени в формуле (4.9). Итак, метод Ньютона по скорости сходимости самый быстрый, т.е. быстрее МПД и метода хорд.

4.6 Вариации метода Ньютона

4.6.1 Комбинированный метод Ньютона

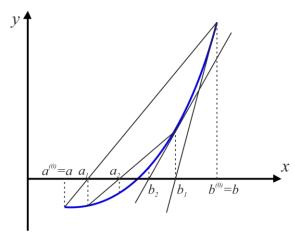


Рис. 4.3. – графическое представление комбинированного метода Ньютона

Как видно из рисунка 4.3 метод хорд дает приближение с вогнутой стороны кривой, а метод Касательных, с внешней. Таким образом условие

прерывания выглядит следующим образом $b_k - a_k < \varepsilon$ где b – край, рассчитанный по методу касательных, а a – по методу хорд, если выполнено условие, что знаки f(b) и f''(b) равны и положительны (т.е. $f(b) \cdot f''(b) > 0$).

4.6 Многомерный метод Ньютона

МПД и метод Хорд применимы для решения НУ. Многомерный метод Ньютона предназначен для решения СНУ.

$$\begin{cases} f_1(x_1,...,x_n)=0\\ f_n(x_1,...,x_n)=0 \end{cases}$$

F(x) = 0 – в векторном виде. F(x) – вектор функции; $x = (x_1, ..., x_n)$. Поступаем для решения СНУ таким же образом, как и при решении нелинейных уравнений.

Выбираем близкие к решению стартовые значения x_0 . Вспомним из курса математического анализа уравнение касательной:

$$f(x) = f(x^{(0)}) + f'(x^{(0)}) \cdot (x - x^{(0)}) = 0$$
$$x = x^{(0)} - \frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})}$$

Аналогично поступаем для функции нескольких переменных, только вместо f'(x) — используем дифференциал функции нескольких переменных.

$$F(x) = F(x^{(0)}) + F'(x^{(0)}) \cdot (x - x^{(0)}) = 0$$
 (4.10) векторный ноль.

Все производные берутся в точке $x^{(0)}$.

$$F'(x^{(0)}) = W|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Из формулы (4.10) выражаем *х*:

$$F(x^{(0)}) = F(x^{(0)}) + W|_{x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) = 0$$

$$x = x^{(0)} - W^{-1}|_{x^{(0)}} \cdot F(x^{(0)}), \text{получаем}$$

$$W|_{x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) = -F(x_{(0)})$$

$$W^{-1}|_{x^{(0)}} \cdot W|_{x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) = -W^{-1}|_{x^{(0)}} \cdot F(x^{(0)})$$

Так получаем формулу многомерного метода Ньютона

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - W^{-1}|_{x^{(i)}} \cdot F(x^{(i)})$$
(4.11)

Замечание. Есть два способа реализовать вычисления решения СНУ методом Ньютона:

- 1. На каждом шаге вычислять матрицу Якоби $W|_{x^{(0)}}$ и обратную $W^{-1}|_{x^{(0)}}$. Для этого поступим следующим образом, к исходной матрице $W|_{x^{(0)}}$ приписываем справа единичную матрицу E. Затем с помощью преобразований строк расширенной матрицы (как в методе Гаусса) в левой части вместо W получим единичную матрицу E. При этом в правой части вместо E мы получим искомую обратную матрицу.
- 2. Этот метод более эффективный. Заметим, что нам для реализации вычислений по формуле (4.11) вовсе не надо знать $W^{-1}|_{X_i}$, а нужно знать $Y^{(i)} = W|_{x^{(i)}} \cdot F(x^{(i)})$.

$$W|_{x^{(i)}} \cdot Y^{(i)} = F(x^{(i)}) \tag{4.12}$$

Получаем СЛАУ размером $n \times n$ с известной матрицей $W|_X$ и правой частью $F(x^{(i)})$.

Итак, приходим к выводу по (4.11). Метод делать следующим образом:

1. Решать СЛАУ (4.12) для не нулевого вектора Y_i .

2.
$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - Y^{(i)}$$

Пример.

$$\begin{cases} x^2 + y^2 - 13 = 0 \\ xy - 4 = 0 \end{cases} \qquad x^{(0)} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} \leftarrow x \\ \leftarrow y$$

Шаг 1 – через обратную матрицу

$$F = \begin{pmatrix} x^2 + y^2 - 13 \\ xy - 4 \end{pmatrix}$$

Построим матрицу Якоби частных производных, для этого продифференцируем матрицу F:

$$W = \begin{pmatrix} f'(x) & f'(y) \\ f'(x) & f'(y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x & 2y \\ y & x \end{pmatrix}$$

Подставим значения из вектора X_0 в нашу систему и получим следующий вектор:

$$F(x^{(0)}) = {3^2 + 1^2 - 13 \choose 3 \cdot 1 - 4} = {-3 \choose -1}$$

Подставляем значения из вектора $x^{(0)}$ в матрицу Якоби:

$$W|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Вычисляем ее определитель:

$$\Delta W|_{x^{(0)}} = 6 \cdot 3 - 1 \cdot 2 = 16$$

Строим матрицу минимумов – исключаем по очереди каждый элемент матрицы, а вместе с ним строку и столбец и на его место записываем оставшийся элемент:

$$W|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & \\ & 3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} & 2 \\ 2 & & 6 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 6 & \\ & 6 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$$

Выполняем алгебраическое дополнение — можно не углубляться в процесс и просто привести матрицу в следующий вид (только для матриц 2х2):

$$W|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -2 & 6 \end{pmatrix}$$

Транспонируем матрицу:

$$W^T|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 6 \end{pmatrix}$$

И теперь делим матрицу на определитель и получаем обратную матрицу:

$$W^{-1}|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} \frac{3}{16} & -\frac{2}{16} \\ -\frac{1}{16} & \frac{6}{16} \end{pmatrix}$$

Подставляем, считаем, получаем приближенное значение:

$$x^{(1)} = {3 \choose 1} - \begin{pmatrix} \frac{3}{16} & -\frac{2}{16} \\ -\frac{1}{16} & \frac{6}{16} \end{pmatrix} \cdot {3 \choose -1} = {3 \choose 1} - \begin{pmatrix} -\frac{7}{16} \\ \frac{3}{16} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{55}{16} \\ \frac{19}{16} \end{pmatrix}$$

Шаг 1 – через СЛАУ

$$F = \begin{pmatrix} x^2 + y^2 - 13 \\ xy - 4 \end{pmatrix}$$

Так же, как и в первом случае считаем матрицу Якоби и подставляем в нее значения

$$W = \begin{pmatrix} f'(x) & f'(y) \\ f'(x) & f'(y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x & 2y \\ y & x \end{pmatrix} \rightarrow W|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Подставим значения в систему:

$$F(x^{(0)}) = {3^2 + 1^2 - 13 \choose 3 \cdot 1 - 4} = {-3 \choose -1}$$

Теперь не трудно заметить, что матрица $W|_{x^{(0)}}$ и вектор системы $F(X_0)$ образуют дополненную матрицу обычно СЛАУ:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 | -3 \\ 1 & 3 | -1 \end{pmatrix}$$

Решаем данное СЛАУ любым удобным методом и получаем ответ:

$$\begin{pmatrix} -\frac{7}{16} \\ -\frac{3}{16} \end{pmatrix}$$

Руководствуясь формулой 4.12 подставляем результат в 4.11 и получаем результат:

$$x^{(1)} = {3 \choose 1} - {-\frac{7}{16} \choose \frac{3}{16}} = {\frac{55}{16} \choose \frac{19}{16}}$$

Как можно заметить результаты совпадают.

5 Метод итерации (МИ)

5.1 Одномерный вариант МИ

Для решения уравнения НУ вида f(x) = 0 приведем его к виду, удобному для итерации:

$$x = u(x) \tag{5.1}$$

Рассмотрим итерационный процесс:

$$x^{(k+1)} = u(x^{(k)})$$
 $k = 0, 1, 2, ...$ (5.2)

где k — номер итерации а, $x^{(0)}$ — начальное приближение, может быть произвольным.

Теорема 5.1 Если итерационный процесс сходится, то сходится к точному решению НУ (5.1), при условии непрерывности функции u.

Доказательство. В формуле (5.2) переходим к пределу

$$\lim_{k \to \infty} x^{(k+1)} = \lim_{k \to \infty} u(x^{(k)}) - \text{критерий Гейне.}$$

Если функция u непрерывна, то по критерию Гейне предел и функцию меняем местами:

Пример.

 $x^2 - 2 = 0$ приведем к виду удобному для итераций, добавим x, с обеих сторон:

$$x = x^2 + x - 2$$

$$x^{0} = 1$$

$$x^1 = u(x^0) = 0$$

$$x^2 = -2$$

 $x^3 = 0$ – процесс зациклился – не сходится.

Попробуем по-другому: перед тем, как прибавить х, разделим на 2.

$$x = \frac{x^2 + x}{2} + x$$

запускаем итерационный процесс для данной функции u:

$$x^0 = 1$$

$$x^4 = -1.453$$

$$x^{1} = u(x^{0}) = \frac{1}{2}$$
 $x^{5} = -1.397$
 $x^{2} = -\frac{3}{8}$ $x^{6} = -1.421$

$$x^5 = -1.397$$

$$\chi^2 = -\frac{3}{8}$$

$$x^6 = -1.421$$

$$x^3 = -1.304$$

данный итерационный процесс сходится к $\sqrt{2} = x^{(\infty)}$.

5.1.1 Графическая интерпретация метода итераций

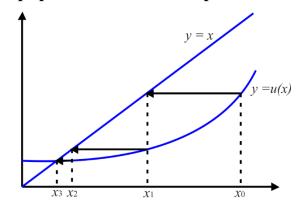


Рис. 5.2 – итерационный процесс сходится монотонно к точному решению в точке χ_3

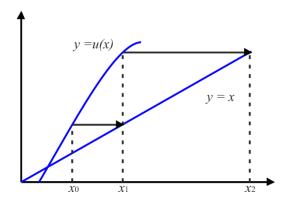


Рис. 5.3 – итерационный процесс расходится монотонно

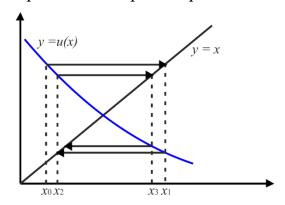


Рис. 5.4 – сходится немонотонно по спирали

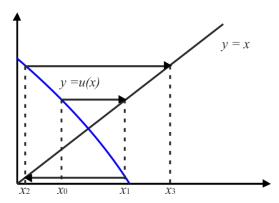


Рис. 5.5 – расходится немонотонно по спирали

Замечание. Если функция монотонно возрастает, то итерационный процесс ведет себя монотонно (сходится или расходится). Итерационный процесс сходится, если функция возрастает или убывает не сильно круто.

$$|u'(x)| < 1$$
 — сходится, $|u'(x)| > 1$ — расходится

5.2 Многомерный вариант МИ

$$x=u(x) \quad x^{(k+1)}=u(x^{(k)}) \quad x=\begin{pmatrix} x_1\\ \dots\\ x_n \end{pmatrix} \quad u\begin{pmatrix} x_1\\ \dots\\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} u_1(x_1,\dots,x_n)\\ \dots\\ u_n(x_1,\dots,x_n) \end{pmatrix}$$

Как известно из курса математического анализа, если функция непрерывна и (5.2) сходится, то она сходится к точному решению исходной СНУ.

Наша задача выяснить условия при, которых МПИ сходится. Ответ на этот вопрос дает теорема 5.2.

Теорема 5.2. Итерационный процесс (5.2) сходится, если отображения функции u — сжимающие в некоторой окрестности точки x^{∞} , а именно существует константа $0 \le c < 1$ такая, что для любых $x, y \in D$, D — окрестность в точке x_0 , которая проходит итерационный процесс, выполняется соотношение:

$$||u(x) - u(y)|| \le c||x - y||,$$

где с — константа сжатия

Доказательство. Заметим, что:
$$\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| = \|u(x^{(i)}) - u(x^{(i-1)})\|$$
 $\|u(x^{(i)}) - u(x^{(i-1)})\| \le c \|x^{(i)} - x^{(i-1)}\| \le \cdots \le c^i \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$

Для доказательства сходимости итерационного процесса (5.2), докажем, что для этого процесса выполняется условия Коши: k < l

$$||x^{(k)} - x^{(l)}|| \le ||x^{(k)} - x^{(k-1)}|| + ||x^{(k-1)} - x^{(k-2)}|| + \dots + ||x^{(l+1)} - x^{(l)}||$$
В силу (5.5):

$$\begin{aligned} & \left\| x^{(k)} - x^{(l)} \right\| \leq \left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\| + \left\| x^{(k-1)} - x^{(k-2)} \right\| + \dots + \left\| x^{(l+1)} - x^{(l)} \right\| \leq \\ & \leq \left\| x^{(1)} - x^{(0)} \right\| \cdot \underbrace{\left(c^{(k-1)} + c^{(k-2)} + \dots + c^{(l)} \right)} \leq \left\| x^{(1)} - x^{(0)} \right\| \cdot \underbrace{\left(c^{(k)} - c^{(l)} \right)}_{k,l \to 0} \underset{k,l \to 0}{\longrightarrow} 0 \end{aligned}$$

(сумма геометрической бесконечно убывающей прогрессии)

Нетрудно заметить, что в следствии доказательства скорость сходимости МПИ не хуже геометрической прогрессии со знаменателем $c.\ c$ — постоянная сжатия отображения функции.

Попробуем конструктивно оценить постоянную сжатия произвольного отображения функции. Ответ на этот вопрос дает теорема (5.2)

Теорема 5.3. Пусть
$$c = \max_{x \in D} ||w(x)||$$

Для области D c — норма якобиана отображения.

$$c = \max_{x \in D} ||w(x)|| = \max_{x \in D} \left\| \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)_{i,j} \right\|$$

6. Таблица сравнительных характеристик методов решения НУ и СНУ.

Характеристика метода	мпд	Метод Хорд	Метод Ньютона	Метод итераций
Всегда ли метод работает (сходится)	Да	Да	Нет, сходится, если x_0 близко к x_∞	He всегда. Сходится если $ w \le c < 1$
Скорость сходимости	Геометрическая прогрессия с $q = \frac{1}{2}$ $ x^{(k)} - x^{(\infty)} $ $\leq \frac{b-a}{2}$	He хуже геометрической прогрессии. $ x^{(k)} - x^{(\infty)} < const \cdot c^k $ $ c = \frac{M_1 - m_1}{m_1} $	Сходится быстрее всех. Число верных знаков примерно удваивается (гипергеометри ческая прогрессия)	$c = \max_{x \in D} w(x) $
Есть ли многомерный вариант	Нет	Нет	Да	Да
Критерии прерывания	$\left \frac{b-a}{2}\right < \varepsilon$	$\begin{vmatrix} c^{(k)} - c^{(k-1)} \\ < \varepsilon \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} c^{(k)} - c^{(k-1)} \\ < \varepsilon \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} c^{(k)} - c^{(k-1)} \\ < \varepsilon \end{vmatrix}$

Замечание. На самом деле, во всех этих методах имеются и конструктивные способы оценки скорости сходимости, на основании которых можно выделить *N* необходимых количеств итераций. На практике этим критерием пользоваться не очень удобно, так как нужно находить *тах* и *т* производных. Поэтому используют универсальный критерий.

Во всех методах, кроме метода Ньютона, скорость сходимости — геометрическая прогрессия. Если знаменатель геометрической прогрессии c, то для нахождения еще одного верного десятичного знака нам потребуется $\log_{1/c} 10$ шагов.

7. Интерполяция

7.1 Постановка задач интерполяции и общий подход к ее применению

Пусть есть точки $x_0, x_1, \dots x_n$ ((n+1)-я точка), в которых известны значения функции

$$y_i = f(x_i); i = 0, \dots, n.$$

Задача интерполяции – научиться вычислять значения функции в любой наперед заданной точке х.

Интерполяцию делят на два вида. Собственно интерполяция – когда точка внутри промежутка, $x \in [x_0, x_n]$. Экстраполяция – когда точка не принадлежит промежутку, $x \notin [x_0, x_n]$.

Геометрическая интерпретация.

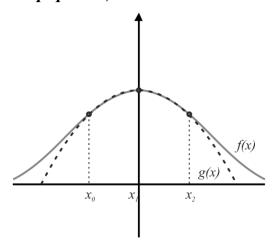


Рис. 7.1 – график интерполируемой функции, проходящий через заданные точки функции f

Общая идея интерполяции состоит в том, чтобы заменить неизвестную нам функцию f на некоторую интерполирующую ее в узлах x_i -ых функцию g. Для функции g должно выполняться два условия: $g(x_i) = y_i = f(x_i)$, где i = 0, ..., n, т.е. полученная функция g обязана проходить через заданные точки функции f, также она должна легко вычисляться в любой наперед заданной точке x.

Для этого поступают следующим образом. Зафиксируем класс функции — M, среди которого мы будем подбирать исходную функцию g. При этом класс M должен быть, с одной стороны, достаточно большим, чтобы функция g с подобными свойствами вообще нашлась бы, а с другой стороны желательно, чтобы функция g была единственная.

В зависимости от класса M интерполирующего функцию будем говорить об интерполяции полиномномами, сплайнами или тригонометрической интерполяции.

7.2 Интерполяция многочленами

7.2.1 Интерполяционный многочлен Лагранжа

Теорема 7.1. Для любого набора точек $(x_i, ..., y_i)$, i = 0, ..., n найдется единственный многочлен степени не выше n, интерполирующий функцию f в этих точках, т.е. такой, что $P_n(x_i) = y_i$, i = 0, ..., n.

Доказательство. Докажем единственность многочлена. Пусть их два $\widehat{P_n}$ и $\widecheck{P_n}$, оба удовлетворяют теореме 7.1. Рассмотрим $\overline{P_n} = \widehat{P_n} - \widecheck{P_n}$, тогда в точках x_i многочлен $\overline{P_n} = 0$:

 $\overline{P}_n(x_i) = \widehat{P}_n(x_i) - \widecheck{P}_n(x_i) = y_i - y_i = 0$, но с другой стороны \overline{P}_n имеет степень не выше n, a с другой стороны имеет как минимум n+1 корень, следовательно это возможно, только если $\overline{P}_n = 0$, т.е. $\widehat{P}_n = \widecheck{P}_n$ (тождественно равны).

Докажем, что такой многочлен всегда существует. Напишем его формулу в явном виде, это и будет формула Лагранжа:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \cdot g_i(x_i) \tag{7.1}$$

где $g_i(x) = \frac{(x-x_0)\cdot(x-x_1)\cdot(x-x_2)...(x-x_{i-1})\cdot(x-x_{i+1})\cdot(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdot(x_i-x_1)...(x_i-x_{i-1})\cdot(x_i-x_{i+1})\cdot(x_i-x_n)}$ все произведения кроме $(x-x_i)$.

Нетрудно заметить, что:

$$g_i(x_j) = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$
 (7.2)

так как при подстановке вместо $x = x_j$ у нас, либо числитель и знаменатель полностью сокращаются (при i = j), либо числитель зануляется (при $i \neq j$).

Учитывая (7.2) приходим к выводу, что:

$$P_n(x_j) = \sum_{i=0}^n y_i \cdot g_i(x_j) = 0 + 0 + 0 + y_j \cdot 1 + 0 + 0 = y_j$$

т.е. для этого многочлена выполняется условие интерполяции (7.1). При этом степень многочлена P_n не выше n.

Частный случай интерполяционного многочлена Лагранжа

n = 1, интерполяция по двум точкам.

 $P_1 = y_0 \cdot \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \cdot \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$ уравнение прямой, проходящей через две точки $(x_0; y_0)$; $(x_1; y_1)$ многочлен первой степени.

n=2

$$P_{2} = y_{0} \cdot \frac{(x - x_{1}) \cdot (x - x_{2})}{(x_{0} - x_{1}) \cdot (x_{0} - x_{2})} + y_{1} \frac{(x - x_{0}) \cdot (x - x_{2})}{(x_{1} - x_{0}) \cdot (x_{1} - x_{2})} + y_{2} \frac{(x - x_{0}) \cdot (x - x_{1})}{(x_{2} - x_{0}) \cdot (x_{2} - x_{1})}$$

n = 3

$$P_{3} = y_{0} \frac{(x - x_{1}) \cdot (x - x_{2}) \cdot (x - x_{3})}{(x_{0} - x_{1}) \cdot (x_{0} - x_{2}) \cdot (x_{0} - x_{3})} + y_{1} \frac{(x - x_{0}) \cdot (x - x_{2}) \cdot (x - x_{3})}{(x_{1} - x_{0}) \cdot (x_{1} - x_{2}) \cdot (x_{1} - x_{3})} + y_{2} \frac{(x - x_{0}) \cdot (x - x_{1}) \cdot (x - x_{3})}{(x_{2} - x_{0}) \cdot (x_{2} - x_{1}) \cdot (x_{2} - x_{3})} + y_{3} \frac{(x - x_{0}) \cdot (x - x_{1}) \cdot (x - x_{2})}{(x_{3} - x_{0}) \cdot (x_{3} - x_{1}) \cdot (x_{3} - x_{2})}$$

Замечание. Интерполяционный многочлен из формулы (7.1) называется интерполяционным многочленом Лагранжа. Вообще говоря, интерполяционный многочлен единственный, как следует из теоремы 7.1. Другое дело, что для его записи существует множество различных формул, которые выдают один и тот же результат, но разными алгоритмами. Различные варианты имеют свои достоинства и свои недостатки. Рассмотрим следующие способы вычисления ИМ.

Пример.

X	у
2	1,4142
3	1,7321
4	2
5	2,2361

$$\begin{split} P_2(2,56) &= 1,4142 \cdot \frac{(2,56-3)(2,56-4)}{(2-3)(2-4)} + 1,7321 \cdot \frac{(2,56-2)(2,56-4)}{(3-2)(3-4)} + \\ &+ 2 \cdot \frac{(2,56-2)(2,56-3)}{(4-2)(4-3)} = 0,448 + 1,3968 - 0,2464 = 1,5984 \\ P_3(2,56) &= 1,4142 \cdot \frac{(2,56-3)(2,56-4)(2,56-5)}{(2-3)(2-4)(2-5)} + \\ &+ 1,7321 \cdot \frac{(2,56-2)(2,56-4)(2,56-5)}{(3-2)(3-4)(3-5)} + \\ &+ 2 \cdot \frac{(2,56-2)(2,56-3)(2,56-5)}{(4-2)(4-3)(4-5)} + \\ &+ 2,2361 \cdot \frac{(2,56-2)(2,56-3)(2,56-4)}{(5-2)(5-3)(5-4)} \\ &= 0,3644 + 1,7041 - 0,6012 + 0,1322 = \\ &= 1,5995 \end{split}$$

7.2.2 Схема Эйткена

Теорема 7.2. Предположим, что многочлен $P_{x_0,x_1,\dots,x_{n-1}}(x)$ интерполирует функцию f в точках x_0,x_1,\dots,x_{n-1} , а многочлен $P_{x_1,x_2,\dots,x_n}(x)$ интерполирует эту же функцию в точка x_1,x_2,\dots,x_n , тогда многочлен $P_n(x)=P_{x_0,x_1,\dots,x_n}(x)$, который интерполирует функцию в точках x_0,x_1,\dots,x_n можно вычислить так:

$$P_n(x) = \frac{P_{x_0, x_1, \dots, x_{n-1}}(x) \cdot (x - x_n) - P_{x_1, x_2, \dots, x_n}(x) \cdot (x - x_0)}{x_0 - x_n}$$
(7.3)

Доказательство. Заметим, что многочлен (7.3) имеет степень не выше n, так как P' и P'' имели степень не больше, чем (n-1). Проверим, что данный многочлен в узлах интерполяции задает значения y_i . $P_{x_0,x_1...,x_n}(x_i) = y_i$, $i = \overline{0,n}$

Если x_i – не крайние точки, то:

$$P_{n}(x_{i}) = \frac{P_{x_{0},x_{1},\dots,x_{n-1}}(x)\cdot(x-x_{n}) - P_{x_{1},x_{2},\dots,x_{n}}(x)\cdot(x-x_{0})}{x_{0}-x_{n}} = \frac{y_{i}\cdot((x_{i}-x_{n})+(x_{i}-x_{0}))}{x_{0}-x_{n}} = y_{i}$$

$$(7.4)$$

Рассмотрим случай, когда в интерполяции участвуют крайние точки x_0 и x_n :

$$P_n(x_0) = \frac{P_{x_0, x_1, \dots, x_{n-1}}(x_0) \cdot (x_0 - x_n) - P_{x_1, x_2, \dots, x_n}(x_0) \cdot (x_0 - x_0)}{x_0 - x_n} = \frac{y_0(x_0 - x_n) - P_{x_1, x_2, \dots, x_n}(x_0) \cdot 0}{x_0 - x_n} = y_0$$

$$P_n(x_n) = \frac{P_{x_0, x_1, \dots, x_{n-1}}(x_n) \cdot (x_n - x_n) - P_{x_1, x_2, \dots, x_n}(x_n) \cdot (x_n - x_0)}{x_0 - x_n} = y_n$$

Замечание. В теореме 7.2 приведен другой способ вычисления интерполяционного многочлена, существование и единственность которого были доказана в теореме 7.1 по формуле Лагранжа. Для теоремы 7.2 будем использовать схему Эйткена. Заметим, что формулу из теоремы 7.2 можно переписать так:

$$P_{x_k, x_{k+1} \dots, x_l}(x) = \frac{P_{x_k, x_{k+1} \dots, x_{l-1}}(x) \cdot (x - x_l) - P_{x_{k+1}, x_{k+2} \dots, x_l}(x) \cdot (x - x_k)}{x_k - x_l}$$
(7.5)

На основании (7.5) и очевидного наблюдения: $P_{x_i}(x) = y_i$, приходим к следующей схеме вычисления итерационного многочлена — она называется схемой Эйткена:

схемой Эйткена:
$$y_0 = P_{x_0}(x)$$

$$y_1 = P_{x_1}(x)$$

$$y_2 = P_{x_2}(x)$$

$$y_3 = P_{x_3}(x)$$

$$y_4 = P_{x_4}(x)$$

$$y_4 = P_{x_4}(x)$$

$$P_{x_0,x_1,x_2}(x)$$

$$P_{x_0,x_1,x_2}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3,x_4}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3,x_4}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3,x_4}(x)$$

$$P_{x_1,x_2,x_3,x_4}(x)$$

$$P_{x_2,x_3,x_4}(x)$$

$$P_{x_2,x_3,x_4}(x)$$

Оценим трудоёмкость вычисления интерполяционного многочлена по формуле Лагранжа и по схеме Эйткена:

- 1) Формула Лагранжа:
- (n+1) слагаемых, а в каждом слагаемом 2n умножений +1 деление +2n сложений и/или вычитаний.

 $T \approx 2n^2$ умножений + $2n^2$ сложений + n делений.

2) Схема Эйткена:

На каждом этапе у нас
$$(n-i)$$
 слияний, где $i=1,\dots,n-1$, т.е. $(n-1)+(n-2)+\dots+2+1$

В каждом действие 4 сложения и/или вычитания, 2 умножения и 1 делений, получаем $\frac{n^2}{2}$ действий.

$$T \approx n^2$$
 умножений + $2n^2$ сложений + $\frac{n^2}{2}$ делений.

Можно увидеть, что схема Эйткена едва ли выигрывает у формулы Лагранжа по трудоемкости. Однако у нее есть два несомненных преимущества:

- 1. Главным достоинством схемы Эйткена является то, что вычисления можно оборвать на любом этапе, когда будет достигнута заданная точность, при этом мы получим многочлен, который интерполирует функцию не во всех точках, но его значение будет близко к действительному. В формуле Лагранжа прерывать вычисления во время решения нельзя.
- 2. Схема Эйткена более устойчива к вычислительным погрешностям. Можно прибавлять по одному узлу интерполяции слева и справа, пока не достигнем заданной точности (универсальный критерий прерывания).

Пример.

X	у
2	1,4142
3	1,7321
4	2
5	2,2361

$$\begin{aligned} p_{x_0} & p_{x_0} \\ p_{x_1} & p_{x_0 x_1} \\ p_{x_2} & p_{x_0 x_1 x_2} \\ p_{x_1 x_2} & p_{x_0 x_1 x_2} \\ p_{x_0 x_1} & = \frac{1,4142(2,26-3)-1,7321(2,26-2)}{2-3} = 1,5922 \\ p_{x_1 x_2} & = \frac{1,7321(2,26-4)-2(2,26-3)}{3-4} = 1,6142 \\ p_{x_0 x_1 x_2} & = \frac{1,5922(2,26-4)-1,6142(2,26-2)}{2-4} = 1,5984 \\ p_{x_0} & = 1,4142 \\ p_{x_0} & = 1,7321 \\ p_{x_1} & p_{x_0 x_1} = 1,5922 \\ p_{x_1} & = 1,6142 \\ p_{x_2} & p_{x_1 x_2} & = 1,6142 \\ p_{x_0 x_1} & p_{x_1 x_2} & p_{x_0 x_1 x_2} \\ p_{x_2} & p_{x_2 x_3} & p_{x_0 x_1 x_2} \\ p_{x_2 x_3} & = \frac{2(2,26-5)-2,2361(2,26-4)}{4-5} = 1,66002 \\ p_{x_0 x_1 x_2} & = 1,5984 \\ p_{x_1 x_2 x_3} & = \frac{1,6142(2,26-5)-1,66(2,26-3)}{3-5} = 1,6041 \\ p_{x_0 x_1 x_2 x_3} & = \frac{1,5984(2,26-5)-1,6041(2,26-2)}{2-5} = 1,5995 \\ p_{x_0} & = 1,4142 \\ p_{x_1} & = 1,7321 \\ p_{x_2} & = 2 \\ p_{x_3} & = 2,2361 \end{aligned}$$

7.2.3 Погрешности интерполяционного многочлена

При интерполировании возникает два типа погрешностей:

- 1. погрешность усечения $\varepsilon_{\text{усеч}}$ (возникает из-за замены функции на интерполирующий многочлен).
- 2. погрешность округления $\varepsilon_{\text{округ}}$ (возникает из-за того, что значения интерполируемой функции f(x) в узлах интерполяции известны не точно, а приближенно, с некоторой погрешностью η). Обычно возникает из-за того, что значения функции в точках x_i округляются.

Теорема 7.3. Оценка $\varepsilon_{\text{усеч}}$ при интерполяции многочлена. $\varepsilon_{\text{усеч}}$ с учетом знака (он же – остаточный член интерполяционного многочлена).

$$r_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)} \cdot (C)}{(n+1)!} \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \dots \cdot (x - x_n), (7.8)$$

где f(x) — точное значение, $f^{(n+1)}$ — (n+1) производная, С некоторая точка, которая принадлежит интервалу $[x_0, x_n, x]$, наименьший интервал, который содержит все узлы интерполяции.

Функция f(x) должна быть (n+1) раз непрерывно дифференцируема.

Доказательство. Пусть $\Pi(x)=(x-x_0)$... $(x-x_n)$ многочлен степени n+1 со старшим коэффициентом равным 1. Введем функцию $U(x)=r_n(x)-k\Pi(x)$, где k – const. Зафиксируем точку \bar{x} , не совпадающую ни с одним узлом интерполяции $\bar{x}\neq x_i$ и подберем k так, чтобы $U(\bar{x})=0$;

$$k = \frac{\mathbf{r}_{n}(\bar{x})}{\Pi(\bar{x})};$$

$$U(x_{i}) = f(\mathbf{x}) - P_{n}(x) - \frac{\mathbf{r}_{n}(\bar{x})}{\Pi(\bar{x})}\Pi(x)$$

$$U(x_{i}) = f(\mathbf{x}) - P_{n}(x) - k \cdot 0 = 0 \qquad i = \overline{0, n}$$

$$U(\bar{x}) = r_{n}(\bar{x}) - P_{n}(x) - \frac{\mathbf{r}_{n}(\bar{x})}{\Pi(\bar{x})}\Pi(\bar{x}) = 0$$

Следовательно, функция U на интервале $[x_0, x_n, x]$ обращается в 0, как минимум (n+2) раза. Тогда, ее производная U' обращается в 0, как минимум (n+1) раз. U'' как минимум n раз. Следовательно, $U^{(n+1)}$ обращается на этом интервале хотя бы один раз в 0, т.е. существует $C \in [x_0, x_n, x]$

$$U^{(n+1)}(c) = 0$$

$$U^{(n+1)}(c) = (f(c) - P_n(c))^{n+1} - k(\Pi(\bar{x}))^{n+1} = f^{n+1}(c) - P_n(c)^{n+1} - k(n+1)! = 0$$

k(n+1)! – т.к. этот многочлен степени (n+1). $P_n(c)^{n+1}=0$ – т.к. (n+1) производная равна.

$$f^{n+1}(c) = \frac{r_n(\bar{x})}{\Pi(\bar{x})}(n+1)!$$

$$r_n(\bar{x}) = \frac{f^{n+1}(c)}{(n+1)!} \Pi(\bar{x})$$

Так как положение точки c нам не известно оценим $\varepsilon_{
m yceq}$ сверху:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} = |\mathbf{r}_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_n)|,$$
где $M_{n+1} = \max_{t \in (x_0, x_n, x)} |f^{(n+1)}(x)|$ (7.8)

(7.8) – удобна тем, что в ней нет c, местоположение которой мы не знаем.

Пример нахождения интерполяционного многочлена с оценкой $\varepsilon_{
m yceq}.$

Найдем $\sqrt{115}$, используя интерполяцию по трем точкам.

X	y
100	10
121	11
144	12

Используя интерполяционную формулу Лагранжа при n = 2, получим

$$P_2(115) = 10 \cdot \frac{(115 - 121) \cdot (115 - 144)}{(100 - 121) \cdot (100 - 144)} + 11 \frac{(115 - 100) \cdot (115 - 144)}{(121 - 100) \cdot (121 - 144)} + 12 \cdot \frac{(115 - 121) \cdot (115 - 100)}{(144 - 100) \cdot (144 - 121)} = 10,7238$$

(для сведения $\sqrt{115}$ =10,7238; Δ = 10⁻³).

Оценим $\varepsilon_{\text{усечения}}$ по формуле (7.8).

$$f(x) = \sqrt{x}$$
$$f'''(x) = \frac{3}{9} \cdot x^{-5/2}$$

 $M_3 = \max \left| \frac{3}{8} \cdot x^{-5/2} \right| = \frac{3}{8} 10^{-5}$ — так как f'''(x) монотонно убывает и достигает тах в крайней левой точки.

$$arepsilon_{
m yceq} \leq rac{rac{3}{8} \cdot 10^{-5}}{3!} (115 - 100) \cdot (115 - 121) \cdot (115 - 144) = 2 \cdot 10^{-3}$$
 $arepsilon_{
m peaльнoe} = 10^{-3} \leq arepsilon_{
m yceq} + arepsilon_{
m okp} = 2 \cdot 10^{-3}, ext{ т.к } arepsilon_{
m okp.} = 0$

Теперь находим значение x на интервал [100, ..., 144], при котором f'''(x) принимает максимальное значение $f'''(100) = \frac{3}{8} \cdot 100^{-5/2} = \frac{3}{8} \cdot 10^{-5}$

 $\varepsilon_{
m yce^{_{4}}}$ не превосходит $\frac{_{3}}{^{8}} \cdot 10^{-5}$

$$\varepsilon_{\text{усеч}} \le \frac{\frac{3}{8} \cdot 10^{-5}}{3!} (115 - 100) \cdot (115 - 121) \cdot (115 - 144) = 2 \cdot 10^{-3}.$$

Оценка сверху больше реальной погрешности, что и следовало ожидать.

При интерполировании возникает еще погрешность, связанная с машинной реализацией алгоритма, но она, как правило, не велика, с ней можно бороться округлением. Заметим, что с возрастанием числа узлов интерполяции, $\varepsilon_{\rm окр}$ быстро возрастает и стремится к бесконечности, а $\varepsilon_{\rm усеч}$ напротив стремится к нулю.

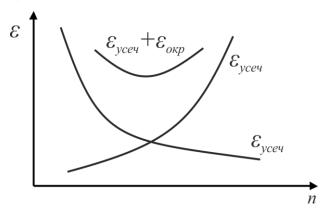


Рис. 7.2 – зависимость величины $\varepsilon_{\text{vcey}}$ и $\varepsilon_{\text{окр}}$ от количества узлов

Из рисунка можно увидеть, что если количество узлов (заданных точек) будет слишком маленьким, то будет слишком большой $\varepsilon_{\text{усеч}}$, а если точек будет много, то будет расти $\varepsilon_{\text{окр}}$. Поэтому если узлов слишком много стоит взять ближайшие значения, а остальные отбросить.

7.2.3 Конечные разности. Формулы Ньютона. Интерполяционный многочлен Ньютона

Конечной разностью функции y = f(x) называется функция $\Delta y = f(x+h) - f(x)$, где h — фиксированный шаг. Конечные разности иногда называют конечными разностями первого порядка, т.е. разность значений функции в соседних узлах:

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$
 $(i = 0, 1, 2, ..., n - 1)$

Конечные разности второго порядка можно получить из конечных разностей первого порядка:

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$$
 (i = 0, 1, 2, ..., n - 2)

При взятии конечной разности от многочлена степени k, его степень понижается на единицу.

$$\Delta^k y = \Delta(\Delta^{k-1}y)$$
 – рекуррентное определение k -ой конечной разности.

Теперь выразим конечные разности произвольного порядка с заранее известными значениями функции $y_0, y_1, y_2, ..., y_n$. Разность второго порядка выглядит следующим образом:

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i$$

А так будет выглядеть разность третьего порядка:

$$\Delta^3 y_i = \Delta^2 y_{i+1} - \Delta^2 y_i = (y_{i+3} - 2y_{i+2} + y_{i+1}) - (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i) =$$

$$= y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i$$

Исходя из выше представленных формул можно вывести:

$$\Delta^{k} y_{i} = \sum_{j=0}^{k} (-1)^{j} C_{k}^{j} y_{i+k-j}$$
(7.9)

Если функция f(x) задана своим значением y_i в равностоящих узлах x_i с шагом h, $x_i = x_0 + i \cdot h$; i = (0, ..., n), то можно представить расчеты в виде таблицы конечных разностей.

Таблица 7.1

X	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$		$\Delta^n y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	•••	$\Delta^n y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	•••	•••	
x_2	y_2	Δy_2	***	$\Delta^3 y_{n-3}$		
			$\Delta^2 y_{n-2}$			
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-1}				
x_n	y_n					

Теорема 7.4. Если функция f(x) n-раз непрерывно дифференцируемая, то имеет место формула:

$$\Delta^n f(x) = h^n \cdot f^n(\mathcal{C})$$
, где \mathcal{C} – точка $\mathcal{C} \in [x_0, \dots, x_n]$. (7.10)

Замечание. При n = 1 — это будет теорема Лагранжа, что известно из курса математического анализа.

Удобно записывать формулу интерполяционного многочлена через конечные разности (1-ую и 2-ую формулы Ньютона интерполяционного многочлена).

Первая интерполяционная формула Ньютона

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!} \cdot q + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} \cdot q \cdot (q-1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} \cdot q \cdot (q-1) \cdot (q-2) \dots (q-n+1),$$
где $q = \frac{x - x_0}{n}$. (7.11)

Вторая интерполяционная формула Ньютона

$$P_{n}(x) = y_{n} + \frac{\Delta y_{n-1}}{1!} \cdot q + \frac{\Delta^{2} y_{n-2}}{2!} \cdot q(q+1) + \dots + \frac{\Delta^{n} y_{0}}{n!} \cdot q \cdot (q+1) \cdot (q+2) \dots (q+n-1),$$

$$Q = \frac{x - x_{n}}{h}$$
(7.12)

Теперь рассмотрим несколько особенностей данного метода интерполяции:

- 1. В 1-ой формуле Ньютона (7.11) берем значения ∆ из нулевой строки таблицы конечных разностей.
- 2. Во 2-ой формуле Ньютона (7.12) берем значения ∆ из нижней побочной диагонали в таблице конечных разностей.
- 3. И 1-ая и 2-ая формулы Ньютона могут быть оборваны, если мы возьмем в 1-ой формуле Ньютона не (n+1) слагаемых, а (k+1) (до Δ^k), то мы получим интерполяционный многочлен, который интерполирует функцию в (k+1) крайних точках (от x_0 до x_{n-k}). Аналогичным образом и со 2-ой формулой Ньютона (т.е. возьмем не (n+1) слагаемых, а (k+1) (до Δ^k), то мы получим интерполяционный многочлен, который интерполирует функцию в (k+1) крайних точках (от x_n до x_{n-k})).
- 4. И в том и в другом случае мы можем оборвать вычисления раньше времени, используя универсальный критерий прерывания.
- 5. При добавлении нового слагаемого, в 1-ой формуле Ньютона мы добавляем один новый узел интерполяции, двигаясь слева направо, а во 2-ой формуле Ньютона справа налево.

Недостатком является то, что для вычисления по этим формулам требуются равностоящие узлы интерполяции.

Пример.

X	у
1	1
2	0,5
3	0,3333

4	0.25
4	0,23

X	у	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
1	1	-0,5	0,3333	-0,2499	0,1998
2	0,5	-0,1667	0,0834	-0,0501	
3	0,3333	-0,0833	0,0333		
4	0,25	-0,05			
5	0,2		-		

$$f(x) = \frac{1}{x}$$

Первая формула Ньютона:

$$q = \frac{x - x_0}{h} = \frac{2,5 - 1}{1} = 1,5$$

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!} \cdot q + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} \cdot q \cdot (q - 1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!} \cdot q \cdot (q - 1) \cdot (q - 2)$$

$$P_3(2,5) = 1 + \frac{-0,5}{1!} \cdot 1,5 + \frac{0,3333}{2!} \cdot 1,5 \cdot 0,5 + \frac{-0,2499}{3!} \cdot 1,5 \cdot 0,5 \cdot (-0,5)$$

$$= 0,3906$$

Вторая формула Ньютона:

$$q = \frac{x - x_n}{h} = \frac{2,5 - 4}{1} = -1,5$$

$$P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{1!} \cdot q + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!} \cdot q \cdot (q+1) + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!} \cdot q \cdot (q+1) \cdot (q+2)$$

$$P_3(2,5) = 0,25 + \frac{-0,0833}{1!} \cdot (-1,5) + \frac{0,0834}{2!} \cdot (-1,5) \cdot (-0,5) + \frac{-0,2499}{3!} \cdot (-1,5) \cdot (-0,5) \cdot 0,5 = 0,3906$$

Погрешность формулы Ньютона

Как и в любом интерполяционном многочлене, в интерполяционных многочленах Ньютона возникают две погрешности — $\varepsilon_{\rm окр}$ и $\varepsilon_{\rm усеч}$.

Оценим для $\varepsilon_{\text{окр}}$, как и раньше:

$$\varepsilon_{\text{okd}} \le \eta \cdot 2^{n-1}$$

Рассмотрим формулу для $\varepsilon_{\text{усеч}}$ из теоремы 7.3:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} = \frac{f^{n+1}(C)}{(n+1)!} \cdot (x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_n) =$$

$$\begin{cases} \frac{x - x_0}{h} = q \\ x - x_0 = h \cdot q \\ x - x_1 = h \cdot (q - 1) \\ x - x_2 = h \cdot (q - 2) \end{cases}$$

$$= \frac{f^{n+1}(C)}{(n+1)!} \cdot hq \cdot h(q - 1) \cdot \dots \cdot h(q - n) = \frac{h^{k+1} \cdot f^{n+1}C}{(n+1)!} q(q - 1) \cdot \dots \cdot (q - n) =$$

$$\frac{\Delta^{n+1} y_0}{(n+1)!} (q - 1) \cdot \dots \cdot (q - n), \, \Gamma \exists e \, q = \frac{x - x_0}{h}. \tag{7.13}$$

Не трудно заметить, что $\varepsilon_{\rm yceq}$ есть не что иное, как первое не включенное слагаемое в формуле Ньютона.

7.2.4 Центральные интерполяционные формулы (Стирлинга и Бесселя)

Формулы Ньютона (7.11), (7.12) — односторонние, а Бесселя и Стирлинга — центральные, т.е. в этих формулах, при добавлении новых слагаемых, узлы интерполяции добавляются справа и слева от точки x, поэтому удобны при практическом вычислении.

В формуле Стирлинга интерполяция проходит по (2n+1) точке $(x_{-n},x_{-n+1},...,x_0,x_1,x_2...,x_n)$:

$$\begin{split} P_{2n}(x) &= y_0 + \frac{q}{1!} \cdot \frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} + \frac{q^2}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{q \cdot (q^2 - 1^2)}{3!} \cdot \\ \cdot \frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2} + \frac{q^2 \cdot (q^2 - 1^2)}{4!} \Delta^4 y_{-2} + \\ &+ \frac{q \cdot (q^2 - 1^2) \cdot (q^2 - 2^2)}{5!} \cdot \frac{\Delta^5 y_{-3} + \Delta^5 y_{-2}}{2} + \frac{q \cdot (q^2 - 1^2) \cdot (q^2 - 2^2)}{6!} \Delta^6 y_{-3} + \dots + \\ &+ \frac{q \cdot (q^2 - 1^2) \dots (q^2 - (n - 1)^2)}{(2n - 1)!} \Delta^{2n} y_{-n}, \end{split} \tag{7.14}$$
 где $q = \frac{x - x_0}{b}$.

Если мы возьмем (2n+2) крайние левые слагаемые, то получим интерполирование по точкам: $(x_{-n}, x_{-n} + 1, ..., x_0, x_1, ..., x_{n+1})$

Формула Бесселя:

$$\begin{split} P_{2n+2}(x) &= \frac{y_0 + y_1}{2} + p \cdot \Delta y_0 + \frac{p^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2}{2!} \cdot \frac{\Delta^2 y_{-1} + \Delta^2 y_0}{2} + \frac{p \cdot \left(p^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right)}{3!} \cdot \Delta^3 y_{-1} + \\ &+ \frac{\left(p^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(p^2 - \left(\frac{3}{2}\right)^2\right)}{4!} \cdot \frac{\Delta^4 y_{-2} + \Delta^4 y_{-1}}{2} + \frac{p \cdot \left(p^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \left(p^2 - \left(\frac{3}{2}\right)^2\right)}{5!} \Delta^5 y_{-2} + \dots + \\ &+ p \cdot \left(p^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(p^2 - \left(\frac{3}{2}\right)^2\right) \dots \left(p^2 - \left(\left(\frac{2n-1}{2}\right)^2\right) \Delta^{2n+1} y_{-n}, \end{split} \tag{7.15}$$
 где $p = \frac{x - \frac{x_0 + x_1}{2}}{b}.$

7.3 Интерполяция кубическими сплайнами

Кубическим сплайном на сетке (не обязательно равноотстоящей) называется функция S(x), которая обладает следующими свойствами:

- 1. На каждом интервале $[x_{i-1}, x_i]$, где $1 \le i \le n$, функция S(x) является кубическим многочленом (обозначим его $S_i(x)$).
- 2. На всем интервале $[x_0, x_n]$ S(x) дважды непрерывно дифференцируемая функция.
- 3а. На краях интервала вторая производная обращается в нуль. $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$
- 3b. Иногда используется свойство (для периодического кубического сплайна) $S'(x_0) = S'(x_n)$, $S''(x_0) = S''(x_n)$.

Мы будем работать с обычными кубическими сплайнами, для которых выполняются вышеназванные условия.

Исследуем вопрос: любую ли функцию можно интерполировать кубическими сплайнами и всегда ли это можно сделать единственным образом?

Имеем n участков интерполяции, на каждом участке свой кубический многочлен $S_i = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$, итого 4n коэффициентов, которые необходимо найти. Мы должны составить 4n уравнений.

Исходя из условий кубического сплайна:

п участков $[x_{i-1}, x_i]$, на границах должны выполнятся условия интерполяции $S_i(x_{i-1}) = y_{i-1}$; $S_i(x_i) = y_i$ — на каждом участке 2 условия, итого получаем 2n условий.

Функция $S_i(x)$ на всем интервале дважды непрерывно дифференцируема, следовательно, она непрерывна и непрерывны ее первая и вторая производные (свойство (2)).

На концах интервала $[S_i(x_i) = S(x_{i-0}) = y_i(x_i)] = [S_{i+1}(x_i) = S(x_{i+0}) = y_{i+1}(x_i)]$, это условие лишнее, оно учтено в условии интерполяции. Необходимо проверить, чтобы в точке x_i были непрерывны S_i' и S_i'' . $[S_i'(x_i) = S'(x_{i-0}) = y_i'(x_i)] = [S_{i+1}'(x_i) = S'(x_{i+0}) = y_{i+1}'(x_i)]$ — условие непрерывности первой производной. Аналогично требуем выполнения условия для второй производной. $[S_i''(x_i) = S''(x_{i-0}) = y_i''(x_i)] = [S_{i+1}''(x_i) = S''(x_{i+0}) = y_{i+1}''(x_i)] - 2n$ условий непрерывности для S' и S'', следовательно 2^n условия интерполяции.

Недостающие два условия берем из пункта (3), имеем 4n условий, столько же сколько коэффициентов у кубических многочленов S_i .

7.3.1 Свойства кубического сплайна

Теорема 7.5. Пусть на сетке x_i , где $i \in (0, ..., n)$ задана функция f со своими значениями $y_i = f(x_i)$. Тогда среди всевозможных функций y(x), интерполирующих f на сетке x_i именно для кубического сплайна достигается минимум энергии изгиба – интеграла:

$$I(y) = \int_{x_0}^{x_n} (y''(t))^2 dt, \tag{7.16}$$

где y пробегает все возможные функции, интерполирующие в узлах (x_0, \dots, x_n) .

$$I(S) = \min I(y)$$

Следствие. Из математического анализа известно, что радиус кривизны функции y(x):

$$R(x) = \left[\frac{y''(x)}{(1 + (y'(x)^2))^{3/2}} \right] = k^{-1}(x)$$

$$\frac{1}{r(x)} = k(x) = \frac{y''(x)}{(1+(y'(x)^2))^{3/2}}$$
, где $k(x)$ – кривизна изгиба.

Из физики известно, что энергия изгиба линейки, принимающей очертания графика y(x), с переменной жесткостью вычисляется по формуле:

$$I(y) = \int_{x_0}^{x_n} \frac{\alpha(x) \cdot k^2(x)}{2} dl,$$

где $\alpha(x)$ – упругость, k(x) – кривизна, dl – приращение длинны.

Если $\alpha(x)$ – константная, то

$$dl = \sqrt{1 + (y')^2 dx} \approx dx$$

$$k(x) = y''(x) = \sum_{x_0} I(y) = \int_{x_0}^{x_0} (y''(x))^2 dx$$
 (7.17)

Интегралы (7.16) и (7.17) приближенно равны по теореме 7.5. Именно для кубического сплайна достигается минимум интеграла (7.16). Если пропустить линейку через узел интерполяции (x_i, y_i) , то она будет минимизировать свою энергию изгиба и примет очертания кубического сплайна, т.к. только для него это условие достигается по теореме 7.5.

Spline — линейка чертежника, с помощью которой получили плавные кривые-кубические сплайны.

Очевидно, что кривизна линейки есть непрерывная функция, следовательно, функция также непрерывная, и, следовательно, кубический сплайн дважды непрерывно дифференцируем. Кроме того, ясно, что на краях (в точках x_0 и x_n) кривая равна нулю.

7.3.2 Формулы для расчета кубического сплайна

Теоретически, для вычисления кубического сплайна можно взять 4n неизвестных (коэффициентов на участке), и составить 4n линейных уравнений. Данную систему решить методом Гаусса и получить ответ. Однако на практике такой метод не используется.

Рассмотрим алгоритм вычисления.

Обозначим $S''(x_i) = M_i$, i = (0, ..., n), $M_0 = M_n = 0$ (из 3-го условия) т.к. S(x) — кусочно-кубическая функция, то S''(x) — кусочно-линейная функция, которая непрерывна. Получаем следующую картину.

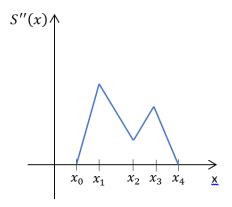


Рис. 7.3 – кусочно-линейная функция

Очевидно, что на
$$i$$
-ом участке $x \in [x_{i-1}, x_i]$. $S_i''(x) = \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} \cdot M_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \cdot M_i = M_{i-1} \cdot \frac{x_i - x}{h_i} + M_i \cdot \frac{x - x_{i-1}}{h_i}$, $h_i = x_i - x_{i-1}$ (7.18)

 h_i – длина i-ого интервала.

Чтобы получить $S_i(x)$, проинтегрируем $S_i''(x)$ дважды:

$$S'_{i}(x) = -M_{i-1} \cdot \frac{(x_{i}-x)^{2}}{2h_{i}} + M_{i} \cdot \frac{(x-x_{i-1})^{2}}{2h_{i}} + C_{1}$$

$$S_i(x) = M_{i-1} \cdot \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i \cdot \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + C_1 x + C_2$$

Константы интегрирования C_1 и C_2 находим из краевых условий:

$$\begin{cases} S(x_{i-1}) = y_{i-1} \\ S(x_i) = y_i \end{cases}$$

Решив систему, получим

$$S_{i}(x) = M_{i-1} \cdot \frac{(x_{i}-x)^{3}}{6h_{i}} + M_{i} \cdot \frac{(x-x_{i-1})^{3}}{6h_{i}} + \left(y_{i-1} - \frac{M_{i-1} \cdot h_{i}^{2}}{6}\right) \cdot \frac{x_{i}-x}{h_{i}} + \left(y_{i} - \frac{M_{i} \cdot h_{i}^{2}}{6}\right) \cdot \frac{x-x_{i-1}}{h_{i}}$$

$$(7.19)$$

Теперь для расчета кубического сплайна по формуле (7.19) надо найти неизвестные моменты M_i и $M_{i-1}, M_0 = M_n = 0$.

Чтобы их найти, надо вспомнить, что из всех условий (1, 2, 3), наложенных на кубический сплайн, мы не использовали условие непрерывности первой производной:

$$S_i'(x_i) = S_{i-1}'(x_i),$$
где $i = (0, ..., n-1)$ (7.20)

Получим (n-1) недостающее уравнение для (n-1) неизвестного $(для M_1, ..., M_{n-1}).$

Как нетрудно увидеть, эти условия превращаются в СЛАУ (7.21) для нахождения M:

CM = d, где M – столбец неизвестных, C – трехдиагональная матрица.

$$M = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} \frac{h_1 + h_2}{3} & \frac{h_2}{6} & 0 & 0 \\ \frac{h_2}{6} & \frac{h_2 + h_3}{3} & \frac{h_3}{6} & 0 \\ 0 & \frac{h_3}{6} & \frac{h_3 + h_4}{3} & \frac{h_4}{6} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} - \text{трехдиагональная матрица}$$

Коэффициенты трехдиагональной матрицы \mathcal{C} вычисляются по формулам:

$$C_{ij} \begin{cases} \frac{h_i + h_i + 1}{3} & i = j \\ \frac{h_{i+1}}{6} & j = i + 1 \\ \frac{h_i}{6} & j = i - 1 \\ 0 & |j - 1| > 1 \end{cases}$$
 (7.21)

$$d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \end{pmatrix}$$
, где $d_i = rac{y_{i+1} - y_0}{h_{i+1}} - rac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \, i = (1, \dots, n-1)$

7.3.3 Алгоритм расчета кубического сплайна

- 1. Чтобы найти моменты, составляем СЛАУ используя формулы (7.21).
- 2. Решаем эту СЛАУ (методом Гаусса), находя моменты M_i $i = (1, ..., n-1), M_0 = M_n = 0.$

3. Данные моменты подставляем в формулу (7.19), находим значения $S_i(x)$.

Перед этим надо найти интервал, такой, что $x \in [x_{i-1}, x_i]$.

Замечание. При интерполяции кубическими сплайнами, сетка не обязана быть равноотстоящей. Однако желательно, чтобы выполнялось условие $\frac{M}{m} \leq 4$, где $M - \max h_i$, $m - \min h_i$, т.е. соотношение между шагами не превышало 4.

Пример.

i	X	y
0	2	4
1	4	1
2	6	4
3	8	7
4	10	4

$$h_i = x_i - x_{i-1}$$

Найти: S(3), S(5), S(7)

n = 4, значит матрица будет 3X3.

$$C = \begin{pmatrix} \frac{h_1 + h_2}{3} & \frac{h_2}{6} & 0\\ \frac{h_2}{6} & \frac{h_2 + h_3}{3} & \frac{h_3}{6}\\ 0 & \frac{h_3}{6} & \frac{h_3 + h_4}{3} \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} \frac{(4-2) + (6-4)}{3} & \frac{6-4}{6} & 0\\ \frac{6-4}{6} & \frac{(6-4) + (8-6)}{3} & \frac{8-6}{6}\\ 0 & \frac{8-6}{6} & \frac{(8-6) + (10-8)}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & 0\\ \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{1}{3}\\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} \end{pmatrix}$$

$$D_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}$$

$$D = \begin{pmatrix} \frac{(4-1)}{2} - \frac{(1-4)}{2}\\ \frac{(7-4)}{2} - \frac{(4-1)}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\\ 0\\ -3 \end{pmatrix}$$

Получаем систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & 0 & | & 3 \\ \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & | & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & | & -3 \end{pmatrix},$$

которую решаем с помощью метода Гаусса и получаем ответ:

$$M = \begin{pmatrix} \frac{9}{4} \\ 0 \\ -\frac{9}{4} \end{pmatrix}$$

теперь вычисляем сплайн, так как точка x=3 находится в первом промежутке $x \in [2;4]$, используем моменты для i=1.

$$S(3) = O \cdot \frac{(4-3)^3}{12} + \frac{9}{4} \cdot \frac{(3-2)^3}{12} + \left(4\frac{0\cdot 4}{6}\right) \cdot \left(\frac{4-3}{2}\right) + \left(1 - \frac{\frac{9}{4}\cdot 4}{6}\right) \cdot \left(\frac{3-2}{2}\right)$$

$$= 1.9375$$

$$S(5) = \frac{9}{4} \cdot \frac{(6-5)^3}{12} + 0 + \left(1 - \frac{\frac{9}{4} \cdot 4}{6}\right) \cdot \left(\frac{6-5}{2}\right) + \left(4 - \frac{\frac{9}{4} \cdot 4}{6}\right) \cdot \left(\frac{5-4}{2}\right)$$

$$= 3.0625$$

$$S(7) = 6.0625$$

7.4 Тригонометрическая интерполяция

7.4.1 Формулы тригонометрической интерполяции

Интерполяция происходит по точкам не $x_0, ... x_n$, а $x_0, ... x_{n-1}$. Это неявно подразумевает, что $y_0 = y_n$, т.к. интерполяция идет по периодическим функциям с периодом $T = x_n - x_0$

$$\begin{cases} y(x) = \sum_{\substack{-\frac{n}{2} < j \le \frac{n}{2}}} A_j \exp\left(2\pi i j \frac{x - x_0}{nh}\right) & (7.22) \\ A_j = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} y_k \exp(-2\pi i \frac{k \cdot j}{n}) & (7.23) \end{cases}$$

i — мнимая единица.

$$x_k = x_0 + kh$$
 – равностоящие узлы.
$$\exp(ix) = \cos x + i \sin x$$

Замечание. При тригонометрической интерполяции интерполирующая функция y(x):

- 1. Периодическая, с периодом nh = T.
- 2. Выполняется условие интерполяции $y(x_i) = y_i$, т.е. если $y(x_i)$ вещественное, то в узлах мнимая часть y нулевая.
- 3. Вообще говоря, даже если исходная функция f(x) была вещественной (все y_i вещественные), то y(x) из (7.22 и 7.23) может быть не чисто вещественной, а комплексной. В узлах интерполяции мнимая часть зануляется, а между узлами шага, следовательно, ее откидываем (а можно этого не делать).
- 4. Если число узлов интерполяции нечетное, т.е. n = 2m + 1 и все y_i вещественные, то в результате интерполяции по формулам (7.22) и (7.23), будет получена чисто вещественная функция y(x), которая может быть вычислена по другим более удобным формулам:

$$y(x) = b_0 + \sum_{j=1}^{m} b_j \cos\left(2\pi j \cdot \frac{x - x_0}{nh}\right) + \sum_{j=1}^{m} a_j \sin\left(2\pi j \cdot \frac{x - x_0}{nh}\right), \tag{7.24}$$

$$b_0 = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} y_k; b_j = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} y_k \cdot \cos\left(2\pi - \frac{kj}{n}\right); \ a_j = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} y_k \cdot \sin\left(2\pi - \frac{kj}{n}\right), \tag{7.25}$$

где
$$j = (0,1,...,n-1)$$

Пример.

$$n = 4, T = 4, h = 1$$

$$y(x) = \frac{1}{n} \cdot \sum_{\frac{-N}{2} < j \le \frac{N}{2}} A_i \cdot \exp\left(2\pi i j \frac{x - x_0}{nh}\right)$$
, где $nh = T$

$$A_i = \sum_{k=0}^{n-1} y_k \cdot \exp\left(-2\pi i \frac{kj}{n}\right)$$

$$e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$$

X	y
0	0
1	1
2	4
3	9

Найти y(1,5).

Решение.

$$y(1,5) = \frac{1}{4} \cdot \sum_{\frac{-N}{2} < j \le \frac{N}{2}} A_i \cdot \exp\left(2\pi i j \frac{1,5-0}{4}\right) = \frac{1}{4} \cdot \sum_{\frac{-N}{2} < j \le \frac{N}{2}} A_i \cdot \exp\left(\frac{3}{4}\pi i j\right)$$

$$A_{-1} = 0 + 1\left(\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) + 4\left(\cos(\pi) + i\sin(\pi)\right) +$$

$$+9\left(\cos\left(\frac{3\pi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{3\pi}{2}\right)\right) = i - 4 - 9i = -8i - 4$$

$$A_0 = 0 + 1 + 4 + 9 = 14$$

$$A_2 = 0 + 1\left(\cos(-\pi) + i\sin(-\pi)\right) + 4\left(\cos(-\pi) + i\sin(-\pi)\right) +$$

$$+9\left(\cos\left(-\frac{3\pi}{2}\right) + i\sin\left(-\frac{3\pi}{2}\right)\right) = -i - 4 + 9i = 8i - 4$$

$$A_{-1} = \exp\left(-\frac{3\pi}{2}i\right) = -8i - 4\left(-8i - 4\right)\left(-\frac{\sqrt{2}}{2} + i\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = -6\sqrt{2}i - 2\sqrt{2}$$

$$A_0 \exp(0) = A_0 = 14$$

$$A_1 \exp\left(\frac{3\pi}{2}i\right) = (8i - 4)\left(-\frac{\sqrt{2}}{2} + i\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = -6\sqrt{2}i - 2\sqrt{2}$$

$$A_1 \exp\left(\frac{3\pi}{2}i\right) = -6(0 - i) = 6i$$

$$y(1,5) = \frac{1}{4}\left(6\sqrt{2}i - 2\sqrt{2} + 14 - 6\sqrt{2} - 2\sqrt{2} + 6i\right) = \frac{1}{4}\left(14 - 4\sqrt{2} + 6i\right) =$$

$$= \frac{8,3431+6i}{2} = 2,0858 + 1,5i$$

7.4.2 Быстрое преобразование Фурье

На практике при сжатии потоковых данных большое значение имеет следующее преобразование массивов: $(f_0, f_1, ..., f_{N-1}) \leftrightarrow (A_0, A_1, ..., A_{N-1})$, которое находится по формулам прямого дискретного преобразования Фурье:

$$A_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} exp \left\{ -2\pi i \frac{kj}{N} \right\} f_j, k = \overline{0, N-1}, i = \sqrt{-1}$$
 (7.26)

Формула обратного преобразования Фурье:

$$f_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} exp\left\{2\pi i \frac{kj}{N}\right\} A_j, k = \overline{0, N-1}, i = \sqrt{-1}$$
 (7.27)

Трудоемкость вычисления по формулам (7.26) и (7.27) CN2, где C- const, т.к. каждый из N коэффициентов состоит из N слагаемых и каждое слагаемое вычисляется за C действий (C=5 для прямого и обратного преобразования). На самом деле преобразования Фурье можно делать быстрее: $n = \log_2 n$. Делается это с помощью так называемого быстрого преобразования Фурье. Формулы можно найти в литературе.

7.5 Многомерная интерполяция

Пусть мы имеем функцию нескольких переменных f(x,y), значения которой нам известны в некоторых точках. Рассмотрим обычную задачу интерполяции: найти значение функции в некоторой наперед заданной точке. Значения функции f(x,y) нам были известны в узлах (x_k,y_l)

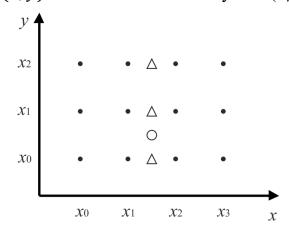


Рис. 7.4 – график функции с заданными точками

- (\cdot) в этих точках значения функции известны.
- (○) в этой точке надо найти значение функции.

Сначала находим значение функции в трех точках (Δ), трижды интерполируем по переменной x (по четырем точкам), y — фиксировано. Получаем значение функции в точках (Δ), после этого один раз интерполируем по переменной y (по трем точкам). Получаем значения функции в \bigcirc (искомой точке). x — фиксировано.

Можно было поступить наоборот:

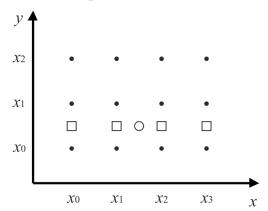


Рис. 7.5 – график функции с заданными точками

Четыре раза интерполируем по y, x — фиксированное. Получаем значение функции в \square . После этого один раз интерполируем по переменной x. Получаем значение в \bigcirc , y — фиксированное.

Значения, полученные данными способами, будут весьма близки.

Пример.

$$f(x,y) = \frac{1}{x+y}$$

$$f(1,1) = ?$$

X	у
0,8	0,9
1,1	1,1
1,4	

$$y_0 = 0.9 \begin{cases} y(x_0, y_0) = \frac{1}{0.8 + 0.9} = 0.5882 \\ y(x_1, y_0) = \frac{1}{1.1 + 0.9} = 0.5 \\ y(x_2, y_0) = \frac{1}{1.4 + 0.9} = 0.4348 \end{cases}$$

$$y_1 = 1.1 \begin{cases} y(x_0, y_1) = \frac{1}{0.8 + 1.1} = 0.5263 \\ y(x_1, y_1) = \frac{1}{1.1 + 1.1} = 0.45 \\ y(x_2, y_{10}) = \frac{1}{1.4 + 1.1} = 0.4 \end{cases}$$

Способ 1: Сначала интерполируем функцию по x. Затем при фиксированном x, интерполируем один раз по x.

$$P_{2}(x, y_{i}) = f(x_{0}, y_{i}) \frac{(x - x_{1})(x - x_{2})}{(x_{0} - x_{1})(x_{0} - x_{2})} + f(x_{1}, y_{i}) \frac{(x - x_{0})(x - x_{2})}{(x_{1} - x_{0})(x_{1} - x_{2})} + f(x_{2}, y_{i}) \frac{(x - x_{0})(x - x_{1})}{(x_{2} - x_{0})(x_{2} - x_{1})}$$

$$P_{2}(x, y_{0}) = 0.5882 \frac{(1 - 1.1)(1 - 1.4)}{(0.8 - 1.1)(0.8 - 1.4)} + 0.5 \frac{(1 - 0.8)(1 - 1.4)}{(1.1 - 0.8)(1.1 - 1.4)} + 0.4348 \frac{(1 - 0.8)(1 - 1.1)}{(1.4 - 0.8)(1.4 - 1.1)}$$

$$P_{2}(x, y_{0}) = 0.47251$$

$$P_{1}(x, y) = f(x, y_{0}) \frac{y - y_{1}}{y_{0} - y_{1}} + f(x, y_{0}) \frac{y - y_{0}}{y_{1} - y_{0}} = 0.52684 \frac{1 - 1.1}{0.9 - 1.1} + 0.67251 \frac{1 - 0.9}{1.1 - 0.9} = 0.4997$$

Способ 2: Сначала интерполируем функцию по y. Затем при фиксированному y и один раз интерполируем по x.

$$\begin{split} P_1(x_i, y) &= f(x_i, y_0) \frac{y - y_1}{y_0 - y_1} + f(x_i, y_1) \frac{y - y_0}{y_1 - y_0} \\ P_1(x_0, y) &= 0.5882 \frac{1 - 1.1}{0.9 - 1.1} + 0.5263 \frac{1 - 0.9}{1.1 - 0.9} = 0.55725 \\ P_1(x_1, y) &= 0.475 \\ P_1(x_2, y) &= 0.4174 \\ P_2(x, y) &= f(x_0, y) \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1, y) \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + f(x_2, y) \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \\ &= 0.55725 \frac{(1 - 1.1)(1 - 1.4)}{(0.8 - 1.1)(0.8 - 1.4)} + 0.475 \frac{(1 - 0.8)(1 - 1.4)}{(1.1 - 0.8)(1.1 - 1.4)} + 0.4174 \frac{(1 - 0.8)(1 - 1.1)}{(1.4 - 0.8)(1.4 - 1.1)} = 0.4997 \end{split}$$

8 Применение интерполяции

8.1 Обратное интерполирование

С помощью обратной интерполяции можно решать нелинейные уравнения вида f(x) = a

Пусть в точках $(x_0, x_1, ..., x_n)$ заданы значения функции:

$$y_0 = f(x_0),$$
 $y_1 = f(x_1), \dots, y_n = f(x_n).$

Предположим, что значения монотонно возрастают или монотонно убывают, т.е. f(x) — монотонная. Тогда для функции f(x) есть обратная функция q(y), и решением данного уравнения f(x) = a будет значение обратной функции q в точке a: q(a) = x.

Таким образом, получена обычная задача интерполяции. Для решений этой задачи используется какой-либо метод интерполяции, например, метод Лагранжа (но при этом необходимо поменять местами *x* и *y*).

Рассмотрим пример. Нам необходимо решить уравнение f(x) = 10. Решение уравнения находим интерполируем обратную функцию в точке y=10

X	У
10	3
15	7
17	11
20	17

$$P_{3}(10) = \frac{(10-7)\cdot(10-11)\cdot(10-17)}{(3-7)\cdot(3-11)\cdot(3-17)}\cdot10 + \frac{(10-3)\cdot(10-11)\cdot(10-17)}{(7-3)\cdot(7-11)\cdot(7-10)}\cdot10 + \frac{(10-3)\cdot(10-7)\cdot(10-11)}{(11-3)\cdot(11-7)\cdot(11-17)}\cdot17 + \frac{(10-3)\cdot(10-7)\cdot(10-11)}{(17-3)\cdot(17-3)\cdot(17-11)}\cdot20 = 16,64$$

Задача. Обратная интерполяция

i	X	У		y
0	2	-2	X	Решаем уравнение: $x^2 - 6 = 0$
1	3	3	-0	/ -
2	4	10		$x = \pm \sqrt{6}$

Интерполируем обратную функцию по трем точкам (по инвертированной формуле Лагранжа)

$$P_2(0) = 2 \cdot \frac{(0-3)(0-10)}{(-2-3)(-2-10)} + 3 \cdot \frac{(0+2)(0-10)}{(3+2)(3-10)} + 4 \cdot \frac{(0+2)(0-3)}{(10+2)(10-3)} = \frac{17}{7} = 2.428571$$

8.2 Численное дифференцирование функций

8.2.1 Постановка задачи численного дифференцирования

В узлах x_i известное значение функции $y_i = f(x_i)$

Задача численного дифференцирования: в любой наперед заданной точке найти значение производной. Поступаем таким же образом, как и в узлах интерполяции: функцию $y_i = f(x_i)$ заменяем на функцию $y_i = q(x_i)$, где $q(x_i)$ — интерполяционный многочлен. Функцию f'(x) заменяем $q'(x_i)$, которую нам нетрудно найти.

8.2.2 Формулы численного дифференцирования

Пусть $x_i = x_0 + i \cdot h$ – равноотстоящие узлы интерполяции. Рассмотрим первый интерполяционный многочлен Ньютона.

$$y(x) = P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!} q + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} q(q-1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!} q(q-1) \cdot (q-2) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} q \cdot (q-1) \cdot (q-2) \cdot \dots \cdot (q-n),$$
 где $q = \frac{x-x_0}{h}$.

Дифференцируем по х:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dy} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{dy}{dq} \cdot \frac{1}{h}$$

$$y'(x) = \frac{1}{h} \cdot \left[0 + \Delta y_0 + \frac{\Delta^2 y_0}{2} (2q - 1) - \frac{\Delta^3 y_0}{6} (3q^2 - 6q + 2) + \frac{\Delta^4 y_0}{24} (4q^3 - 1) + \frac{\Delta^4 y_0}{24} (4$$

Как и в первой интерполяционной формуле Ньютона, суммирование в (8.1) можно оборвать раньше времени. При этом, если в формуле взято k слагаемым (не считая 0), то будет получена производная от интерполяционного многочлена, и интегрирующего функцию не во всех точках, а только в крайних левых (k+1) точках. Для нахождения y''(x) продифференцируем (8.1) еще раз.

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} (\Delta^2 y_0 + \Delta^3 y_0 (q - 1) + \frac{\Delta^4 y_0}{12} (6q^2 - 18q - 11) + \cdots) \quad (8.2)$$

В формуле (8.2), тоже суммирование можно обрывать раньше времени. Положим в формулах (8.1) и (8.2) х = x_0 , т.е. $q = \frac{x - x_0}{n} = \frac{x_0 - x_0}{n} = 0$, получаем частный случай формул численного дифференцирования:

$$y'(x_0) = \frac{1}{h} \left(\Delta y_0 + \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \cdots \right)$$
 (8.3)

Аналогично получаем:

$$y''(x_0) = \frac{1}{h^2} (\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{2} \Delta^4 y_0 + \cdots)$$
 (8.4)

На практике удобно дифференцировать не первую формулу Ньютона в силу ее одностороннего характера, а центральную, например, формулу Стерлинга.

Возьмем из формулы Стирлинга три первых слагаемых, (интерполяция по трем точкам x_{-1} , x_{0} , x_{1}), и получим:

$$P_{2}(x) = y_{0} + \frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_{0}}{2} \cdot q + \frac{q^{2}}{2} \cdot \Delta^{2} y_{-1}; \quad \Delta y_{-1} = y_{0} - y_{-1}$$

$$P_{2}^{\prime(x)} = \frac{1}{h} \cdot \left[\frac{\Delta y_{1} + \Delta y_{0}}{2} + q \cdot \Delta^{2} y_{-1} \right]$$

При $x = x_0$

$$P_2^{\prime(x)} = \frac{1}{h} \cdot \left[\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} \right] = \frac{1}{h} \left[\frac{(y_0 - y_{-1}) + (y_{-1} - y_0)}{2} \right] = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}$$
(8.5)

Если взять 5 слагаемых и проделать аналогичные операции, (т.е. интерполяция по 5-ти точкам x_{-2} , x_{-1} , x_0 , x_1 , x_2), то получим:

$$y'(x_0) = \frac{1}{12n} [y_{-2} - 8y_{-1} + 8y_1 - y_2]$$
 (8.6)

Если же взять первые 3 слагаемых и продифференцировать их дважды по q, то при $x=x_0$ получим:

$$y''(x_0) = \frac{1}{h^2} [\Delta^2 y_{-1}] = \frac{1}{n^2} [y_{-1} - 2y_0 + y_1]$$
 (8.7)

8.2.3 Оценка погрешностей численного дифференцирования

При численном дифференцировании, как и при интерполяции, возникает два вида погрешностей. $\varepsilon_{\rm ycev}$ — из-за замены функции на ее интерполирующий многочлен и ее производной на производную от интерполяционного многочлена. $\varepsilon_{\rm okp}$ — из-за того, что значения y_i известно не точно, а с некоторой погрешностью η .

Теорема 8.1. Погрешность усечения формулы численного дифференцирования (8.1) при суммировании k слагаемых до Δ_k , следующую оценку:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} = (-1)^k \cdot \frac{h^k}{k+1} \cdot f^{(k+1)}(C)$$
, где $C \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_k]$

Доказательство.

$$\begin{split} \varepsilon_{\text{усеч}} &= f'(\mathbf{x}_0) - P_k'(\mathbf{x}_0) = \\ &= \left(f(\mathbf{x}_0) - P_k(\mathbf{x}_0) \right)' \Big|_{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0} = \left[\frac{\varepsilon_{\text{усеч}}}{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0}; \text{ выполняем теорему 7.3} \right] = \\ &= \left(\frac{f^{(k+1)}(C)}{(k+1)!} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \dots (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \right) \Big|_{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0} = \\ &= \left(\frac{f^{(k+2)}(C) \cdot bC'(\mathbf{x})}{(k+1)!} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \dots (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) + \frac{f^{(k+1)}(C)}{(k+1)!} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \dots (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \right) \Big|_{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0} = \\ &= \left(0 + \frac{f^{(k+1)}(C)}{(k+1)!} \cdot ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \cdot \dots \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \cdot \dots \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \right) = \frac{f^{(k+1)}(C)}{(k+1)!} \cdot (-h) \cdot (-2h) \dots (-kh) = (-1)^k \frac{f^{(k+1)}(b)}{(k+1)} \cdot h^k \\ &\varepsilon_{\text{yceq}} = (-1)^k \frac{f^{(k+1)}(C)}{(k+1)!} \cdot h^k \end{split}$$

$$(8.8)$$

Что и доказывает теорему 8.1.

Мы использовали тот факт, что производная C'(x) существует, а это будет так, если функция гладкая. Мы не можем явно оценить C'(x), поэтому не удается явно оценить $\varepsilon_{\text{усеч}}$ в точках, отличных от узлов интерполяции. На практике формулу удобно (8.8) мы заменим на формулу (8.9) — оценка сверху для $\varepsilon_{\text{усеч}}$:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} = \frac{M_{k+1}}{k+1} \cdot h^k$$
, где $M_{k+1} = \max_{x \in (x_0, \dots x_k)} |f^{(k+1)}(x)|$ (8.9)

Если затруднительно оценить k+1 производную, то мы можем заменить на k+1 конечную разность, тогда получим:

$$\varepsilon_{\text{yceq}} \approx \frac{\Delta^{k+1} y_0}{(k+1) \cdot h}$$
(8.10)

Для формул (8.5), (8.6), (8.7) $\varepsilon_{\text{усеч}}$ можно вывести таким же способом, как и в теореме 8.1, получим оценки:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} \le \frac{1}{16} h^2 \cdot M_3 - \text{для (8.5)}.$$

$$\varepsilon_{\text{усеч}} \le \frac{1}{30} h^4 \cdot M_5 - \text{для (8.6)}.$$

$$\varepsilon_{\text{усеч}} \leq \frac{1}{12} h^2 \cdot M_4 - \text{для (8.7)}.$$

Оценим теперь погрешность округления $\varepsilon_{\rm окр}$ до центральных формул. Для формулы (8.5):

$$y'(x_0) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}; \Delta y_1 \le \eta, \Delta y_{-1} \le \eta \Rightarrow \Delta (y_1 - y_{-1}) \le 2\eta$$

Следовательно
$$\varepsilon_{\text{окр}}$$
: $\frac{y_1 - y_{-1}}{2h} \le \frac{2\eta}{2h} = \frac{\eta}{h}$

Аналогично для (8.6) и (8.7):

$$\varepsilon_{\text{OKP}} \leq \frac{18\eta}{12h} = \frac{3\eta}{2h},$$

$$\varepsilon_{\text{окр}} \leq \frac{4\eta}{h^2}$$
.

Заметим, что при h $\to \infty$ $\varepsilon_{\rm yceq} \to 0$, $\varepsilon_{\rm okp} \to \infty$; при h $\to 0$, $\varepsilon_{\rm yceq} \to \infty$, $\varepsilon_{\rm okp} \to 0$; Исследуя $\varepsilon_{\rm yceq} + \varepsilon_{\rm okp}$ на экстремум, нетрудно найти $h_{\rm ont}$.

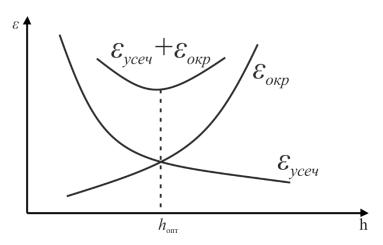


Рис. 8.1 – график погрешности с оптимальным h

Таблица для погрешностей центральных формул

Таблица 8.1

Формула	$arepsilon_{ m yce^{_{ m Y}}}$	$arepsilon_{ m okpyr}$	$h_{ ext{ofttum}}$	$arepsilon_{min}$
8.5	1	$\frac{\eta}{2}$	3 3n	$_{3}\overline{9\eta^{2}M_{3}}$
	$6h^2M_3$	h	$\sqrt{\frac{3\eta}{M_3}}$	$\sqrt{\frac{\eta}{2}}$
8.6	$\frac{1}{30h^4M_5}$	$\frac{3\eta}{2h}$	5 45η	15/8
	3011 M ₅	2h	$\sqrt{4M_5}$	$ \sqrt[5]{\frac{4\eta^4 M_5}{45}} $

8.7	$\frac{1}{12h^2M_4}$	$rac{4\eta}{h^2}$	$\sqrt[4]{\frac{48\eta}{M_4}}$	$\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{M_4\cdot h}$
-----	----------------------	--------------------	--------------------------------	---------------------------------------

Пример.

$$y(x) = \frac{1}{x} \quad h = 0.2$$

X	у
0,6	1,6667
0,8	1,25
1	1
1,2	0,8333
1,4	0,7143

$$y'(x_0) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} = \frac{0.8333 - 1.25}{0.4} = -1.0418$$

$$y'(x_0) = \frac{y_{-2} - 8y_{-1} + 8y_1 - y_2}{12h} = \frac{1.6667 - 10 + 6.6664 - 0.7143}{2.4} = -0.9922$$

$$y''(x_0) = \frac{y_{-1} - 2y_0 + y_2}{h^2} = \frac{1.6667 - 10 + 6.6664 - 0.7143}{0.04} = 2.08025$$

8.3 Численное интегрирование

8.3.1 Постановка задачи численного интегрирования

В точках x_i , где i(0,...,n) известны значения функции y_i . Для любого интервала [a, b] найти определенный интеграл $\int_a^b f(x)dx$.

8.3.2 Формулы численного интегрирования

Как и ранее, основная идея численного интегрирования заключается в том, что мы заменяем оригинальную функцию на интерполирующую ее функцию (интерполирующий многочлен). Его и будем интегрировать.

 $\int_a^b f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \int_a^b P_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ В дальнейшем считаем, что $a = x_0$; $b = x_n$ и все точки x_i — равностоящие.

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} (\sum_{i=0}^n y_i \cdot q_i(x)) dx =
= \sum_{i=0}^n y_i \cdot \int_{x_0}^{x_n} q_i(x) dx = \sum_{i=0}^n y_i \cdot A_i \qquad \text{где } A_i = \int_{x_0}^{x_n} q_i(x) dx.$$

Вычислим коэффициенты A_i для равноотстоящих узлов интерполяции $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0 + i \cdot h$, тогда

$$A_i^n = \int_{x_0}^{x_n} q_i(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1}) \cdot (x - x_{i+1}) \dots}{(x_i - x_0) \dots (x - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1}) \dots} dx =$$

$$\begin{cases} a = \frac{x - x_0}{n} \\ dx = dq \cdot h \\ x = h \cdot q + x_0 \end{cases}$$

$$= \int_0^n \frac{q \cdot h \cdot (q - 1) \cdot h \dots (q - (i - 1) \cdot h \cdot (q - (i + 1) \dots (q - n) h}{i \cdot h \cdot (i - 1) \cdot h \dots (i \cdot h) \cdot (-1) \cdot h (-2h) \dots (-(n - 1)) h} \cdot dq \cdot h =$$

$$= \frac{(-1)^{n-1}h}{i!(n-i)!} \cdot \int_0^n \frac{q \cdot (q - 1) \dots (q - n)}{q - i} dq = \left((b = x_n) - (a = x_0) \right) H_i^n,$$
где $H_i^n = \frac{(-1)^{n-i}}{n \cdot i!(n-i)!} \cdot \int_0^n \frac{q \cdot (q - 1) \dots (q - n)}{q - i} dq$

$$(8.14)$$

Замена A_i^n на H_i^n была сделана для того, чтоб коэффициенты численного интегрирования не зависели от h, а зависели от n и от i.

Получаем общий вид:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} y_i (b-a) H_i^n - формула Ньютона-Котеса$$
 (8.15)

8.3.2.1 Частные случаи формулы Ньютона-Котеса

Выпишем частные случаи:

1. Когда n = 1 (интерполируем по 2 точкам)

$$\begin{split} H_0^1 &= \frac{(-1)^{1-0}}{(1-0)! \cdot 1} \cdot \int_0^1 \frac{q \cdot (q-1)}{q-0} dq = -1 \cdot \left(\frac{q^2}{2} - q\right) \Big|_0^1 = -\left(\frac{1}{2} - 1\right) = \frac{1}{2} \\ H_1^1 &= \frac{(-1)^{1-1}}{1! \cdot (0)! \cdot 1} \cdot \int_0^1 \frac{q \cdot (q-1)}{q-1} dq = 1 \cdot \frac{q^2}{2} \Big|_0^1 = \frac{1}{2} \end{split}$$

Формула Ньютона-Котеса принимает вид:

$$\int_0^1 f(x)dx = (x - x_0) \cdot \left(y_0 \cdot \frac{1}{2} + y_1 \cdot \frac{1}{2}\right) = (x_1 - x_0) \cdot \frac{y_0 + y_1}{2}$$
(8.16)

 Π ри n=1

формула трапеции

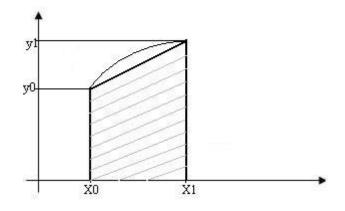


Рис. 8.2 – интеграл на отрезке равен площади трапеции

2. Если n=2

$$\begin{split} H_0^2 &= \frac{(-1)^{2-0}}{0! \cdot (2-0)! \cdot 2} \cdot \int_0^2 \frac{q \cdot (q-1)(q-2)}{q-0} \, dq = \frac{1}{4} \left(\frac{q^3}{3} - \frac{3q^2}{2} + 2q \right) \Big|_0^2 = \frac{1}{6} \\ H_1^2 &= \frac{(-1)^{2-1}}{1! \cdot 1! \cdot 2} \cdot \int_0^2 \frac{q \cdot (q-1)(q-2)}{q-1} \, dq = -\frac{1}{2} \int_0^2 (q^2 - 2q) \, dq = -\frac{1}{2} \left(\frac{q^3}{3} - q^2 \right) \Big|_0^2 = \frac{2}{3} \\ H_2^2 &= \frac{(-1)^{2-2}}{2! \cdot 0! \cdot 2} \cdot \int_0^2 \frac{q \cdot (q-1)(q-2)}{q-2} \, dq = \frac{1}{4} \cdot \int_0^2 (q^2 - q) \, dq = \frac{1}{4} \left(\frac{q^3}{4} - \frac{q^2}{4} \right) \Big|_0^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{8}{3} - \frac{4}{3} \right) = \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{3} = \frac{1}{6} \end{split}$$

При n = 2 формула Котеса принимает вид:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) \, dx = (x_2 - x_0) \cdot \left(y_0 \cdot \frac{1}{6} + y_1 \cdot \frac{2}{3} + y_2 \cdot \frac{1}{6} \right) \tag{8.17}$$

Формула Симпсона при n=2

Таблица коэффициентов Котеса

Таблица 8.2

n	1	2	3	4	5	6
H_0	1/2	1/6	1/8	⁷ / ₉₀	¹⁹ / ₂₂₈	⁴¹ / ₈₄₀
H_1	1/2	2/3	3/8	$^{32}/_{90}$	⁷⁵ / ₂₂₈	²¹⁶ / ₈₄₀
H_2		1/6	3/8	¹² / ₉₀	⁶⁰ / ₂₂₈	²⁷ / ₈₄₀
H_3			1/8	$^{32}/_{90}$	⁶⁰ / ₂₂₈	²⁷² / ₈₄₀
H_4				⁷ / ₉₀	⁷⁵ / ₂₂₈	²⁷ / ₈₄₀
H_5					¹⁹ / ₂₂₈	²¹⁶ / ₈₄₀
H_6						41/840

8.3.3 Погрешности формул численного интегрирования

При численном интегрировании возникают те же два вида погрешностей – погрешность усечения и погрешность округления.

Погрешность усечения возникает из-за замены функции f(x) на интерполирующие ее многочлен.

Теорема 8.2. $\varepsilon_{\text{усеч}}$ (с учетом знака) для формулы трапеции:

$$\varepsilon_{\text{усеч}} = -\frac{h^3}{12} \cdot f''(C), \quad \text{где } C \in (x_0, x_1)$$
(8.18)

Доказательство. Рассмотрим $\varepsilon_{\text{усеч}}$, как функцию, зависящую от h, имеем:

$$\varepsilon(h) = \int_{x_0}^{x_0 + h} f(x) dx - \frac{h \cdot (f(x_0) + f(x_0 + h))}{2}; \quad \varepsilon(0) = 0$$

$$q(t) = q(a) \cdot \int_a^t q'(x) dx; \quad q(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx$$

$$q'(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} f_t'(x, t) dx + f(b(t), t) \cdot b'(t) \cdot f(a(t), t) \cdot a'(t)$$
(8.19)

Дифференцируем по параметру h:

$$\varepsilon'(h) = 0 + f(x_0 + h) \cdot 1 + \dots + 0 - \frac{f(x_0 + h) + f(x_0)}{2} \cdot 1 + \dots + h \cdot \frac{f'(x_0 + h)}{2} = -\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_0) + h - \frac{h}{2}f'(x_0 + \alpha)$$

Заметим, что $\varepsilon_{\text{усеч}}(0)=0;\ \varepsilon'_{\text{усеч}}(0)=0,$ тогда продифференцируем еще раз:

$$\varepsilon''(h) = \frac{1}{2}f'(x_0 + h) - \frac{1}{2}f'(x_0 + h) - \frac{h}{2}f''(x_0 + \alpha)$$

Используя интегральную теорему о среднем, получаем:

$$\varepsilon'(h) = \varepsilon'(0) + \int_0^h \varepsilon''(t)dt = 0 + \int_0^h -\frac{1}{2}f''(x_0 + t)dt =$$

$$= -f''(x_0 + c) \cdot \int_0^h \frac{t}{2}dt = -f''(x_0 + c) \cdot \frac{h^2}{4}$$

$$\varepsilon(h) = \varepsilon(0) + \int_0^h \varepsilon'(t)dt = 0 + \int_0^h f''(x_0 + c(t)) \cdot \left(-\frac{t^2}{4}\right)dt =$$

$$= -f''(x_0 + c_1(t)) \cdot \int_0^2 \frac{t^2}{4}dt = -f''(c) \cdot \frac{t^3}{12}$$

Комментарий к формуле трапеции.

Если f''>0, то $\varepsilon_{
m yceq}<0$ (вогнута вниз), $I_{
m TOY}< I_{
m приб}$, что подтверждает формулу $\varepsilon_{
m yceq}$

Если f'' < 0, то функция выпукла вверх.

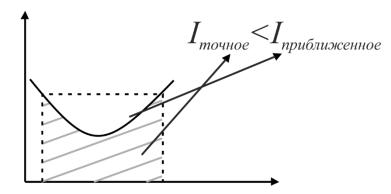


Рис. 8.3 — точное и приближенное значение интеграла при формуле трапеции

Теорема 8.3. $\varepsilon_{\text{усеч}}$ для формулы Симпсона с учетом знака:

$$\varepsilon = -\frac{f''''(C)}{90} \cdot h^5$$
, где $C \in [x_0 - h, x_0 + h]$ (8.20)

Замечание. Как следует из формулы для $\varepsilon_{\text{усеч}}$, формула трапеции будет точна только для многочлена первой степени. Этого следовало ожидать, т.к. при n=1 происходит интерполяция многочлена первой степени. По этой же причине при n=2 (формула Симпсона), эта формула будет точна для многочлена второй степени.

8.3.4 Общие формулы интегрирования (метод трапеций и методы Симпсона)

8.3.4.1 Общая формула трапеции

На практике интерполяция многочленов больших степеней не используется. Поэтому для того, чтобы найти интеграл на большом промежутке, мы разобьем интервал на множество малых интервалов и на каждом применим формулу Ньютона-Котеса, а потом проссумируем интегралы по всем промежуткам.

Общая формула трапеции имеет вид:

Узлы равноотстоящие $x_i = x_0 + ih$.

где h – длина шага сетки.

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{i-1} \int_{x_i}^{x_i+1} f(x) dx = h \cdot \left[\frac{y_0 + y_1}{2} \right] + h \cdot \left[\frac{y_1 + y_2}{2} \right] + \dots + h \cdot \left[\frac{y_{n-1} + y_n}{2} \right] = h \cdot \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=0}^{n-1} y_i \right)$$
(8.21)

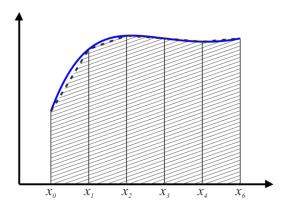


Рис. 8.4 – графическое представление формулы трапеции

8.3.4.2 Общая формула Симпсона

Участок интерполирования разбиваем на группы интервалов (в каждом по 2 интервала). Т.к. формула Симпсона работает на интервале от x_0 до x_2 n=2k — четное.

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx =$$

$$= 2h \cdot \left(\frac{1}{6}y_0 + \frac{2}{3}y_1 + \frac{1}{6}y_2\right) + 2h \cdot \left(\frac{1}{6}y_2 + \frac{2}{3}y_3 + \frac{1}{6}y_4\right) + \dots +$$

$$+2h \cdot \left(\frac{1}{6}y_{n-2} + \frac{2}{3}y_{n-1} + \frac{1}{6}y_n\right) =$$

$$= 2h\left(\frac{1}{6}y_0 + \frac{1}{6}y_n + \frac{2}{3}\cdot (y_1 + y_3 + y_5 + \dots + y_{2n-1}) +$$

$$+ \frac{1}{3}\cdot (y_2 + y_4 + y_6 + \dots + y_{n-2})\right) = \frac{h}{3}\left((y_0 + y_n) + 4(y_1 + y_3 + y_5 + \dots + y_{n-1}) +$$

$$+ y_{n-1}\right) + 2(y_2 + y_4 + y_6 + \dots + y_{n-2}),$$

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{3}\left((y_0 + y_n) + 4(y_1 + y_3 + y_5 + \dots + y_{n-1}) +$$

$$+2(y_2 + y_4 + y_6 + \dots + y_{n-2})\right)$$

$$(8.22)$$

Рис. 8.5 – графическое представление формулы Симпсона

8.3.5 Погрешности общих формул трапеции и Симпсона

Оценим $\varepsilon_{\text{усеч}}$ для формулы трапеции (8.21). Очевидно, что $\varepsilon_{\text{усеч}}$ есть сумма всех $\varepsilon_{\text{усеч}}$ на каждом интервале:

$$\varepsilon_{\text{yceq}} = \varepsilon_{\text{yceq}}[x_0, x_1] + \dots + \varepsilon_{\text{yceq}}[x_{n-1}, x_n] =$$

$$= -\frac{h^3}{12} \cdot f''(c_1) - \frac{h^3}{12} \cdot f''(c_2) - \dots =$$

$$= -\frac{h^3}{12} \cdot (\sum_{i=1}^n f''(c_i))$$

По дискретной теореме о среднем:

$$\varepsilon_{\text{yceq}} = -\frac{h^3}{12} n \cdot f''(c) = -(b-a) \cdot \frac{h^2}{12} \cdot f''(c) \qquad [n = \frac{b-a}{h}]$$

$$\varepsilon_{\text{yceq}} = -(b-a) \cdot \frac{h^2}{12} \cdot f''(c) \qquad (8.23)$$

 $arepsilon_{
m vceq}$ для общей формулы трапеции.

Очевидно, что на практике формулу (8.23) мы заменим на формулу (8.24).

$$h^2 \cdot \frac{(b-a)}{12} \cdot M_2 \ge \varepsilon_{\text{yceq}} \tag{8.24}$$

Аналогично для формулы Симпсона получим (с учетом знака):

$$\varepsilon_{\text{yceq}} = -\frac{(b-a)}{180} \cdot h^4 \cdot f''''(c)$$
 (8.25)

$$h^4 \cdot \frac{(b-a)}{180} \cdot M_4 \ge \varepsilon_{\text{yceq}} \tag{8.26}$$

 $arepsilon_{
m yceq}$ для формулы трапеции и Симпсона:

$$\varepsilon_{\text{yce}^{\text{y}}} \leq (b-a) \cdot \eta$$

8.3.6 Метод двойного пересчета для определения погрешностей

Часто бывает затруднительным оценка $\varepsilon_{\text{усеч}}$ при использовании формулы трапеции или Симпсона, так как приходится считать вторую или четвертую производные. В этом случае используется метод двойного пересчета.

Сущность метода состоит в том, что значение интеграла вычисляется дважды: с шагом $h(I_h)$, и с шагом $\frac{h}{2}(I_{h/2})$. Тогда, как мы знаем, для формулы трапеции:

$$I = I_h - h^2 \cdot \frac{(b-a)}{12} \cdot f''(c)$$
 , тогда $I = I_{h/2} - \frac{h^2}{4} \cdot \frac{(b-a)}{12} \cdot f''(c_1)$

Как правило, значения c и c_1 достаточно близки, следовательно $f''(c) = f''(c_1)$, по этой причине отклонение $I_{h/2}$ от I точного будет в 4 раза меньше, чем отклонение I_h от I точного.

Поэтому на практике используется следующий прием:

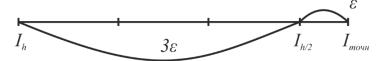


Рис. 8.6 – отношение погрешности вычислений при разном шаге

Если $\left|I_{h}-I_{h/2}\right|<3\varepsilon$ (8.27) для формулы трапеции, то мы прекращаем вычисления, т.к. следует ожидать, что $\left|I-I_{h/2}\right|<\varepsilon$ и поэтому, если мы возьмем в качестве $I_{h/2}$ точного значения, то оно будет отклоняться от I_{n} не более чем на заданную погрешность ε . Если же эта точность не достигнута, то уменьшаем шаг интерполирования в 2 раза и т.д. пока не будет достигнуто соотношение (8.27).

Если мы применим подобный прием для формулы Симпсона, то при уменьшении шага h вдвое $\varepsilon_{\text{усеч}}$ уменьшится не в 4 раза, а в 16 раз, и поэтому в формуле (8.27) мы заменим 3ε на 15ε :

$$\left|I_h - I_{h/2}\right| < 15\varepsilon \tag{8.28}$$

Говорят, что формула трапеции имеет второй порядок точности, т.к. для оценки $\varepsilon_{\text{усеч}}$ h участвует во второй степени. При уменьшении шага в k раз погрешность уменьшается в k^2 раз, следовательно формула Симпсона имеет четвертый порядок точности.

Метод коррекции во втором пересчете.

Как следует из картинки (рис. 8.6) при двойном пересчете в качестве точного значения нам выгодно брать не I_h и $I_{h/2}$, а $I_{\text{корр}}$.

$$I_{\text{kopp}} = I_{h/2} - \frac{1}{3} \left(I_h - I_{h/2} \right) \quad (8.29)$$

После коррекции точность метода возрастает на порядок, т.е. метод трапеции будет не второго, а третьего порядка точности, а метод Симпсона — пятого порядка точности.

Пример.

Формула трапеции

$$\begin{split} \int_{1}^{2} \frac{1}{x} dx &= (1.1 - 1) \left(\frac{1}{2} \cdot 1 + \frac{1}{2} \cdot 0.9091 \right) + \\ (1.2 - 1.1) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.9091 + \frac{1}{2} * 0.8333 \right) + \\ (1.3 - 1.2) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.8333 + \frac{1}{2} \cdot 0.7692 \right) + \\ (1.4 - 1.3) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.7692 + \frac{1}{2} \cdot 0.7142 \right) + \\ (1.5 - 1.4) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.7142 + \frac{1}{2} \cdot 0.6667 \right) + \\ (1.6 - 1.5) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.6667 + \frac{1}{2} \cdot 0.625 \right) + \\ (1.7 - 1.6) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.625 + \frac{1}{2} \cdot 0.5882 \right) + \\ (1.8 - 1.7) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.5882 + \frac{1}{2} \cdot 0.5556 \right) + \\ (1.9 - 1.8) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.5556 + \frac{1}{2} \cdot 0.5263 \right) + \\ (2.0 - 1.9) \left(\frac{1}{2} \cdot 0.5263 + \frac{1}{2} \cdot 0.5 \right) = 0.6939 \\ a &= 1; b = 2; \\ \varepsilon_{\text{yceq}} \leq \frac{h^{2}(b - a)}{12} M_{2} \qquad \qquad \varepsilon_{\text{yceq}} \leq (b - a) \eta \\ M_{2} &= \max |f''(c)| = \frac{2}{r^{3}} \end{split}$$

Так как производная убывающая, то максимальное значение достигается в крайней левой точке интервала [1;2], то есть в 1 $(\frac{2}{13})$ = 2.

 $\eta = 0.5*10^{-5}$ – так как мы делали округление до 4-го знака, то η равно половине 10^{-4}

 $M_2 = 2$ — максимальное значение производной на отрезке [1;2]

$$\varepsilon_{\text{усеч}} \le \frac{0.2^2(2-1)}{12} * 2;$$
 $\varepsilon_{\text{усеч}} \le 0.00666$
$$\varepsilon_{\text{окр}} \le \frac{\eta}{h} \le \frac{0.5 \cdot 10^{-5}}{0.1} \le 0.5 \cdot 10^{-4}$$

Пример.

Формула Симпсона

$$\begin{split} &\int_{1}^{2} \frac{1}{x} dx = (1.2 - 1) \left(\frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{4}{6} \cdot 0.9091 + \frac{1}{6} \cdot 0.08333 \right) \\ &+ (1.4 - 1.2) \left(\frac{1}{6} \cdot 0.8333 + \frac{4}{6} \cdot 0.7692 + \frac{1}{6} \cdot 0.7143 \right) \\ &+ (1.6 - 1.4) \left(\frac{1}{6} \cdot 0.7143 + \frac{4}{6} \cdot 0.6667 + \frac{1}{6} \cdot 0.625 \right) \\ &+ (1.8 - 1.6) \left(\frac{1}{6} \cdot 0.625 + \frac{4}{6} \cdot 0.5882 + \frac{1}{6} \cdot 0.5556 \right) \\ &+ (2.0 - 1.8) \left(\frac{1}{6} \cdot 0.5556 + \frac{4}{6} \cdot 0.5263 + \frac{1}{6} \cdot 0.5 \right) = 0.6932 \\ &a = 1; b = 2; \\ &\varepsilon_{\text{yceq}} \le \frac{h^4 (b - a)}{180} M_4 \qquad \qquad \varepsilon_{\text{yceq}} \le (b - a) \eta \\ &M_4 = \max |f''''(c)| = \frac{24}{r^5} \end{split}$$

Так как производная убывающая, то максимальное значение достигается в крайней левой точке интервала [1;2], то есть в 1 $\left(\frac{24}{13}\right) = 24$.

 $\eta = 0.5*10^{-5}$ – так как мы делали округление до 4-го знака, то η равно половине 10^{-4}

 $M_4 = 24$ — максимальное значение производной на отрезке [1;2]

$$\varepsilon_{\text{yceq}} \le \frac{0.2^4(2-1)}{180} * 24;$$
 $\varepsilon_{\text{yceq}} \le 0.000213$ $\varepsilon_{\text{okp}} \le \frac{\eta}{h} \le \frac{0.5 \cdot 10^{-5}}{0.1} \le 0.5 \cdot 10^{-4}$

- 9 Численные методы решения дифференциальных уравнений (ДУ) и систем дифференциальных уравнений (СДУ)
- 9.1 Постановка задачи и общая идея решения

9.1.1 Постановка задачи

Необходимо решить ДУ и СДУ на некотором наперёд заданном интервале с наперёд заданной точностью, либо оценить погрешность.

Используя численные методы, мы ищем только частные решения ДУ.

9.1.2 Простейший вариант задачи и простейший метод ее решения

Простейший вариант – решение уравнения первого порядка. Имеем ДУ первого порядка с одним заданным условием:

$$\left\{ egin{aligned} f(x,y,y') &= 0 & (\mbox{ДУ}) \ y(x_0) &= y_0 & (\mbox{начальное условие}) \end{aligned}
ight\}$$
 задача Коши

В дальнейшем будем рассматривать ДУ, разрешенное относительно старшей производной

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \tag{9.1}$$

9.1.3 Общая идея всех методов решения ДУ и СДУ

Фиксируем шаг h и будем находить последовательно по некоторым специальным формулам $y(x_1), y(x_2), ..., y(x_n)$, где x_i – равностоящие точки, а (x_0, x_n) – границы интервала, при этом $y(x_0)$ – известна по условию задачи. Шаг h необходимо брать достаточно малым, чтобы минимизировать погрешность вычислений.

9.2. Методы решения ДУ

9.2.1 Простейший метод решения ДУ – метод Эйлера, его геометрическая интерпретация

Заметим, что $y'(x_0) = f(x_0, y(x_0)) = f(x_0, y_0)$ — величина известная. Заменим y (известное) на касательную:

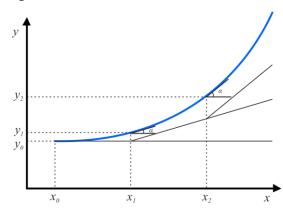
$$y(x_1) = y(x_0) + y'(x_0) \cdot h = y(x_0) + f(x_0, y_0) \cdot h$$

Проделаем то же самое в точке x_2 и т.д., получим общий вид решения ДУ:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + f(x_i, y_i) \cdot h$$
 – формула Эйлера (9.2)

Геометрическая интерпретация метода Эйлера

В методе Эйлера точное значение $(y(x_i))$ заменяют на значение касательной, проведенной к графику y(x) в точке (x_i, y_i) . Локальная погрешность метода Эйлера $\leq const \cdot h^2$



Пример.

$$\begin{cases} y' = 2 \cdot x - y & f(x,y) = 2 \cdot x - y \\ y(1) = 3 & x_0 = 1 \quad y_0 = 3 \end{cases}$$

$$h = 0,2$$

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i) \cdot h$$

$$\text{IIIar 1:}$$

$$f(x_0, y_0) = 2 \cdot 1 - 3 = -1$$

$$y_1 = y_0 + f(x_i, y_i) \cdot h = 3 + (-1) \cdot 0,2 = 2,8$$

$$\text{IIIar 2:}$$

$$f(x_1, y_1) = 2 \cdot 1,2 - 2,8 = -0,4$$

$$y_2 = 2,8 + (-0,4) \cdot 0,2 = 2,72$$

$$\text{IIIar 3:}$$

$$f(x_2, y_2) = 2 \cdot 1,4 - 2,72 = 0,08$$

$$y_3 = 2,72 + 0,08 \cdot 0,2 = 2,736$$

9.2.2 Простейшие модификации метода Эйлера (метод Рунге-Кутта второго порядка)

Заменим приращение функции на первом шаге $y(x_1)-y(x_0)$ не на $h\cdot y'(x_i)$, как делали в методе Эйлера, а на более точное значение в середине интервала: $h\cdot y'(x_0+h/2)$. А для того, чтобы найти $y'(x_0+h/2)=f(x_0+h/2)$, $y(y_0+h/2)$) заменим $y(x_0+h/2)\approx y(x_0)+h/2\cdot f(x_0,y_0)$.

И формула принимает окончательны вид:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y^*\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right) \\ y^*\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) = y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i) \end{cases}$$
(9.3)

Данный метод носит название метод Рунге-Кутта с усреднением по времени.

Локальная погрешность метода Рунге-Кутта второго порядка — $const \cdot h^3$, т.е. на порядок лучше, чем у метода Эйлера.

Пример.

$$\begin{cases} y' = 2 \cdot x - y \\ y(1) = 3 \end{cases} \qquad f(x,y) = 2 \cdot x - y \\ x_0 = 1 \quad y_0 = 3 \end{cases}$$

$$h = 0,2$$

$$y_{i+1} = y_i + f\left(x_i + \frac{h}{2}, \overline{y_{i+\frac{1}{2}}}\right) \cdot h$$

$$\overline{y_{i+\frac{1}{2}}} = y_i + f(x_i, y_i) \cdot \frac{h}{2}$$
IIIar 1:
$$f(x_0, y_0) = 2 \cdot 1 - 3 = -1$$

$$\overline{y_{\frac{1}{2}}} = y_0 + f(x_0, y_0) \cdot \frac{h}{2} = 3 + (-1) \cdot 0, 1 = 2,9$$

$$f\left(x_0 + h, \overline{y_{\frac{1}{2}}}\right) = 2 \cdot 1, 1 - 2, 9 = -0, 7$$

$$y_1 = y_0 + f\left(x_0 + \frac{h}{2}, \overline{y_{\frac{1}{2}}}\right) \cdot h = 3 + (-0, 7) \cdot 0, 2 = 2,86$$
IIIar 2:
$$f(x_1, y_1) = 2 \cdot 1, 2 - 2,86 = -0,46$$

$$\overline{y_{1+\frac{1}{2}}} = 2,86 + (-0,46) \cdot 0, 1 = 2,814$$

$$f\left(x_1 + h, \overline{y_{1+\frac{1}{2}}}\right) = 2 \cdot 1, 3 - 2,86 = -0,216$$

$$y_2 = 2,86 + (-0,216) \cdot 0, 2 = 2,8168$$
IIIar 3:
$$f(x_2, y_2) = 2 \cdot 1, 4 - 2,8168 = -0,0138$$

$$\overline{y_{2+\frac{1}{2}}} = 2,8168 + (-0,0138) \cdot 0, 1 = 2,8124$$

$$f\left(x_1 + h, \overline{y_{1+\frac{1}{2}}}\right) = 2 \cdot 1,5 - 2,8168 = -0,1876$$

$$y_2 = 2,8168 + 0,1876 \cdot 0,2 = 2,8513$$

9.2.3 Другая интерпретация метода Эйлера (с усреднением по производной)

Используем следующую идею:

$$y(x_1) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_1} y'(t)dt = y(x_0) + \frac{h}{2} y'(x_0) + y'(x_1)$$

Заменяем $y'(x_1) = f(x_1, x_1) \approx (x_0) + h \cdot f(x_0, y_0)$.

И получаем окончательный вид формулы:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \cdot (f(x_i, y_i) + f(x_i, y_{i+1}^*)) \\ y_{i+1}^* = y_i + hf(x_i, y_i) \end{cases}$$
(9.4)

Пример.

$$\begin{cases} y' = 2 \cdot x - y & f(x, y) = 2 \cdot x - y \\ y(1) = 3 & x_0 = 1 & y_0 = 3 \end{cases}$$

$$h = 0.2$$

$$y_{i+1} = y_i + \left(f(x_i, y_i) + f(x_i + h, \overline{y_{i+1}}) \right) \cdot \frac{h}{2}$$

$$\overline{y_{i+1}} = y_i + f(x_i, y_i) \cdot \frac{h}{2}$$

Шаг 1:

$$f(x_0, y_0) = 2 \cdot 1 - 3 = -1$$

$$\overline{y_1} = y_0 + f(x_0, y_0) \cdot \frac{h}{2} = 3 + (-1) \cdot 0.1 = 2.9$$

$$f(x_0 + h, \overline{y_1}) = 2 \cdot 1, 2 - 2, 9 = -0,5$$

$$y_1 = y_0 + (f(x_0, y_0) + f(x_0 + h, \overline{y_1})) \cdot \frac{h}{2} = 3 + (-1 + (-0.5)) \cdot 0.1 = 2.85$$

Шаг 2:

$$f(x_1, y_1) = 2 \cdot 1,2 - 2,85 = -0,45$$

$$\overline{y_2} = 2,85 + (-0,45) \cdot 0,1 = 2,805$$

$$f(x_1 + h, \overline{y_2}) = 2 \cdot 1.4 - 2.805 = -0.005$$

$$y_2 = 2.85 + (-0.45 + (-0.005)) \cdot 0.1 = 2.8045$$

Шаг 3:

$$f(x_2, y_2) = 2 \cdot 1.4 - 2.8045 = -0.0045$$

$$\overline{y_3} = 2,8045 + (-0,0045) \cdot 0,1 = 2,80405$$

$$f(x_2 + h, \overline{y_3}) = 2 \cdot 1.6 - 2.80405 = 0.39595$$

$$y_2 = 2,85 + (-0,45 + (-0,005)) \cdot 0,1 = 2,84365$$

9.2.4 Сведение дифференциальных уравнений высших порядков к системе дифференциальных уравнений первого порядка.

Рассмотрим ДУ разрешенное относительно старшей производной и задачу Коши для данного уравнения.

$$\begin{cases} y^{(n)}(x) = f\left(x,y,y',y'',...,y^{(n-1)}\right) - \text{дифференциальное уравнение} \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \\ y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)} \end{cases}$$
 начальные условия (9.5)

Чтобы свести (9.5) в системе дифференциальных уравнений первого порядка (задача Коши), поступают так: Вводят вспомогательную функцию:

$$Y(x) \begin{cases} y(x) \\ y'(x) \\ y''(x) \\ y''(x) \end{cases}, \quad \text{тогда} \qquad Y'(x) = \begin{pmatrix} y'(x) \\ y''(x) \\ \vdots \\ y^{(n-1)}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y'(x) \\ y''(x) \\ \vdots \\ y^{(n-1)}(x) \\ f(x,y,y',...,y^{(n-1)}) \end{pmatrix}$$

$$F(X(Y = y, y', ..., y^{(n-1)}))$$

$$Y(x_0) = \begin{pmatrix} y(x_0) \\ y'(x_0) \\ \vdots \\ (n-1)(x) \end{pmatrix}$$

Таким образом (9.5) преобразовалась в (9.6)

$$\begin{cases} Y' = F(X, Y) \\ Y(x_0) = Y_0 \end{cases} \tag{9.6}$$

Итак, вместо задачи Коши (9.5) с дифференциальным уравнением n-го порядка мы получим (9.6) с системой 1-го порядка. (9.6) может быть решена методом Эйлера или Рунге-Кутта n-го порядка с усреднением по времени, только в формуле нужно писать вместо y и f – Y и F, т.е. заменять функцию y на вектор-функцию Y(x) и f на вектор-функцию F(x).

Рассмотрим пример сведения дифференциальных уравнений 2-го порядка к системе дифференциальных уравнений 1-го порядка и выполнения шагов по методу Эйлера. Имеем:

$$\begin{cases} y'' - 2y'x = 1 - y \\ y(1) = 2 \\ y'(1) = -2 \end{cases} \rightarrow y'' = 1 - y + 2y'x$$

Сводим эту систему к СДУ 2-х уравнений 1-го порядка. Вводим $Y = \begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix}$, получим следующую задачу Коши:

$$\begin{cases} Y' = (\frac{y'}{1+2y'x-y}) \\ Y_{(1)} = (\frac{2}{-2}) \end{cases}$$
, возьмем шаг h=0,1

Пример вычисления двух шагов по формуле Эйлера:

$$Y(1,1) = Y(1) + 0.1F(1,Y(1)) = \left(\frac{2}{-2}\right) + 0.1\left(\frac{-2}{1+2\cdot(-2)\cdot 1-2}\right) = \left(\frac{1,8}{-2,5}\right);$$

$$1,8 = y(1,1); (-2,5) = y'(1,1);$$

$$Y(1,2) = Y(1,1) + 0.1F(1,1Y(1,1)) = \left(\frac{1,8}{-2,5}\right) + 0.1\left(\frac{-2,5}{1+2\cdot(-2,5)\cdot 1,1-1,8}\right) =$$

$$= \left(\frac{1,55}{-3,33}\right);$$

9.2.5 Метод Рунге-Кутта 4-го порядка

Наиболее употребляемым при вычислении ДУ и СДУ является метод Рунге-Кутта 4-го порядка. В векторной формуле у меняем на Y, f на F, k на K, где k_1-k_n вспомогательные коэффициенты.

Формулы метода Рунге-Кутта 4-го порядка:

$$k_{1} = f(x_{i}, y_{i})$$

$$k_{2} = f(x_{i} + \frac{h}{2}, y_{i} + \frac{h}{2}k_{1})$$

$$k_{3} = f(x_{i} + \frac{h}{2}, y_{i} + \frac{h}{2}k_{2})$$

$$k_{4} = f(x_{i} + h, y_{i} + h k_{3})$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i}) + \frac{h}{6}(k_{1} + 2k_{2} + 2k_{3} + k_{4})$$
(9.8)

9.2.6 Локальные и глобальные погрешности одношаговых методов Эйлера и Рунге-Кутта

Комментарий. Как и при численном интегрировании, при переходе от локальной к глобальной погрешности точность метода уменьшается на порядок.

Метода	$arepsilon_{ m extsf{nok}}$	$arepsilon_{ ext{r,nof}}$
Эйлера	$const \cdot h^2$	$const \cdot h$
Рунге-Кутта 2-го		
порядка по времени	$const \cdot h^3$	$const \cdot h^2$
Рунге-Кутта 2-го		
порядка по	$const \cdot h^3$	$const \cdot h^2$
производной		
Рунге-Кутта 4-го	$const \cdot h^5$	$const \cdot h^4$
порядка		

9.2.7 Оценка погрешностей решения ДУ и СДУ методом двойного пересчета. Коррекция решения

Оценка погрешности решения ДУ очень сложная задача, даже сложнее чем при численном интегрировании, так как const, участвующие в оценке погрешности, трудно очень оценить. Поэтому поступают, как и в случае с численным интегрированием, используют двойной пересчет, т.е. находят решение ДУ на отрезке [a,b] дважды, с шагом h и h/2 и при этом получаем следующую картинку (рис. 9.2).

$$h = \begin{pmatrix} 0 & y_1 & y_2 & y_3 \\ h = & 0 & 0 & 0 \\ h/2 = & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Рис. $9.2 - \Pi$ ары значений с шагом h и h/2

Если во всех этих парах различны не более 15ε для метода 4-го порядка и 3ε для метода 2-го порядка, мы останавливаемся и в качестве точного решения берем y с шагом h/2. Если различия больше, то шаг уменьшается вдвое, и т.д.

Как и при численном интегрировании, неплохо бы сделать коррекцию. Выгодно в качестве точного решения брать не y с шагом h/2, а y корректированное:

$$y_{\text{kop}} = y_{h/2} - \frac{1}{3} \cdot (y_h - y_{h/2})$$

Недостаток такого способа в том, что $y_{\text{кор}}$ известно в более редком наборе точек с шагом h, у известен с шагом h/2.

9.2.8 Многошаговые методы решения ДУ и СДУ

Все рассмотренные нами ранее методы: Эйлера, Рунге-Кутта второго порядка по времени или производной, Рунге-Кутта 4-го порядка, являются одношаговыми, т.к. в каждом из них для вычисления последующего значения $Y^{(i+1)}$ использовалось только одно значение Y^i , найденное на предыдущем шаге.

В многошаговых методах для расчета Y_{i+1} используется не только Y_i , но и предыдущие значения: $Y_i, Y_{i-1}, \dots, Y_{i-(k-1)}$. Многошаговые методы дают лучший результат по сравнению с одношаговыми из-за того, что они более устойчивы к ошибкам вычислений, погрешность у них накапливается медленнее. Многошаговых методов много. Наиболее распространенным является метод Милна.

$$y_{i+1}^* = y_{i-3} + \frac{4h}{3} \left(2 \cdot f(x_{i-2}, y_{i-2}) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 2f(x_i, y_i) \right)$$

$$y_{i+1}^* = y_{i-1} + \frac{h}{3} \left[f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 4(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*) \right]$$
(9.9)

Метод Милна 4-х шаговый, т.к. для нахождения y_{i+1} используется четыре предыдущих значений $(y_i; y_{i-1}; y_{i-2}; y_{i-3})$, поэтому перед его применением необходимо рассчитать первые три шага любым одномерным методом.

9.3 Краевые задачи для дифференциальных уравнений

До сих пор при решении ДУ и СДУ мы рассматривали задачу Коши, т.е. когда начальные условия заданы в точке x_0 . Если же начальные условия заданы не в одной, а в нескольких точках, то такая задача называется краевой. Рассмотрим простейший вариант краевой задачи:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'') \\ y(a) = y_0 \\ y(b) = y_1 \end{cases}$$
 (9.10)

А мы умеем решать только задачу Коши:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'') \\ y(a) = y_0 \\ y'(a) = y'_0 \end{cases}$$
(9.11)

В (9.11) y_0 известен, а y'_0 будем подбирать. Делается это с помощью метода стрельб. Пусть $y'_0 = 0$, тогда после 3-го шага мы начинаем пристрелку методом МПД или хорд. Для начала положим $y'_0 = 0$ — получим недолет, поэтому будем увеличивать y'_0 до 1...

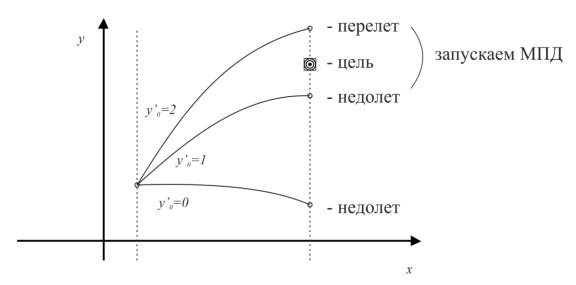


Рис. 9.3 – Визуальное представление метода стрельб.

На практике это выглядит так, как будто мы решаем нелинейное уравнение $y(k)=y_1;\ y_1=y_0+k\cdot|b-a|$, где $k={y'}_0,k-$ входной аргумент задачи Коши (9.11).

9.4 Что делать, если дифференциальное уравнение не может быть решено относительно старшей производной

Если дифференциальные уравнение не может быть решено относительно старшей производной, то наша цель на каждом шаге выбранного нами метода по известным x, y, y', найти y''. Это нужно, чтобы сделать шаг выбранным нами методом. Если уравнение решается, то делается одно действие

$$x \cdot y'' + \sin y' - y = x + y'$$
$$y'' = \frac{x + y' + y - \sin y'}{x}$$

Если же наше дифференциальное уравнение не может быть разрешено относительно y'', например имеет следующий вид:

$$x \cdot y'' + \sin y'' - y = x + y'$$

Тогда мы поступаем следующем образам. На каждом шаге x, y, y нам известны, следовательно получаем относительно y'' нелинейное уравнение, которое мы решаем приглянувшимся нам методом (МПД, хорд, Ньютона).

Пример.

Метод Эйлера

$$\begin{cases} y'' = xy' + y \\ y(1) = 2 \\ y'(1) = -1 \end{cases} \qquad h = 0,2 \qquad y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i) \cdot h$$

Начальное условие:

$$y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$y_{1} = {2 \choose -1} + {1 \choose 1 \cdot (-1) + 2} \cdot 0.2 = {1,8 \choose -0.8}$$

$$y_{2} = {1,8 \choose -0.8} + {0 \choose 1,2 \cdot (-0.8) + 1.8} \cdot 0.2 = {1,64 \choose -0.632}$$

$$y_{3} = {1,64 \choose -0.632} + {0 \choose 1,4 \cdot (-0.632) + 1.64} \cdot 0.2 = {1,5136 \choose -0.48096}$$

Пример.

Метод Рунге-Кутта 2-го порядка с усреднением по времени

$$\begin{cases} y'' = xy' + y \\ y(1) = 2 \\ y'(1) = -1 \end{cases} h = 0,2$$

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i + \frac{h}{2}, \overline{y_{i+\frac{1}{2}}}) \cdot h$$

$$\overline{y_{i+1}} = y_i + f(x_i, y_i) \cdot \frac{h}{2}$$

Начальное условие:

$$y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\overline{y_{0,5}} = {2 \choose -1} + {1 \choose 1 \cdot (-1) + 2} \cdot 0.1 = {1.9 \choose -0.9}$$

$$y_1 = {2 \choose -1} + {1 \choose 1 \cdot (-1) + 2} \cdot 0.2 = {1.82 \choose -0.818}$$

$$\overline{y_{1,5}} = \begin{pmatrix} 1.82 \\ -0.818 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.818 \\ 1.2 \cdot (-0.818) + 1.82 \end{pmatrix} \cdot 0.1 = \begin{pmatrix} 1.6732 \\ -0.66124 \end{pmatrix}$$

$$y_2 = \begin{pmatrix} 1.82 \\ -0.818 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.73416 \\ 1 \cdot (-0.73416) + 1.7382 \end{pmatrix} \cdot 0.2 = \begin{pmatrix} 1.6732 \\ -0.66124 \end{pmatrix}$$

$$\overline{y_{2,5}} = \begin{pmatrix} 1,6732 \\ -0,66124 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,66124 \\ 1 \cdot (-0,66124) + 1,6732 \end{pmatrix} \cdot 0,1 = \begin{pmatrix} 1,6732 \\ -0,58649 \end{pmatrix}$$

$$y_2 = \begin{pmatrix} 1,6732 \\ -0,66124 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,58649 \\ 1 \cdot (-0,58649) + 1,6071 \end{pmatrix} \cdot 0,2 = \begin{pmatrix} 1,5559 \\ -0,51577 \end{pmatrix}$$

Пример.

Метод Рунге-Кутта 2-го порядка с усреднением по производной

$$\begin{cases} y'' = xy' + y \\ y(1) = 2 \\ y'(1) = -1 \end{cases} \qquad y_{i+1} = y_i + (f(x_i, y_i) + f(x_i + h, \overline{y_{i+1}})) \cdot \frac{h}{2}$$

Начальное условие:

$$y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Шаг 1:

Illar 1:
$$\overline{y_1} = {2 \choose -1} + {1 \choose 1 \cdot (-1) + 2} \cdot 0.1 = {1.9 \choose -0.9}$$

$$y_1 = {2 \choose -1} + {1 \choose 1 \cdot (-1) + 2} + {1 \choose 1.2 \cdot (-0.9) + 1.9} \cdot 0.1 = {1.81 \choose -0.818}$$
Illar 2:
$$\overline{y_2} = {1.81 \choose -0.818} + {0.818 \choose 1.2 \cdot (-0.818) + 1.81} \cdot 0.1 = {1.7282 \choose -0.73516}$$

$$y_2 = {1.81 \choose -0.818} + {0 \choose 1.2 \cdot (-0.818) + 1.81} + {0 \choose -0.66526}$$

$$y_3 = {1.6547 \choose -0.66526} + {0.66526 \choose 1.4 \cdot (-0.66526) + 1.6547} \cdot 0.1 = {1.5882 \choose -0.7282}$$

$$y_3 = {1.6547 \choose -0.66526} + {0 \choose 1.4 \cdot (-0.66526) + 1.6547} + {0.59293 \choose 1.6 \cdot (-0.59293) + 1.5882} \cdot 0.1 = {1.5289 \choose -0.52898}$$

Пример.

Метод Рунге-Кутта 4-го порядка. 5 шагов. Метод Милна

$$\begin{cases} y'' = xy' + y \\ y(1) = 2 \\ y'(1) = -1 \end{cases} h = 0,2$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1)$$

$$k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$$

$$y_{i+1} = y_i \frac{h}{6}(k_1 + k_2 + k_3 + k_4)$$

Начальное условие:

$$y_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$k_{1} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \cdot (-1) + 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$y_{0} + 0.1k_{1} = \begin{pmatrix} 1.9 \\ -0.9 \end{pmatrix}$$

$$k_{2} = \begin{pmatrix} -0.9 \\ 1.1 \cdot (-0.9) + 1.9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.9 \\ 0.91 \end{pmatrix}$$

$$y_{0} + 0.1k_{2} = \begin{pmatrix} 1.91 \\ -0.909 \end{pmatrix}$$

$$k_{3} = \begin{pmatrix} -0.909 \\ 1.1 \cdot (-0.909) + 1.91 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.909 \\ 0.9101 \end{pmatrix}$$

$$y_{0} + 0.1k_{3} = \begin{pmatrix} 1.8182 \\ -0.81798 \end{pmatrix}$$

$$k_{4} = \begin{pmatrix} -0.81798 \\ 1.2 \cdot (-0.81798) + 1.8182 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.81798 \\ 0.83662 \end{pmatrix}$$

$$y_{1} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{0.2}{6} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.9 \\ 0.91 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.909 \\ 0.9101 \end{pmatrix}$$

$$\cdot \begin{pmatrix} -0.909 \\ 0.9101 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.81798 \\ 0.83662 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.8188 \\ -0.81744 \end{pmatrix}$$

Шаг 2:

IIIar 2:

$$k_{1} = \begin{pmatrix} -0.81744 \\ 1.2 \cdot (-0.81744) + 1.8188 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.81744 \\ 0.83787 \end{pmatrix}$$

$$y_{1} + 0.1k_{1} = \begin{pmatrix} 1.7371 \\ -0.73365 \end{pmatrix}$$

$$k_{2} = \begin{pmatrix} -0.73365 \\ 1.3 \cdot (-0.73365) + 1.7371 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.73365 \\ 0.78336 \end{pmatrix}$$

$$y_{1} + 0.1k_{2} = \begin{pmatrix} 1.7454 \\ -0.7391 \end{pmatrix}$$

$$k_{3} = \begin{pmatrix} -0.7391 \\ 1.3 \cdot (-0.7391) + 1.7454 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.7391 \\ 0.75457 \end{pmatrix}$$

$$y_{1} + 0.1k_{3} = \begin{pmatrix} 1.671 \\ -0.66053 \end{pmatrix}$$

$$k_{4} = \begin{pmatrix} 1.8188 \\ 1.4 \cdot (-0.66053) + 1.671 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.66053 \\ 0.74626 \end{pmatrix}$$

$$y_{2} = \begin{pmatrix} 1.8188 \\ -0.81744 \end{pmatrix} + \frac{0.2}{6} \begin{pmatrix} -0.81744 \\ 0.83787 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.73365 \\ 0.78336 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.7391 \\ 0.78457 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.66053 \\ 0.74626 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.6714 \\ -0.66011 \end{pmatrix}$$

$$k_1 = \begin{pmatrix} -0,66011 \\ 1,4 \cdot (-0,66011) + 1,6714 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,66011 \\ 0,74725 \end{pmatrix}$$

$$y_{2} + 0.1k_{1} = \begin{pmatrix} 1.6054 \\ -0.58538 \end{pmatrix}$$

$$k_{2} = \begin{pmatrix} -0.58538 \\ 1.5 \cdot (-0.58538) + 1.6054 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.58538 \\ 0.72733 \end{pmatrix}$$

$$y_{2} + 0.1k_{2} = \begin{pmatrix} 1.6129 \\ -0.58738 \end{pmatrix}$$

$$k_{3} = \begin{pmatrix} -0.58738 \\ 1.5 \cdot (-0.58738) + 1.6129 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.58738 \\ 0.73183 \end{pmatrix}$$

$$y_{2} + 0.1k_{3} = \begin{pmatrix} 1.5539 \\ -0.51374 \end{pmatrix}$$

$$k_{4} = \begin{pmatrix} -0.51374 \\ 1.6 \cdot (-0.51374) + 1.5539 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.51374 \\ 0.73192 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} = \begin{pmatrix} 1.6714 \\ -0.66011 \end{pmatrix} + \frac{0.2}{6} \begin{pmatrix} -0.66011 \\ 0.74725 \end{pmatrix} + 2 \cdot$$

$$\cdot \begin{pmatrix} -0.58538 \\ 0.72733 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.58738 \\ 0.73183 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.51374 \\ 0.73192 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5541 \\ -0.51352 \end{pmatrix}$$

Шаг 4:

IIIar 4:

$$k_{1} = \begin{pmatrix} -0.51352 \\ 1.6 \cdot (-0.51352) + 1.5541 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.51352 \\ 0.73247 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} + 0.1k_{1} = \begin{pmatrix} 1.5027 \\ -0.44027 \end{pmatrix}$$

$$k_{2} = \begin{pmatrix} -0.44027 \\ 1.7 \cdot (-0.44027) + 1.5027 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.44027 \\ 0.75424 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} + 0.1k_{2} = \begin{pmatrix} 1.5101 \\ -0.4381 \end{pmatrix}$$

$$k_{3} = \begin{pmatrix} -0.4381 \\ 1.7 \cdot (-0.4381) + 1.5101 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.4381 \\ 0.76533 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} + 0.1k_{3} = \begin{pmatrix} 1.4665 \\ -0.36045 \end{pmatrix}$$

$$k_{4} = \begin{pmatrix} 1.5541 \\ -0.51352 \end{pmatrix} + \frac{0.2}{6} \begin{pmatrix} -0.51352 \\ 0.73247 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.44027 \\ 0.75424 \end{pmatrix}$$

$$\cdot \begin{pmatrix} -0.44027 \\ 0.75424 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0.4381 \\ 0.76533 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.36045 \\ 0.81769 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.4664 \\ -0.36054 \end{pmatrix}$$

Шаг 5:

$$k_1 = \begin{pmatrix} -0.36054 \\ 1.8 \cdot (-0.36054) + 1.4664 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.36054 \\ 0.81743 \end{pmatrix}$$
$$y_4 + 0.1k_1 = \begin{pmatrix} 1.4303 \\ -0.2788 \end{pmatrix}$$

$$k_{2} = \begin{pmatrix} -0,2788 \\ 1,9 \cdot (-0,44027) + 1,4303 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,2788 \\ 0,90058 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} + 0,1k_{2} = \begin{pmatrix} 1,4385 \\ -0,27048 \end{pmatrix}$$

$$k_{3} = \begin{pmatrix} -0,27048 \\ 1,9 \cdot (-0,27048) + 1,4385 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,27048 \\ 0,92459 \end{pmatrix}$$

$$y_{3} + 0,1k_{3} = \begin{pmatrix} 1,4123 \\ -0,17562 \end{pmatrix}$$

$$k_{4} = \begin{pmatrix} -0,17562 \\ 2 \cdot (-0,17562) + 1,4123 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,17562 \\ 0,0611 \end{pmatrix}$$

$$y_{4} = \begin{pmatrix} 1,4664 \\ -0,36054 \end{pmatrix} + \frac{0,2}{6} \begin{pmatrix} (-0,36054) \\ 0,81743 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0,27048 \\ 0,90058 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} -0,27048 \\ 0,92459 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,17562 \\ 0,0611 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,4119 \\ -0,17625 \end{pmatrix}$$

Метод Милна. 2 шага (4 и 5 шаги метода Рунге-Кутта 4 порядка)

$$\overline{y_{i+1}} = y_{i+3} + \frac{4h}{3} (2f(x_{i-2}, y_{i-2}) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 2f(x_i, y_i))$$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} (f(x_{i-1}, y_{i-1}) - 4f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \overline{y_{i+1}}))$$

Шаг 4:

$$\overline{y_4} = {2 \choose -1} + \frac{4 \cdot 0.2}{3} \left(2 {0 \choose 1.2 \cdot (-0.81744) + 1.8188} \right) - \frac{-0.66011}{1.4 \cdot (-0.66011) + 1.6714} + 2 {0 \choose 1.6 \cdot (-0.51352) + 1.5541} \right) = \frac{1.4662}{-0.36175}$$

$$y_4 = {0 \choose -0.66011} + \frac{0.2}{3} \left({0 \choose 1.4 \cdot (-0.66011) + 1.6714} + \frac{0.2}{3} \left({0 \choose 1.4 \cdot (-0.66011) + 1.6714} + \frac{0.36175}{1.6 \cdot (-0.51352) + 1.5541} \right) + {0 \choose 1.6 \cdot (-0.51352) + 1.5541} + {0 \choose 1.6 \cdot (-0.51352) + 1.5541} + {0 \choose 1.8 \cdot (-0.36175) + 1.4662} = {0 \choose -0.36064}$$

Шаг 5:

$$\overline{y_5} = \binom{1,8188}{-0.81744} + \frac{4 \cdot 0.2}{3} \left(2 \binom{-0,66011}{1.2 \cdot (-0.66011) + 1.6714} \right) - \frac{1}{3} \left(-\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3}$$

$$-\binom{-0,51352}{1,5\cdot(-0,51352)+1,5541} + 2\binom{-0,36064}{1,8\cdot(-0,36064)+1,4664}) =$$

$$=\binom{1,4114}{-0,17826}$$

$$y_5 = \binom{1,5541}{0,51352} + \frac{0,2}{3} \binom{-0,51352}{1,6\cdot(-0,51352)+1,5541} +$$

$$+4\binom{-0,36064}{1,6\cdot(-0,36064)+1,4664} + \binom{-0,17826}{2\cdot(-0,17826)+1,4114}) =$$

$$=\binom{1,4118}{-0,17637}$$

10 Аппроксимация

10.1 Постановка задачи аппроксимации и общий подход к решению

Пусть некоторая функция f(x) задана в узлах x_i -ых, т.е. известны $y_i = f(x_i)$ в точках $(x_0, x_1, ..., x_n)$.

Задача аппроксимации состоит в том, чтобы найти такую функцию g(x), которая лучше всего приближает функцию f(x) в точках x_i . Мы не стремимся к тому, чтобы значения найденной функции были в точности равны y в узлах аппроксимации, как это было при интерполяции, нам надо, чтобы они были близки $-g(x_i) \approx f(x_i)$.

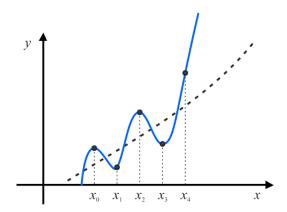


Рис. 10.1 – графическое представление аппроксимации функции

Конкретизация задачи аппроксимации. Для оценки близости функции g вводится вектор погрешностей аппроксимации или вектор невязок — векторная

разница: $(g(x_0) - f(x_0), g(x_1) - f(x_1), g(x_n) - f(x_n)) = R$. Очевидно, мы будем стремиться, чтобы норма вектора ||R|| была наименьшей. При этом можно работать, можно работать с разными нормами векторов, но в нашем случае легче всего будет работать со второй нормой. Функцию g ищем в виде линейных комбинация наперед заданных базисных $g_0(x)$ - $g_k(x)$.

$$g(x) = \sum_{j=0}^{k} g_j(x) \cdot a_i$$

Очень часто в качестве базисных функций берут $g_i(x) = x^i$, в таком случае мы получаем аппроксимацию многочленами степени не выше k.

10.2 Метод наименьших квадратов

Имеем фиксированный набор функций:

$$g_0(x), g_1(x), \dots, g_k(x)$$

$$y_i = f(x_i)$$
 $i = \overline{0,n}$ $g(x) = \sum_{j=0}^k g_j(x) \cdot a_j$

 $R = (y_0 - g(x_0), ..., y_n - g(x_n))$. Его вторую норму ($||R||_2 \to \min$) будем минимизировать за счет выбора коэффициентов a_i :

$$S_{min}(a_0, ..., a_k) = \sum_{i=0}^{n} (y_i - g(x_i))^2 = \sum_{i=0}^{n} (y_i - \sum_{j=0}^{k} a_j g_j(x_i))^2$$

Как известно из математического анализа, для нахождения минимума функции нам надо все ее частные производные приравнять к 0.

$$\frac{\delta S}{\delta a_{p}} = \sum_{i=0}^{n} 2 \cdot \left[y_{i} - \sum_{j=0}^{k} a_{j} g_{j}(x_{i}) \right] \cdot \left(0 + \dots + 0 + g_{p}(x_{i}) + \dots + 0 + 0 \right) = 0$$

$$\sum_{i=0}^{n} \cdot \sum_{j=0}^{k} a_{j} g_{j}(x_{i}) g_{p}(x_{i}) = \sum_{i=0}^{k} y_{i} g_{p}(x_{i})$$

$$\sum_{j=0}^{k} a_{j} \cdot \sum_{i=0}^{n} g_{j}(x_{i}) g_{p}(x_{i}) = \sum_{i=0}^{n} y_{i} g_{p}(x_{i}) \qquad p = \overline{0, k} \qquad (10.1)$$

Для нахождения минимума функции S мы должны решить систему из k+1 уравнений (10.1), причем все они линейные. Данную систему будет решать методом Гаусса. Для этого составляем матрицу C коэффициентами

$$C_{pj} = \sum_{i=0}^n g_i(x_i) g_p(x_i)$$

 ${\bf C}$ вектором ${\bf \it D}$ правой части

$$d_p = \sum_{i=0}^n y_i \cdot g_p(x_i)$$

Найденные неизвестные a_i и будут искомыми коэффициентами

Матрица данной СЛАУ квадратная и невырожденная (при условии линейной независимости функций g_i в точках x_j). Поэтому решение данной СЛАУ существует и единственно.

Рассмотрим аппроксимацию произвольной функции полиномами второй степени, т.е. функциями вида: $g(x) = a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$, следовательно базисными функциями будут $g_0(x) = 1$; $g_1(x) = x$; $g_2(x) = x^2$;

Для аппроксимации, согласно формулам (10.1) нам необходимо решить следующую СЛАУ 3 на 3.

$$\begin{cases} C_{00}a_0 + C_{01}a_1 + C_{02}a_2 = b_0 \\ C_{10}a_0 + C_{11}a_1 + C_{12}a_2 = b_1 \\ C_{20}a_0 + C_{20}a_1 + C_{21}a_2 = b_2 \end{cases}$$
 где
$$C_{00} = \sum_{i=0}^n g_0(x_i) \cdot g_0(x_i) = n+1$$

$$C_{01} = \sum_{i=0}^n g_0(x_i) \cdot g_1(x_i) = \sum_{i=0}^n x_i = C_{10}$$

$$C_{02} = \sum_{i=0}^n (x_i)^2 = C_{20} = C_{11} \text{ и т.д.}$$

$$b_0 = \sum_{i=0}^n y_i \cdot 1; \qquad b_1 = \sum_{i=0}^n y_i \cdot x_i; \qquad b_2 = \sum_{i=0}^n y_i \cdot (x_i)^2;$$

Пример.

Аппроксимация методом наименьших квадратов

Аппроксимировать функцию, заданную в точках функциями вида:

$$a + bx + c\sqrt{x}$$

X	y
0	0
1	1
2	4
3	9

Базисные функции:

$$g_0(x) = 1$$

$$g_1(x) = x$$

$$g_2(x) = \sqrt{x}$$

Составим систему линейных уравнений по формуле 10.2:

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^{n} 1 + b \sum_{i=1}^{n} x_i + c \sum_{i=1}^{n} \sqrt{x_i} = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a \sum_{i=1}^{n} x_i + b \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c \sum_{i=1}^{n} x_i \sqrt{x_i} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^{n} \sqrt{x_i} + b \sum_{i=1}^{n} x_i \sqrt{x_i} + c \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} \sqrt{x_i} y_i \end{cases}$$

В результате получим систему:

$$\begin{cases} 4a + 6b + 4,1462c = 14 \\ 6a + 14b + 9,0244c = 36 \\ 4,1462a + 9,0244b + 6c = 22,2448 \end{cases}$$

Решаем систему линейных уравнений методом Гаусса и получаем:

$$\begin{cases}
a = 0.037 \\
b = 5.980 \\
c = -5.32
\end{cases}$$

Подставляем коэффициенты в исходную функцию аппроксимации, получаем:

$$0.037 + 5.98x - 5.32\sqrt{x}$$

Теперь можно подставить любое допустимое значение $x \ (x \ge 0)$ и найти значение функции аппроксимации в точке

11 Нелинейная оптимизация. Метод градиента.

11.1 Сведение СНУ к задаче нелинейной оптимизации (ЗНО) и наоборот

Постановка задачи ЗНО: Найти минимальное или максимальное значение функции $f(X) = f(x_1, ..., x_n)$ (11.1) в некоторой области D.

Для сведения ЗНО к СНУ достаточно вспомнить, что в точке экстремума все производные функции обращаются в ноль. Таким образом мы получаем из задачи нелинейной оптимизации (11.1) систему нелинейных уравнений из n нелинейных уравнений (11.2).

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0, \quad i = \overline{1, n} \tag{11.2}$$

Обратная процедура (из СНУ в ЗНО). Рассмотрим СНУ:

$$\begin{cases} g_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ g_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

и функцию

 $S(x_1,x_2,...,x_n)=\sum_{i=0}^n g_i^2\left(x_1,x_2,...,x_n\right) \to min$ S достигает минимума в точке, где все і-ые зануляются).

11.2 Метод градиента (метод наискорейшего спуска)

Имеем $g(x_1, x_2, ..., x_n) \rightarrow min$

Общая идея метода:

Выбрать точку $x^{(0)}$ достаточно близко к точке min.

Пусть $g(x_1, x_2, ..., x_n)$ — гладкая функция, тогда вектор градиента $gradf(x^{(0)}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)\Big|_{x^{(0)}}$ показывает направление наискорейший рост функции в точке $x^{(0)}$.

Находим вектор градиента и движемся в противоположную сторону, т.к. нам необходимо двигаться вниз.

$$g_0(t) = f(x^{(0)} - t \cdot grad f(x^{(0)}))$$
, $t \ge 0$

Мы двигаемся в этом направлении до тех пор, пока $g_0(t)$ не начнем возрастать — в этот момент мы остановимся, точкой остановки будет точка $x^{(1)}$. Теперь повторим ту же процедуру, но для точки $x^{(1)}$. $g_1(t) = f\left(x^{(1)} - t \cdot grad\ f(x^{(1)})\right)$. Мы будем повторять эту операцию до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность используем, как и ранее универсальный критерий убывания:

$$\left\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\right\| < \varepsilon$$

Итак, с помощью метода градиента нам удалось многомерную задачу оптимизации свести к одномерной, то есть нам нужно найти минимум функции одной переменной (на каждом шаге минимум $g_i(t)$).

Пример.

Нелинейная одномерная ЗНО

Нам необходимо найти минимум некоторой функции на интервале [a,b]. Будем считать, что эта функция имеет одну точку min (унимодулярная). Простейший способ нахождения точки min — метод сечений.

Идея метода:

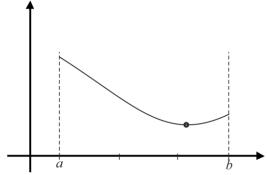


Рис. 11.2 – Точка экстремума функции

Разобьем участок [a, b] на п интервалов и рассмотрим $f(x_i)$, $i=\overline{0,n}$. Предположим минимум достигается при $i=i_0$, тогда новый участок поиска будет $[x_{i_0-1},\ x_{i_0+1}]$, продолжаем до тех пор, пока $\frac{b-a}{2} \le \varepsilon$.

Делить отрезок нужно на 3 или более интервала. Но встает вопрос, как разделить отрезок наиболее оптимально?

Мы можем брать ε , как можно меньше (см. рис. 11.3), тогда длина поиска уменьшается примерно вдвое.



Рис. 11.3 – Сечение отрезка

На самом деле выгоднее делить отрезок по методу золотого сечения:

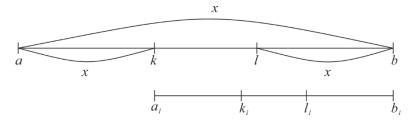


Рис. 11.4 – Сечение отрезка по золотому сечению

Считаем, что длина [a, b] = 1, и от этого интервала были отсечены два одинаковых отрезка длиной x. Тогда |k, l| = 1 - 2x. k и l подобраны так, что при переходе к новому интервалу, нам необходимо произвести вычисления не в двух точках а в одной.

$$\frac{b-l}{b-k} = \frac{b-k}{b-a}$$

$$\frac{x}{1-x} = \frac{1-x}{1}$$

$$x^2 - 2x + 1 = 0$$

$$x = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}; \quad x = 0,382$$

Итак, в алгоритме метода золотого сечения заложены соотношения (0,382:0,236:0,382).

Пример.

Нахождение min функции методом золотого сечения

$$f(x) = x^2 - 6x$$
 интервал [0,5] сделать 4 шага.

$$\lambda_1 = a + 0.382(b - a)$$

$$\lambda_2 = a + 0.618(b - a)$$

Если
$$f(\lambda_1) > f(\lambda_2)$$
, то $a = \lambda_1$, иначе, $b = \lambda_1$

Шаг 1:

$$\lambda_1 = 0 + 0.382(5 - 0) = 1.91$$

$$\lambda_2 = 0 + 0.618(5 - 0) = 3.09$$

$$f(\lambda_1) = -7.8119$$

$$f(\lambda_2) = -8,9919$$

$$f(\lambda_1) > f(\lambda_2)$$
, значит $a = \lambda_1$

Шаг 2:

$$\lambda_1 = 1.91 + 0.382(5 - 1.91) = 3.09038$$

$$\lambda_2 = 1.91 + 0.618(5 - 1.91) = 3.81962$$

$$f(\lambda_1) = -8.991831$$

$$f(\lambda_2) = -8.328223$$

$$f(\lambda_1) < f(\lambda_2)$$
, значит $b = \lambda_2$

Шаг 3:

$$\lambda_1 = 1.91 + 0.382(3.81962 - 1.91) = 2.639475$$

$$\lambda_2 = 1.91 + 0.618(3.81962 - 1.91) = 3.090145$$

$$f(\lambda_1) = -8,870022$$

$$f(\lambda_2) = -8,991874$$

$$f(\lambda_1) > f(\lambda_2)$$
, значит $a = \lambda_1$

Шаг 4:

$$\lambda_1 = 2,639475 + 0,382(3,81962 - 2,639475) = 3,090290$$

$$\lambda_2 = 2,639475 + 0,618(3,81962 - 2,639475) = 3,368805$$

$$f(\lambda_1) = -8,991848$$

$$f(\lambda_2) = -8,863983$$

$$f(\lambda_1) < f(\lambda_2)$$
, значит $b = \lambda_2$

Результаты вычислений:

$$x = \frac{a+b}{2} = \frac{2,639475+3,368805}{2} = 3,00414$$

$$f(x) = x^2 - 6x = 9,024857 - 18,02484 = -8,999983$$

$$f(x) = x^2 - 6x$$

интервал [0,5]
сделать 4шага

 λ_1 =a+0.382 (b-a) λ_2 =a+0.618 (b-a) Если f (λ_1) > f (λ_2), то a= λ_1 Иначе, b= λ_2

Итерация 1
$$\lambda_1 = 0 + 0.382 \cdot (5 - 0) = 1.91$$

$$\lambda_2 = 0 + 0.618 \cdot (5 - 0) = 3.09$$

$$f(\lambda_1) = -7.8119$$

$$f(\lambda_2) = -8.9919$$

$$f(\lambda_1) > f(\lambda_2), \textit{значит } a = \lambda_1$$

Итерация 2
$$\lambda_1 = 1.91 + 0.382 \cdot (5 - 1.91) = 3.09038$$

$$\lambda_2 = 1.91 + 0.618 \cdot (5 - 1.91) = 3.81962$$

$$f(\lambda_1) = -8.991831$$

$$f(\lambda_2) = -8.328223$$

$$f(\lambda_1) < f(\lambda_2),$$
 значит $b = \lambda_2$

Итерация 3 $\lambda_1 = 1.91 + 0.382 \cdot (3.81962 - 1.91) = 2.639475$ $\lambda_2 = 1.91 + 0.618 \cdot (3.81962 - 1.91) = 3.090145$ $f(\lambda_1) = -8.870022$ $f(\lambda_2) = -8.991874$ $f(\lambda_1) > f(\lambda_2), значит <math>a = \lambda_1$

Итерация 4
$$\lambda_1 = 2.639475 + 0.382 \cdot (3.81962 - 2.639475) = 3.090290$$

$$\lambda_2 = 2.639475 + 0.618 \cdot (3.81962 - 2.639475) = 3.368805$$

$$f(\lambda_1) = -8.991848$$

$$f(\lambda_2) = -8.863983$$

$$f(\lambda_1) < f(\lambda_2), \textit{значит } b = \lambda_2$$

Результаты вычислений
$$x = \frac{(a+b)}{2} = \frac{(2.639475 + 3.368805)}{2} = 3.00414$$

$$f(x) = x^2 - 6x = 9.024857 - 18.02484 = -8.999983$$