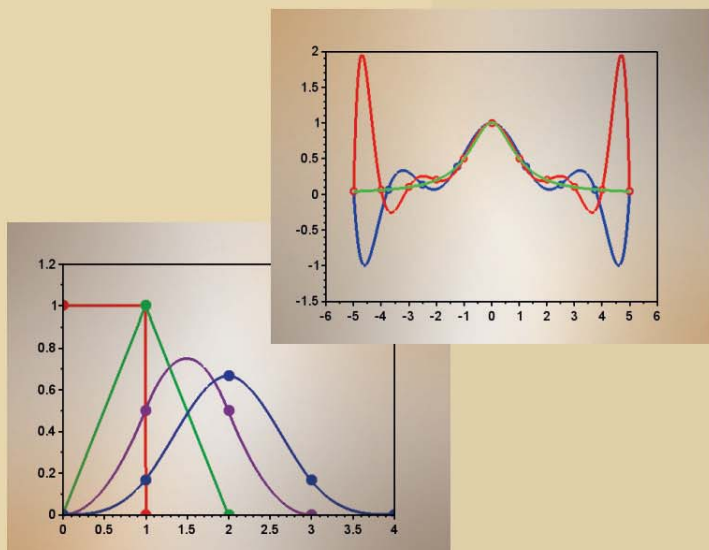




С. М. Пригарин

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ
интерполяция,
численное дифференцирование
и интегрирование



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Механико-математический факультет
Кафедра вычислительной математики

С. М. Пригарин

Численный анализ
(интерполяция, численное дифференцирование и
интегрирование)

Учебное пособие
(эл. версия с исправлениями от 2018.10.17)

НОВОСИБИРСК
2018

УДК 519.6
ББК 22.19
П 754

Рецензент:

д-р физ.-мат. наук *В. А. Огородников*

Пригарин, С. М.

П 754 Численный анализ (интерполяция, численное дифференцирование и интегрирование) : учеб. пособие / С. М. Пригарин ; Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2018. — 90 с.

ISBN 978-5-4437-0797-6

Учебное пособие посвящено разделам численного анализа, которые излагаются в курсе «Методы вычислений» для студентов Китайско-российского института Хэйлунцзянского университета. В пособии кратко изложены сведения по соответствующим разделам вычислительной математики, приведены упражнения и задания для работы на семинарах и в компьютерном классе.

Пособие в первую очередь предназначено для студентов математического отделения Китайско-российского института Хэйлунцзянского университета. Оно может быть полезным также студентам высших учебных заведений, изучающим вычислительную математику.

УДК 519.6
ББК 22.19

© Новосибирский государственный университет, 2018

© Пригарин С. М., 2018

ISBN 978-5-4437-0797-6

Оглавление

Предисловие	5
Глава 1. Представление чисел и вычислительная погрешность	6
1.1. Источники погрешности	6
1.2. Абсолютная и относительная погрешность	6
1.3. Системы счисления, представление чисел в ЭВМ	10
1.4. Корректность и обусловленность математических задач, устойчивость численных алгоритмов	13
1.5. О вычислительной технике	15
Глава 2. Полиномиальная интерполяция	19
2.1. Постановка задачи	19
2.2. Интерполяционный полином Лагранжа	21
2.3. Интерполяционный полином Ньютона	23
2.4. Оценка погрешности полиномиальной интерполяции	25
2.5. Интерполяционные полиномы Эрмита	27
2.6. Дополнительные сведения. Примеры Рунге и Бернштейна	28
2.7. О других способах интерполяции	32
Глава 3. Сплайны	35
3.1. Определение сплайна	37
3.2. Параболические интерполяционные сплайны	38
3.3. Кубические сплайны	40
3.4. В-сплайны	43
Глава 4. Численное дифференцирование	48
4.1. Формулы численного дифференцирования	48
4.2. Погрешность численного дифференцирования	54
4.3. О выборе шага численного дифференцирования	55

Глава 5. Численное интегрирование	57
5.1. Основные определения	57
5.2. Квадратурные формулы Ньютона — Котеса	60
5.3. Квадратурные формулы Чебышёва	61
5.4. Квадратурные формулы Гаусса	62
5.5. Поправка Ричардсона и правило Рунге. Процесс Эйт- кена	63
5.6. Дополнительные сведения	65
Приложение А. Векторные и матричные нормы	67
Приложение Б. Сведения из математического анализа	73
Б.1. Формула Тейлора	73
Б.2. Теорема Рóлля	73
Б.3. Теорема Больцано — Коши. Теоремы о среднем значении	74
Б.4. Сравнение функций в окрестности точки	74
Приложение В. Ответы и указания к упражнениям и заданиям	76
Литература	83
Предметный указатель	88

Предисловие

Курс «Методы вычислений» для студентов Китайско-российского института Хэйлунцзянского университета содержит разделы, включающие материал по интерполяции функций, численному дифференцированию и интегрированию, решению нелинейных уравнений, разностным и проекционным методам решения дифференциальных уравнений. Данное пособие содержит вводную часть, посвящённую вычислительной технике, алгоритмам и погрешности вычислений, а также главы по интерполяции функций (главы 2, 3), численному дифференцированию и интегрированию (главы 4, 5). В приложениях представлены используемые в основном тексте сведения из теории матриц и математического анализа.

Пособие может быть полезным тем, кто решил познакомиться с соответствующими разделами вычислительной математики, но, в первую очередь, оно предназначено студентам математического отделения Китайско-российского института Хэйлунцзянского университета, изучающим дисциплину «Методы вычислений» на русском языке. В пособии изложены материалы курса по соответствующим темам, даны примеры упражнений для семинаров, а также представлены дополнительные сведения и ссылки на литературу для дальнейшего изучения. Так как в рамках курса «Методы вычислений» предусмотрен вычислительный практикум в компьютерном классе, то в пособии представлены примеры заданий для программной реализации вычислительных алгоритмов и проведения расчётов на персональных ЭВМ.

Глава 1

Представление чисел и вычислительная погрешность

1.1. Источники погрешности

При построении математической модели и проведении вычислений выделяют следующие источники погрешности (ошибок).

1а. *Погрешность модели*: математическая модель приближённо описывает реальное явление.

1б. *Погрешность входных данных*: числовые данные, входящие в математическое описание задачи известны с некоторой точностью.

2. *Погрешность численного метода*: численный метод решения задачи может быть неточным (пример — итерационные методы решения системы линейных уравнений).

3. *Погрешность вычислений*: ошибки, связанные с представлением чисел в ЭВМ, выполнением арифметических операций, а также с вводом и выводом числовых данных.

Погрешности 1а и 1б называют *неустранимыми*, имея в виду то обстоятельство, что математик-вычислитель практически не имеет возможность влиять на них. О целесообразности предварительного анализа неустранимых погрешностей см., например, [7]. Заметим, что в учебном пособии [16] неустранимой называют погрешность вычислений.

1.2. Абсолютная и относительная погрешность

Предположим, что в процессе вычисления некоторой величины A получено приближённое значение a . Величина $\Delta a = |A - a|$ называется *абсолютной погрешностью* приближённого значения a . Величину $\delta a = \frac{\Delta a}{|a|}$ называют *относительной*

погрешностью значения a и часто выражают в процентах. Так как точное значение A обычно неизвестно, то неизвестно и точное значение погрешностей. Поэтому рассматривают оценки погрешностей сверху:

$$\Delta a \geq |A - a|, \quad (1.2.1)$$

$$\delta a \geq \frac{\Delta a}{|a|}, \quad (1.2.2)$$

которые также называют, соответственно, абсолютной и относительной погрешностью (иногда для (1.2.1), (1.2.2) используют термин «*предельные погрешности*», см., например, [16]).

Приведем свойства погрешностей (см., например, [7, 12, 14]):

$$\Delta(a \pm b) = \Delta(a) + \Delta(b), \quad (1.2.3)$$

$$\Delta(ab) = |b|\Delta a + |a|\Delta b + \Delta a\Delta b, \quad (1.2.4)$$

$$\Delta(a/b) = \frac{|b|\Delta a + |a|\Delta b}{(1 - \delta b)b^2}, \quad (1.2.5)$$

$$\delta(ab) = \delta a + \delta b + \delta a\delta b, \quad (1.2.6)$$

$$\delta(a/b) = \frac{\delta a + \delta b}{(1 - \delta b)}. \quad (1.2.7)$$

В формулах (1.2.5), (1.2.7) предполагается, что $\delta b < 1$. Если δa и δb значительно меньше единицы, то используют приближённые формулы

$$\Delta(ab) \approx |b|\Delta a + |a|\Delta b, \quad (1.2.8)$$

$$\Delta(a/b) \approx \frac{|b|\Delta a + |a|\Delta b}{b^2}, \quad (1.2.9)$$

$$\delta(ab) \approx \delta a + \delta b, \quad (1.2.10)$$

$$\delta(a/b) \approx \delta a + \delta b. \quad (1.2.11)$$

Для относительной погрешности суммы и разности выполнено

$$\delta(a + b) = \max(\delta a, \delta b), \quad (1.2.12)$$

$$\delta(a - b) = \frac{\Delta a + \Delta b}{|a - b|}. \quad (1.2.13)$$

Для погрешности дифференцируемой функции $f(a_1, \dots, a_n)$ от n аргументов используют приближённые формулы

$$\Delta f \approx \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial f}{\partial a_i} \right| \Delta a_i, \quad (1.2.14)$$

$$\delta f \approx \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \ln f}{\partial a_i} \right| \Delta a_i. \quad (1.2.15)$$

Упражнения 1.2.1. а) Докажите соотношения (1.2.3) – (1.2.15).

б) Найдите выражение для относительной погрешности величины

$$y = \sqrt{\frac{a+b}{x^3(1-x)}}$$

через значения a, b, x и их абсолютные погрешности.

Обратная задача теории погрешности. Для того чтобы выяснить, какая точность входных данных a_1, \dots, a_n обеспечит необходимую точность вычисления функции $f(a_1, \dots, a_n)$, используют различные подходы. *Принцип равных влияний* состоит в предположении, что значения $\left| \frac{\partial f}{\partial a_i} \right| \Delta a_i$ равны. Это даёт

$$\Delta a_i = \frac{\Delta f}{n \left| \frac{\partial f}{\partial a_i} \right|}. \quad (1.2.16)$$

Если предположить равенство относительных погрешностей δa_i , то получим формулу

$$\Delta a_i = \frac{|a_i| \Delta f}{\sum_{i=1}^n |a_i \frac{\partial f}{\partial a_i}|}. \quad (1.2.17)$$

О других подходах к решению обратной задачи теории погрешностей см., например, [7].

Существуют различные способы учёта вычислительных погрешностей. Подход, основанный на точном оценивании погрешностей, на приведённых выше правилах подсчёта погрешностей арифметических операций, на вычислении точных нижних и верхних границ для приближённых значений, часто называют *аналитическим* или *классическим* [12]. Классический подход является громоздким. Кроме того, он описывает наилучшие варианты погрешностей, которые могут быть маловероятными. *Статистический* подход основан на применении вероятностных оценок погрешности. Продемонстрируем этот подход на примере вычисления среднего арифметического последовательности чисел

$$b = (a_1 + \dots + a_n)/n \quad (1.2.18)$$

с одинаковым уровнем абсолютных погрешностей $\Delta a_i \approx \Delta a$. Классическая оценка погрешностей даёт $\Delta b \approx \Delta a$. Однако известно, что при естественных предположениях (о распределении и независимости погрешности каждого слагаемого) согласно вероятностным законам погрешность Δb среднего арифметического стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$ со скоростью $1/\sqrt{n}$.

Правило Чеботарёва [12, 56] (Александр Степанович Чеботарёв, 1881–1969) основано на статистическом подходе оценки погрешностей и используется при суммировании $n > 10$ чисел с одинаковой абсолютной погрешностью $\Delta a_i \approx \Delta a$. Согласно этому правилу, абсолютная погрешность суммы $s = a_1 + \dots + a_n$ равна

$$\Delta s \approx \sqrt{3n} \Delta a. \quad (1.2.19)$$

Для среднего арифметического (1.2.18) правило Чеботарёва даёт

$$\Delta b \approx \Delta a \sqrt{3/n}.$$

Упражнение 1.2.2. Предположим, что $\Delta a = 0.5 \cdot 10^{-6}$ и $n = 12$. Оцените абсолютные погрешности Δs и Δb по правилу Чеботарёва и с использованием классического подхода.

Кроме того, на практике при «ручном» счёте для оценки погрешностей часто применяют так называемый *технический подход* (см., например, [12, 31]), который связывают с именем русского ученого Алексея Николаевича Крылова (1863–1945).

1.3. Системы счисления, представление чисел в ЭВМ

Система счисления — это способ представления числовых значений с помощью символов. В различные времена разными народами использовались весьма разнообразные системы счисления. Сейчас в повседневной жизни мы пользуемся *позиционной* системой счисления по основанию $b = 10$:

$$\begin{aligned} & a_n \dots a_1 a_0 . a_{-1} \dots a_{-m} = \\ & = a_n b^n + \dots + a_1 b^1 + a_0 b^0 + a_{-1} b^{-1} + \dots + a_{-m} b^{-m}. \end{aligned}$$

Здесь a_i — цифры от 0 до $b - 1$.

Представление чисел в ЭВМ и на многих современных носителях информации основано на двоичной системе счисления, $b = 2$. Так как запись в двоичной системе получается сравнительно длинной, то для более краткой записи часто используют системы счисления по основанию 8 и 16. Преобразовать запись числа в двоичной системе в системы счисления по основаниям 8 или 16 можно, группируя, соответственно, по 3 и 4 двоичных цифры в одну цифру восьмеричной или шестнадцатеричной системы.

Упражнение 1.3.1. Запишите число 2017 в системах счисления по основанию 2, 4, 8 и 16.

Для представления чисел и выполнения арифметических операций в современных ЭВМ разработан *стандарт IEEE 754*. Стандарт используется в современных аппаратных средствах и компиляторах с разных языков программирования. Погрешность вычислений может быть обусловлена, в том числе и особенностями этого стандарта.

Значащими цифрами в позиционной записи числа называют все его цифры, начиная с первой ненулевой цифры слева. Например, значащими цифрами числа 0.0024700 являются его последние пять цифр. Значащую цифру называют *верной*, если абсолютная погрешность числа меньше, чем половина единицы разряда, соответствующего этой цифре. Согласно стандарту IEEE 754, вещественное число с плавающей точкой одинарной точности имеет 6–7 верных значащих цифр в десятичном представлении. Это, в частности, означает, что если переменная одинарной точности x имеет значение 100000000, то операция $x = x + 1$ не изменит её значения. Ошибки, которые могут возникать из-за подобных эффектов, нужно учитывать при программной реализации вычислительных алгоритмов.

Задание 1.3.1. а) Проведите на персональном компьютере вычисление скалярного произведения векторов a и b для следующих значений: (1) $a = (10^{11}, 2, -10^{10})$, $b = (10^9, 3, 10^{10})$, (2) $a = (10^5, 2, -10^5)$, $b = (10^5, 3, 10^5)$. Используйте вещественные переменные одинарной и двойной точности. Объясните полученные результаты. Как результаты зависят от порядка выполняемых операций?

б) Найдите наименьшее целое положительное значение переменной x вещественного типа (одинарной и двойной точности), для которого операция $x = x + 1$ даёт неверный результат.

Погрешность вычислений может существенно зависеть от порядка выполняемых арифметических операций. При суммировании последовательности величин одного знака рекомендуется складывать числа в порядке возрастания абсолютных значений. Кроме того, для уменьшения вычислительной погрешности суммы могут быть использованы специальные алгоритмы, такие как, например, компенсационный алгоритм Уильяма Кэхэна (William Morton Kahan, род. в 1933 г.), опубликованный в 1965 г. [62]:

```
// Алгоритм Кэхэна вычисления суммы Sum=a[1]+...+a[N]
Sum := 0.0 // сумма
C := 0.0 // компенсация погрешности
for i := 1 to N do
begin
  Y := a[i] - C //вначале C=0
  T := Sum + Y //здесь младшие разряды Y могут
                //быть потеряны
  C := (T - Sum) - Y //C "восстанавливает"
//потерянные разряды Y; "компенсация" потерянных
//разрядов произойдет в первом операторе цикла
  Sum := T
end;
writeln(Sum); //окончательный результат
//PS. Избегайте компиляции с оптимизацией
```

Усовершенствованный алгоритм компенсации погрешности при суммировании был предложен в 1974 г. [65]. Этот алгоритм учитывает ситуации, когда последующее слагаемое больше по модулю значения суммы предыдущих слагаемых.

Задание 1.3.2. Вычислите сумму $\sum_{i=1}^N i^{-2}$ для $N = 10^6, 10^7$ с двойной и одинарной точностью, используя прямой и обратный порядок суммирования. Проанализируйте точность результатов. Используйте компенсационное суммирование Кэхэна для более точного расчёта с одинарной точностью.

Ошибки вычислений могут возникать и по причинам, которые сложно предусмотреть заранее. Это могут быть ошибки вычислительной техники или программного обеспечения. В качестве примера можно привести известную ошибку «Pentium FDIV». Эта ошибка была допущена в модуле математического сопроцессора процессоров Pentium, выпускавшихся фирмой Intel в 1994 г. (варианты процессоров с частотами 60–100 МГц). Ошибка, в частности, приводила к неожиданному результату 4195579 после вычислений $4195835 * 3145727 / 3145727$.

В настоящее время от работы вычислительной техники и программного обеспечения зависят многие аспекты современной жизни. В некоторых ситуациях ошибки вычислений приводят к серьёзным последствиям. На своей веб-странице [59] американский математик Д. Арнольд приводит следующие примеры техногенных катастроф, вызванных ошибками компьютерных вычислений:

- Взрыв ракеты «Пэтриот» в Саудовской Аравии 25 февраля 1991, который привёл к гибели 28 человек, связан с ошибками округления.
- Взрыв ракеты Ариан-5 сразу после старта при её первом испытании во Французской Гвиане 4 июня 1996 был следствием переполнения чисел.
- Нефтяная платформа затонула около Норвегии 23 августа 1991, что привело к убытку почти в один миллиард долларов. Это было следствием ошибок, допущенных при вычислениях методом конечных элементов.

Другой широко известный пример: в 1999 г. при полёте на Марс потерпел аварию космический аппарат Mars Climate Orbiter. Причиной аварии была следующая ошибка: команды по тяге двигателя в программном обеспечении космического аппарата использовали единицу измерения силы «ньютон», в то время как программное обеспечение на Земле, которое создавало эти команды, использовало единицу измерения «фунт-сила» (лишь в 2007 г. в NASA полностью перешли на метрическую систему).

1.4. Корректность и обусловленность математических задач, устойчивость численных алгоритмов

Характер зависимости решения вычислительной задачи от входных данных может быть различным. В частности, выделяют *корректные* и *некорректные* задачи. Для того чтобы предельно познакомиться с понятием корректности, приведем

(нестрогие) определения (более подробно см. [3, 12] и другие учебники). Вычислительная задача называется корректной, если для любых входных данных существует единственное решение и это решение непрерывно зависит от входных данных (последнее свойство называют устойчивостью решения задачи по входным данным). В противном случае задача называется некорректной. Заметим, что корректность зависит от выбора множества допустимых входных данных и множества, где ищется решение. Наряду с корректными, некорректные задачи часто возникают в различных приложениях. В качестве примеров некорректных задач можно привести задачу численного дифференцирования, вычисления ранга матрицы, решение уравнения Фредгольма первого рода и другие. Для решения некорректных задач разрабатывают специальные методы регуляризации, см., например [24, 50].

Под *обусловленностью* понимают чувствительность решения задачи к малым возмущениям входных данных. Задачу называют хорошо обусловленной, если малые возмущения входных данных приводят к малым изменениям решения, и плохо обусловленной — в противном случае. Задача может быть корректной, но плохо обусловленной. В некоторых случаях удаётся ввести число, характеризующее обусловленность задачи, как, например, для систем линейных алгебраических уравнений.

Вычислительный алгоритм представляет собой последовательность операций, в ходе которой погрешность может существенно меняться. Если в ходе выполнения алгоритма погрешность возрастает и делает результат неприемлемым, то такой алгоритм называют вычислительно *неустойчивым*. Например, требуется вычислить интеграл $I_N = e^{-1} \int_0^1 x^N e^x dx$ при достаточно большом N . Вычисления можно проводить по рекуррентным формулам

$$I_0 = 1 - e^{-1}, \quad I_n = 1 - nI_{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (1.4.1)$$

Однако такой метод оказывается неустойчивым [6, 12].

Упражнение 1.4.1. Покажите, что начальная погрешность, допущенная при вычислении I_0 увеличивается в $n!$ раз при подсчёте I_n по формуле $I_n = 1 - nI_{n-1}$.

Задание 1.4.1. Запрограммируйте алгоритм (1.4.1) и убедитесь в его неустойчивости.

1.5. О вычислительной технике

Истории и современному развитию вычислительной техники посвящена обширная литература и множество источников в сети Интернет. С этими вопросами студентам предлагается ознакомиться самостоятельно. При этом полезно иметь в виду следующее (см., например, [25] и другие источники).

В литературе выделяют четыре периода развития вычислительных средств: домеханический, механический, электромеханический, электронный.

В прошлом для численных расчётов создавались различные средства, такие как абак (счётная доска, счёты, суньпан и т.п.), палочки Джона Непера (1617 г.), логарифмические таблицы и линейки (с начала XVII века), арифмометры Вильгельма Шиккарда (1623 г.), Блеза Паскаля (1642 г.), Готфрида Вильгельма Лейбница (1673 г.) и др.

Первые электронно-вычислительные машины (ЭВМ) были созданы в середине прошлого века.

- В Германии Конрад Цузе (Konrad Zuse, 1910–1995) создаёт ЭВМ Z1, Z2, Z3 (1941 г.), Z4 (1944 г.).
- Американский программируемый компьютер «Марк I» создан в 1943 г. для выполнения баллистических расчётов.
- Английская вычислительная машина «Colossus» создана в 1943 г. для расшифровки секретных кодов.
- В 1946 г. создана первая американская гражданская ЭВМ ENIAC.

- В 1950 г. в Киеве под руководством академика Сергея Алексеевича Лебедева создана первая в СССР и континентальной Европе ЭВМ «МЭСМ».
- В 1959 г. в Китае принята в эксплуатацию первая китайская ЭВМ БЭСМ-К.

В истории создания ЭВМ условно выделяют несколько поколений: первое поколение (на электронных лампах; 1945–1955 гг.), второе поколение (с использованием полупроводниковых технологий, магнитных сердечников, барабанов и лент; 1955–1965 гг.), третье поколение (интегральные микросхемы, магнитные диски; 1965–1975 гг.), четвёртое поколение (большие интегральные схемы, микрокомпьютеры).

Упражнение 1.5.1. Какой объём информации можно записать на перфокарту, изображённую на рис. 1.1? Во сколько раз больше плотность записи информации на единицу площади для microSD объемом 32ГБ? (Размеры microSD — 11×15 мм, а размеры перфокарты — 183×83 мм.)

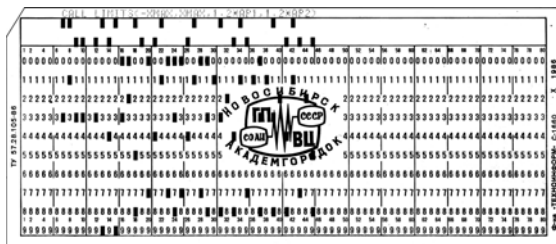


Рис. 1.1. Такие перфокарты широко использовались в качестве носителей информации при работе с ЭВМ первого поколения и в более позднее время

В 1959 г. в Московском университете разработана ЭВМ «Сетунь» (руководитель проекта Николай Петрович Брусенцов, 1925–2014), которая являлась единственной серийно выпускавшейся ЭВМ на троичной логике.

По типу ЭВМ делятся на персональные (в 1976 г. выпущен первый персональный компьютер Apple, а в 1981 г. — персональный компьютер фирмы IBM), вычислительные серверы, мэйнфреймы, суперкомпьютеры (Cray-1, созданный в 1976 г., считается одним из первых суперкомпьютеров). Самым высокопроизводительным в мире на 19 июня 2017 г. являлся китайский суперкомпьютер Sunway TaihuLight: 93 петафлопс ($93 * 10^{15}$ операций с плавающей запятой в секунду), 10649600 ядер. Отметим для сравнения, что первый суперкомпьютер Cray-1 имел быстродействие $133 * 10^6$ флопс, а производительность процессоров современных персональных компьютеров может достигать сотен гигафлопс (гигафлопс = 10^9 флопс).

В своё время наиболее перспективными считались *аналоговые компьютеры*. Числовые данные в таких компьютерах описываются не с помощью дискретного представления, а аналоговыми физическими величинами (скорость, сила тока, давление). Аналоговые компьютеры широко использовались при решении важнейших задач авиации, ракетостроении, космических исследованиях и др. Примером аналоговых компьютеров являются гидроинтеграторы Владимира Сергеевича Лукьянова (1902–1980), которые позволяли решать дифференциальные уравнения в частных производных, моделируя протекание воды. Первый гидроинтегратор был создан в 1936 г. Гидроинтеграторы использовались для расчётов проекта Каракумского канала в 1940-е годы и при строительстве БАМа в 1970-х. С 1955 г. гидроинтеграторы выпускались серийно на Рязанском заводе счётно-аналитических машин и поставлялись в различные страны. В середине 1970-х гг. в производственных, научных и учебных организациях СССР работало более сотни гидроинтеграторов. Использовались гидроинтеграторы до середины 1980-х гг. [48].

Элементная база компьютеров — это основные элементы, которые обеспечивают проведение вычислительных процессов. Основной элементной базой современных компьютеров являются полупроводниковые интегральные микросхемы. Ранее в

качестве элементной базы широко использовались электрические реле и электронные лампы. Также разрабатывались вычислительные устройства на основе гидравлических и пневматических конструкций. Такие устройства на основе струйных элементов отличаются повышенной устойчивостью к радиации, экстремальным температурам, механическим воздействиям и вибрациям [4]. Вычислительные устройства на элементах струйной автоматики применяются в военной и спасательной технике, на взрывоопасных производствах, в системах безопасности АЭС и т. п.

В заключение перечислим некоторые современные направления исследований, связанные разработкой новых вычислительных алгоритмов и аппаратных средств: разработка алгоритмов, адаптированных для вычислений на многопроцессорных ЭВМ и графических процессорах, создание вычислительной техники на новых принципах (молекулярные, квантовые, оптические компьютеры), разработка методов анализа данных («data mining») на основе искусственных нейронных сетей, генетического алгоритма, нечеткой логики, статистического анализа и т. д.

Глава 2

Полиномиальная интерполяция

В этой главе рассматривается задача *интерполяции*. Интерполяция (интерполирование) — это построение функции по известным её значениям (и, возможно, значениям производных) в заданных точках. Очевидно, что можно построить необозримое множество функций, проходящих через фиксированные точки. Полиномиальная интерполяция предполагает, что в качестве интерполирующих функций рассматриваются многочлены.

2.1. Постановка задачи. Существование и единственность решения

Задача полиномиальной интерполяции. Предположим, что для некоторой функции $f(x)$ известны значения в различных точках x_i , $i = 0, \dots, n$: $f(x_i) = f_i$. Требуется построить полином

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (2.1.1)$$

степени (не выше) n , такой что

$$P_n(x_i) = f_i, \quad i = 0, \dots, n. \quad (2.1.2)$$

Полином $P_n(x)$ при этом называется *интерполяционным*, а точки x_i — *узлами интерполяции*.

Утверждение. Для любого $n = 0, 1, 2, \dots$ задача полиномиальной интерполяции имеет единственное решение. То есть для произвольных значений $x_i, f_i \in R$ ($i = 0, \dots, n$) существует единственный интерполяционный полином P_n степени не выше n , принимающий заданные значения f_i в $n + 1$ узлах интерполяции x_i .

Доказательство. Равенство (2.1.2) с учетом (2.1.1) можно записать в виде системы линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов a_0, a_1, \dots, a_n интерполяционного полинома:

$$W \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}, \quad (2.1.3)$$

где

$$W = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix}. \quad (2.1.4)$$

Матрицу W называют *матрицей Вандермонда* (Alexandre-Theophile Vandermonde, 1735–1796). Определитель матрицы W — это *определитель Вандермонда*, о котором известно, что он отличен от нуля, если среди x_i нет совпадающих значений (см., например, [22, 34]). Это означает, что система линейных уравнений единственным образом определяет коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_n интерполяционного полинома. \square

Замечание. Для определителя Вандермонда выполнено

$$|W(x_0, \dots, x_n)| = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j).$$

При больших n матрица Вандермонда плохо обусловлена. В частности, доказано (см. [53, 67]), что

$$\text{cond}_2 W(x_0, \dots, x_n) \geq 2^{n-1} / \sqrt{n+1}.$$

Кроме того, если все узлы x_i по модулю меньше или равны единице (или, наоборот, все узлы по модулю не меньше единицы), то выполнено неравенство

$$\text{cond}_2 W(x_0, \dots, x_n) \geq 2^{n-1}.$$

Через cond_2 здесь обозначено (спектральное) число обусловленности матрицы:

$$\text{cond}_2 W = \|W\|_2 \|W^{-1}\|_2,$$

где $\|W\|_2$ — спектральная норма матрицы W .

Замечание. Спектральная норма матрицы является *подчинённой* евклидовой векторной нормой:

$$\|W\|_2 = \max_{z \neq 0} \frac{|Wz|_2}{|z|_2}, \quad |z|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n z_i^2}.$$

Напомним, что спектральная норма $\|W\|_2$ равна максимальному сингулярному числу матрицы W . Сингулярные числа $\sigma_i(W)$ матрицы W — это корни квадратные собственных чисел матрицы $W^* W$: $\sigma_i(W) = \sqrt{\lambda_i(W^* W)}$ (это справедливо для любых квадратных матриц). Сингулярные числа матрицы W^{-1} получаются обращением сингулярных чисел матрицы W . Таким образом, число обусловленности $\text{cond}_2(W)$ равно отношению наибольшего сингулярного числа матрицы W к наименьшему. Более подробно о матричных и векторных нормах см. приложение А.

Выписать интерполяционный полином можно, не решая непосредственно систему уравнений (2.1.3). В следующих пунктах рассматриваются два способа построения интерполяционного многочлена.

2.2. Интерполяционный полином в форме Лагранжа

Один из способов выписать интерполяционный полином состоит в следующем. Предположим, что для набора узлов интерполяции x_i ($i = 0, \dots, n$) мы можем найти многочлены $P_{nk}(x)$ степени n , такие что

$$P_{nk}(x_i) = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & \forall i \neq k, \end{cases} \quad (2.2.1)$$

Тогда очевидно, что сумма

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i P_{nk}(x) \quad (2.2.2)$$

определяет искомым интерполяционным многочленом, так как легко проверить, что (2.1.2) выполнено. Нетрудно найти выражения для многочленов $P_{nk}(x)$, удовлетворяющих свойству (2.2.1):

$$P_{nk}(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}. \quad (2.2.3)$$

Представление (2.2.2) называют интерполяционным многочленом в форме Лагранжа (Joseph-Louis Lagrange, 1736–1813) или, кратко, *интерполяционным многочленом Лагранжа*. Функции $P_{nk}(x)$ называют *базисными полиномами Лагранжа*.

Упражнение 2.2.1. а) Выпишите полиномы Лагранжа для $n = 0, 1, 2, 3, 4$.

б) Докажите, что $\sum_{k=0}^n P_{nk}(x) = 1$.

в) Докажите, что при $m = 0, 1, \dots, n$ выполнено (независимо от выбора узлов x_k)

$$\sum_{k=0}^n x_k^m P_{nk}(x) = x^m.$$

Верно ли это равенство для $m = n + 1$?

Задание 2.2.1. Напишите программу для вычисления интерполяционного полинома Лагранжа. Воспользуйтесь формулами (2.2.2), (2.2.3).

2.3. Интерполяционный полином в форме Ньютона

Предположим, что $P_n(x)$ — интерполяционный полином степени n для значений $\{(x_i, f_i)\}_{i=0, \dots, n}$, а $P_{n+1}(x)$ — интерполяционный полином степени $n + 1$, построенный для значений $\{(x_i, f_i)\}_{i=0, \dots, n+1}$. Тогда разность $P_{n+1}(x) - P_n(x)$ является полиномом степени $n + 1$, который, очевидно, можно представить в виде

$$P_{n+1}(x) - P_n(x) = A_{n+1}(x - x_0) \cdots (x - x_n),$$

$$A_{n+1} = \frac{f_{n+1} - P_n(x_{n+1})}{(x_{n+1} - x_0) \cdots (x_{n+1} - x_n)}.$$

Эти соотношения позволяют построить последовательный алгоритм нахождения интерполяционных многочленов P_n :

$$P_0(x) = x_0,$$

$$P_1(x) = P_0(x) + f(x_0, x_1)(x - x_0),$$

$$P_2(x) = P_1(x) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1),$$

...

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

Числа $f(x_0, x_1, \dots, x_k)$ называются *разделёнными разностями* (порядка k) и определяются соотношениями

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

$$f(x_0, \dots, x_k) = \frac{f(x_1, \dots, x_k) - f(x_0, \dots, x_{k-1})}{x_k - x_0}. \quad (2.3.1)$$

Методом математической индукции можно доказать [36, 53, 58], что

$$f(x_0, \dots, x_k) = \sum_{i=0}^k \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0)(x_i - x_{i-1}) \cdots (x_i - x_{i+1})(x_i - x_k)}.$$

Отсюда следует, что разделённая разность не зависит от порядка узлов, по которым она строится.

Представление

$$P_n(x) = f_0 + \sum_{i=1}^n f(x_0, \dots, x_i)(x - x_0) \dots (x - x_{i-1}) \quad (2.3.2)$$

называют *интерполяционным полиномом (в форме) Ньютона*.

Упражнение 2.3.1. Найдите значения разделённых разностей, заполните таблицу 2.1 и постройте интерполяционный полином Ньютона.

Таблица 2.1

Разделённые разности

i	x_i	f_i	$f(x_i, x_{i+1})$	$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$	$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3})$
0	-1	3	?	?	?
1	0	2	?	?	-
2	1	5	?	-	-
3	3	23	-	-	-

Замечание. Интерполяционный многочлен в форме Лагранжа явно отражает зависимость от каждого значения функции f_i . При изменении степени n интерполяционный многочлен Лагранжа требуется строить заново. Интерполяционный многочлен в форме Ньютона явно выражается не через значения функции, а через разделённые разности. При изменении n у интерполяционного многочлена Ньютона достаточно добавить или отбросить соответствующие слагаемые.

В случае равноотстоящих узлов $x_k = x_0 + kh$ ($k = 0, \dots, n$) интерполяционный полином Ньютона можно записать в виде

$$P_n(x) = f_0 + \sum_{k=1}^n \frac{\Delta^k f_0}{k!h^k} (x - x_0) \dots (x - x_{k-1}). \quad (2.3.3)$$

Здесь числа $\Delta^k f_0$ определяются из соотношений

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i,$$

$$\Delta^k f_i = \Delta^{k-1} f_{i+1} - \Delta^{k-1} f_i.$$

Величины $\Delta^k f_i$ называются *конечными разностями* (порядка k). Конечные разности связаны с разделёнными разностями формулой

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

При $h \rightarrow 0$ формула (2.3.3) «превращается» в формулу Тейлора (см. приложение Б.1):

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{k=1}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k.$$

Задание 2.3.1. Напишите программу для вычисления интерполяционного полинома Ньютона. Воспользуйтесь формулами (2.3.1), (2.3.2).

2.4. Оценка погрешности полиномиальной интерполяции

Предположим, что P_n — интерполяционный многочлен функции f , построенный по узлам x_0, \dots, x_n . Функцию

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) \quad (2.4.1)$$

называют *остаточным членом интерполяции*.

Теорема 2.1. Предположим, что $x, x_0, \dots, x_n \in [a, b]$ и функция $f(x) \in C^{(n+1)}[a, b]$, т.е. имеет на отрезке $[a, b]$ непрерывную ограниченную производную $f^{(n+1)}$. Тогда найдётся число $\xi \in [a, b]$, для которого выполнено

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j). \quad (2.4.2)$$

Более точно, $\min(x, x_0, \dots, x_n) \leq \xi \leq \max(x, x_0, \dots, x_n)$.

Доказательство. Рассмотрим функцию

$$\varphi(z) = R_n(z) - R_n(x) \frac{(z - x_0) \cdots (z - x_n)}{(x - x_0) \cdots (x - x_n)}. \quad (2.4.3)$$

Эта функция имеет ограниченную на $[a, b]$ производную $\varphi^{(n+1)}$ и равна нулю по крайней мере в $(n+2)$ точках x, x_0, \dots, x_n , т. е. имеет $(n+2)$ нулей. По теореме Ролля (см. приложение Б.2) функция φ' имеет на $[a, b]$ не меньше $(n+1)$ нулей. Продолжая подобные рассуждения для производных более высокого порядка, получим, что существует точка $\xi \in [a, b]$, для которой выполнено $\varphi^{(n+1)}(\xi) = 0$. Из последнего равенства следует, что

$$\varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - P_n^{(n+1)}(\xi) - R_n(x) \frac{(n+1)!}{\prod_{j=0}^n (x - x_j)} = 0.$$

Отсюда вытекает (2.4.2). \square

Следствие 2.1. В предположении теоремы 2.1 выполнено

$$|R_n(x)| \leq \frac{\max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(\xi)|}{(n+1)!} |\omega(x)|, \quad (2.4.4)$$

где

$$\omega(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j). \quad (2.4.5)$$

Следствие 2.2. Предположим, что узлы образуют равномерную сетку, $x_i = a + ih, i = 0, \dots, n, h = (b-a)/n$ и $x \in [a, b]$. Тогда

$$|R_n(x)| \leq \frac{h^{n+1} \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|}{n+1}. \quad (2.4.6)$$

Доказательство. Положим $x = x_k + \alpha h, \alpha \in (0, 1), k < n$. Тогда

$$x - x_i = kh + \alpha h - ih = (k + \alpha - i)h,$$

$$\prod_{i=0}^n (x - x_i) = h^{n+1} \prod_{i=0}^n (k + \alpha - i),$$

$$\prod_{i=0}^n |k + \alpha - i| \leq \prod_{i=0}^k (k + 1 - i) \prod_{i=k+1}^n (i - k),$$

$$\prod_{i=0}^n |k + \alpha - i| \leq (k+1)! \prod_{i=k+1}^n (i - k) \leq (k+1)! \prod_{i=k+2}^n i = n!.$$

Из последнего неравенства и (2.4.2) следует (2.4.6). (Наглядные пояснения к последним неравенствам можно найти, например, в [55] на стр. 34.) \square

Упражнение 2.4.1. а) Функция $f(x) = \sqrt{x}$ интерполируется полиномом второй степени по значениям в узлах $x_0 = 100, x_1 = 121, x_2 = 144$. Оцените погрешность интерполяции в точке $x = 116$ и на интервале $[100, 144]$. Воспользуйтесь неравенством (2.4.4) при $n = 2$.

б) Докажите, что погрешность линейной интерполяции

$$\left(1 - \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right) f_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1$$

функции f на интервале (x_0, x_1) не превышает значения

$$\frac{\max_{x \in [a, b]} |f^2(\xi)|}{8} h^2, \quad h = x_1 - x_0. \quad (2.4.7)$$

Найдите для этого максимум модуля функции

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

на интервале (x_0, x_1) . Отметим, что оценка (2.4.7) лучше, чем оценка

$$|R_n(x)| \leq \frac{\max_{x \in [a, b]} |f^2(\xi)|}{2} h^2,$$

которая следует из (2.4.6).

2.5. Интерполяционные полиномы Эрмита

Предположим теперь, что кроме значений функции в узлах $x_i, i = 0, \dots, n$, известны и значения производных $f^{(k)}(x_i) = f_i^k, k = 0, 1, \dots, N_i - 1$. Ставится задача поиска многочлена $P_m(x)$ степени m , для которого

$$P_m^{(k)}(x_i) = f_i^k, \quad i = 0, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots, N_i - 1. \quad (2.5.1)$$

Если $m = N_0 + \dots + N_n - 1$, то существует единственный многочлен, для которого выполнено (2.5.1). Этот многочлен называют *интерполяционным многочленом Эрмита* (Charles Hermite, 1822–1901). Соответствующую задачу интерполяции называют задачей интерполяции с кратными узлами (в отличие от задачи (2.1.1)–(2.1.2), которую называют задачей интерполяции с простыми узлами). Процедуры построения интерполирующих полиномов и результаты о погрешности, рассмотренные ранее для задачи интерполяции с простыми узлами, обобщаются на случай кратных узлов. Более подробно об интерполяции Эрмита см., например, [58].

Упражнение 2.5.1. Постройте интерполяционные полиномы Эрмита для

$$1) \quad P_2(x_0) = f_0, \quad P_2'(x_0) = f_0', \quad P_2(x_1) = f_1;$$

$$2) \quad P_3(x_0) = f_0, \quad P_3'(x_0) = f_0', \quad P_3''(x_1) = f_0'', \quad P_3(x_1) = f_1;$$

$$3) \quad P_3(x_0) = f_0, \quad P_3'(x_0) = f_0', \quad P_3(x_1) = f_1, \quad P_3'(x_1) = f_1'.$$

2.6. Дополнительные сведения. Примеры Рунге и Бернштейна

Приведем сведения, которые дают дополнительное представление о возможностях и свойствах полиномиальной интерполяции.

1. О возможности аппроксимации полиномом произвольной непрерывной на конечном интервале функции утверждает *теорема Вейерштрасса* (Karl Weierstrass, 1815–1897): для произвольных $f \in C[a, b]$ и $\varepsilon > 0$ существует многочлен $P(x)$, такой что $\|f - P\|_{C[a, b]} < \varepsilon$. Аналогичный результат доказан и для аппроксимации периодических функций тригонометрическими полиномами.

Аналог интерполяционного полинома Лагранжа для функции f с периодом 2π имеет вид (тригонометрический интерполяционный полином) [10, 51]

$$\begin{aligned} & \frac{\sin(x - x_1) \sin(x - x_2) \dots \sin(x - x_n)}{\sin(x_0 - x_1) \sin(x_0 - x_2) \dots \sin(x_0 - x_n)} f_0 + \\ & + \frac{\sin(x - x_0) \sin(x - x_2) \dots \sin(x - x_n)}{\sin(x_1 - x_0) \sin(x_1 - x_2) \dots \sin(x_1 - x_n)} f_1 + \dots \\ & + \frac{\sin(x - x_1) \sin(x - x_2) \dots \sin(x - x_{n-1})}{\sin(x_n - x_1) \sin(x_n - x_2) \dots \sin(x_n - x_{n-1})} f_n. \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

Для нечётного числа узлов $x_k \in [0, 2\pi)$, $k = 0, 1, \dots, 2M$, тригонометрический полином можно записать в виде

$$\sum_{k=0}^{2M} f_k \prod_{m=0, m \neq k}^{2M} \frac{\sin[(x - x_m)/2]}{\sin[(x_k - x_m)/2]}. \quad (2.6.2)$$

В случае равномерной сетки $x_k = 2k\pi/(2M+1)$ формула (2.6.2) принимает вид

$$\sum_{k=0}^{2M} f_k \frac{\operatorname{sinc}[(2M+1)(x - x_k)/2]}{\operatorname{sinc}[(x - x_k)/2]}. \quad (2.6.3)$$

Здесь sinc обозначает функцию

$$\operatorname{sinc}(x) = \begin{cases} \sin(x)/x, & x \neq 0, \\ 1, & x = 0, \end{cases}$$

которую называют *кардинальным синусом*.

Задача тригонометрической интерполяции тесно связана с дискретным преобразованием Фурье, для которого разработаны специальные быстрые алгоритмы (см., например, [7]).

Задание 2.6.1. Напишите программу для тригонометрической интерполяции периодических функций на равномерной сетке по формуле (2.6.3).

2. Свойством равномерной сходимости к непрерывной функции обладают полиномы Бернштейна (Сергей Натанович Бернштейн, 1880—1968). Для устойчивого вычисления полиномов Бернштейна можно использовать рекурсивный алгоритм де Кастельжо (Paul de Casteljaeu, род. в 1930 г.), см., например, [15].

3. Можно предположить, что чем больше узлов интерполяции, тем ближе будет интерполяционный полином к интерполируемой функции. Однако, как следует из *теоремы Фабера* (Georg Faber, 1877—1966), доказанной в 1914 г., это не всегда так: для любой сгущающейся последовательности интерполяционных сеток на $[a, b]$ найдётся некоторая непрерывная функция, для которой последовательность соответствующих интерполяционных полиномов не сходится к ней равномерно (см., например, [39, 40, 60]).

Известно, что для весьма широкого класса функций Липшица — Гёльдера с показателем из $(0, 1]$ последовательность интерполяционных полиномов, построенных по чебышевским узлам (корням полиномов Чебышёва), будет равномерно сходящейся к интерполируемой функции [58]. Полиномы Чебышёва фактически минимизируют величину $\max_{x \in [a, b]} |\omega(x)|$, которая присутствует в оценке погрешности полиномиальной интерполяции (2.4.4). О полиномах Чебышёва см., например, [14, 36, 42, 58] и др.

4. *Теорема Марцинкевича* (Jozef Marcinkiewicz, 1910—1940) утверждает, что для заданной непрерывной функции можно подобрать «хорошую» последовательность множеств узлов: для любой непрерывной функции $f \in C[a, b]$ существует последовательность интерполяционных сеток, такая что построенные по этой последовательности интерполяционные полиномы равномерно сходятся к функции f (см. [40]).

5. *Феноменом Рунге* называют появление возрастающих осцилляций при интерполяции полиномами высокой степени, см. рис 2.1. Это явление было продемонстрировано Карлом Рунге (Carl Runge, 1856—1927) в 1901 г. на примере полиномиальной

интерполяции функции $(1 + x^2)^{-1}$ на интервале $[-5, 5]$ с равноотстоящими узлами. При $x > 3.63$ значения соответствующих интерполяционных полиномов неограниченно растут по модулю. Это, в частности, связано с ростом значений производных высокого порядка интерполируемой функции у концов интервала.

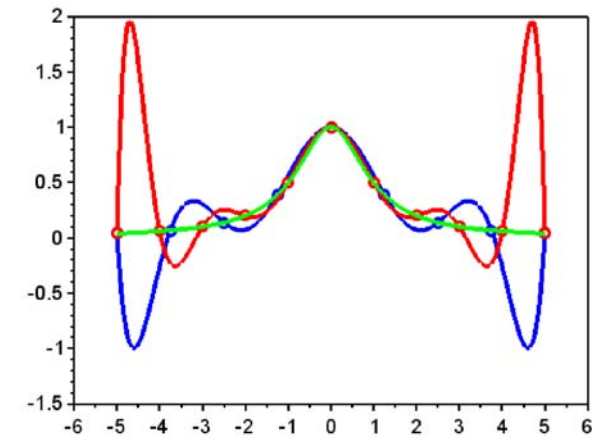


Рис. 2.1. Иллюстрация феномена Рунге: появление возрастающих осцилляций при интерполяции полиномами высокой степени

6. В 1918 г. Бернштейн рассмотрел пример полиномиальной интерполяции функции $|x|$, $x \in [-1, 1]$, на равномерной сетке узлов (включая концы интервала) и показал, что последовательность интерполяционных полиномов расходится на всём интервале $[-1, 1]$, кроме точек $-1, 0, 1$.

7. Если для фиксированного множества узлов не ограничивать степень интерполирующего полинома, то найдётся последовательность интерполирующих (на этом множестве узлов) полиномов, равномерно сходящаяся к заданной функции, см. [57].

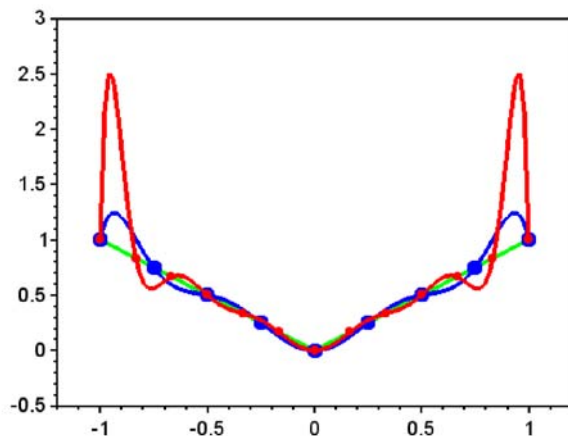


Рис. 2.2. Иллюстрация к примеру Бернштейна

Задание 2.6.2. Проведите вычислительные эксперименты, которые демонстрируют (а) феномен Рунге, (б) пример Бернштейна, (в) неустойчивость интерполяции полиномами высокой степени (см. пример в начале главы 3).

2.7. О других способах интерполяции

1. Интерполяция обобщёнными многочленами. Функцию вида

$$\Phi_m(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_m\varphi_m(x) \quad (2.7.1)$$

называют *обобщённым многочленом* степени m по системе базисных функций φ_i . Для интерполяции могут использоваться, в частности, алгебраические полиномы ($\varphi_i(x) = x^i$), тригонометрические полиномы (с базисными функциями $\varphi_0 = 1$, $\varphi_1 = \sin(x)$, $\varphi_2 = \cos(x)$, ..., $\varphi_{2n-1} = \sin(nx)$, $\varphi_{2n} = \cos(nx)$ с периодом 2π), экспоненциальные полиномы ($\varphi_0 = 1$, $\varphi_1 = \operatorname{sh}(x)$,

$\varphi_2 = \operatorname{ch}(x)$, ..., $\varphi_{2n-1} = \operatorname{sh}(nx)$, $\varphi_{2n} = \operatorname{ch}(nx)$) или $\varphi_1 = \exp(x)$, $\varphi_2 = \exp(-x)$, ..., $\varphi_{2n-1} = \exp(nx)$, $\varphi_{2n} = \exp(-nx)$) и др.

Для задачи интерполяции

$$\Phi_m(x_i) = f_i, \quad i = 0, \dots, n, \quad (2.7.2)$$

коэффициенты обобщённого полинома a_0, \dots, a_m удовлетворяют системе линейных уравнений

$$Wa = f, \quad (2.7.3)$$

$$a = (a_0, \dots, a_m)^T, \quad f = (f_0, \dots, f_n)^T,$$

$$W = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \varphi_2(x_0) & \dots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \dots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}.$$

Рассмотрим набор векторов

$$\varphi_j = (\varphi_0(x_j), \varphi_1(x_j), \dots, \varphi_m(x_j))^T, \quad j = 0, \dots, n. \quad (2.7.4)$$

Матрицу скалярных произведений

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \langle \varphi_0, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_0, \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_0, \varphi_m \rangle \\ \langle \varphi_2, \varphi_0 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_2, \varphi_m \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle \varphi_m, \varphi_0 \rangle & \langle \varphi_m, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_m, \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_m, \varphi_m \rangle \end{bmatrix}$$

называют матрицей Грама (Jørgen Gram, 1850–1916) системы векторов φ_j , $j = 0, \dots, n$, а её определитель — определителем Грама.

При $m > n$ система векторов φ_j является линейно зависимой. В этом случае решения системы (2.7.3) либо не существует, либо неединственно.

При $m = n$ для существования и единственности решения задачи интерполяции (2.7.3) необходимо и достаточно линейной независимости системы векторов φ_j , $j = 0, \dots, n$ (это эквивалентно тому, что определитель Грама не равен нулю).

2. Рациональная интерполяция. Для функций с резкими изменениями и особыми точками хорошие результаты может дать интерполяция рациональными функциями [7]:

$$\frac{a_0 + a_1x_j + a_2x_j^2 + \dots + a_px_j^p}{b_0 + b_1x_j + b_2x_j^2 + \dots + b_qx_j^q} = f_j, \quad j = 1 + p + q.$$

Алгоритмы вычисления коэффициентов $a_0, \dots, a_p, b_0, \dots, b_q$ обсуждаются в [23] п. 5.2.

Упражнение 2.7.1. Выпишите систему линейных уравнений для нахождения коэффициентов рациональной интерполяции.

3. Существует множество других подходов и численных методов, применяемых при решении различных задач интерполяции: интерполяция сплайнами (см. следующую главу), разнообразные методы интерполяции геометрических объектов в многомерных пространствах, барицентрический метод, кригинг (регрессия на основе гауссовских процессов), интерполяция на основе радиальных базисных функций и т. д.

Глава 3

Сплайны

Полиномы высокой степени редко используются для интерполяции функций. Одна из причин состоит в том, что значения интерполирующего многочлена могут сильно меняться при небольших изменениях значений в узлах. Соответствующий пример приведён на рис. 3.1. Здесь значения функции $f(x) = 0$ интерполируются по 21 узлу $x_i = i, i = 0, \dots, 20$, многочленом степени 20. Если значения в узлах $x_i = i$ берутся точными ($f_i = 0$), то интерполирующий полином (синяя линия на рис. 3.1) даёт нулевую константу. Если теперь в одном узле x_9 изменить значение на $f_9 = 0.01$, то интерполирующий полином существенно отклонится от нулевого значения (красная линия на рис. 3.1).

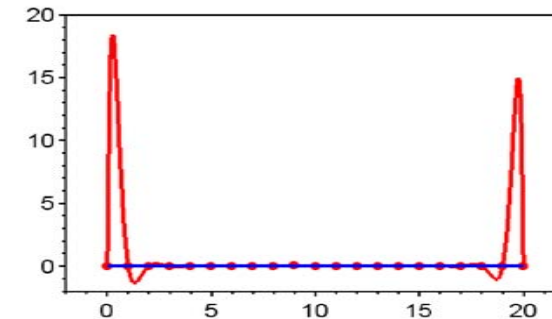


Рис. 3.1. Пример «неустойчивости» интерполяции многочленом степени 20 (см. пояснения в тексте)

Упражнение 3.1. Найдите определитель Вандермонда и число обусловленности матрицы Вандермонда для рассмотренного выше примера интерполяции.

Эффективный подход к интерполяции функций на большом количестве узлов состоит в следующем. Область интерполяции разбивают на участки с небольшим количеством узлов. На каждом участке разбиения строится свой интерполирующий полином, но при дополнительных условиях согласованности с интерполяцией на соседних участках. Условия согласованности обеспечивают необходимые требования гладкости интерполирующей функции на всей области. Такой подход называют *сплайн-интерполяцией*, а интерполирующие функции называют *сплайнами*. Термин «сплайны» может использоваться и в более широком контексте: вместо алгебраических полиномов могут использоваться функции других типов, а вместо требования гладкости могут рассматриваться другие условия, обусловленные особенностями рассматриваемой задачи.

Термин «сплайн» в теории интерполяции функций был введён Исааком Шонбергом (Isaac Jacob Schoenberg, 1903–1990) в 1946 г., хотя подобные объекты изучались в математике и раньше (см., например, предисловие к книге [29]). В [58] отмечается особая роль Николая Ивановича Лобачевского (1792–1856) в связи с его работой, опубликованной ещё в 1842 г., где использовались конструкции сплайнов. Широкое распространение сплайны получили с середины прошлого столетия при построении кривых и поверхностей для производства различных изделий (например, при конструировании самолетов, автомобилей и морских судов). Отметим, что существенный вклад в теорию сплайн-функций внесли советские и российские специалисты, см. [2, 11, 18, 28, 29, 44, 49].

Теория сплайн-функций находит широкое применение при решении самых разнообразных задач вычислительной математики (см., например, [49]). Ниже кратко будут рассмотрены примеры и свойства полиномиальных сплайнов.

3.1. Определение сплайна

Предположим, что на интервале $[a, b]$ задана сетка узлов $x_0 = a < x_1 < \dots < x_n = b$, которая делит интервал $[a, b]$ на участки $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n-1$. Функцию $S(x)$ будем называть *сплайном*, если на каждом участке $[x_i, x_{i+1}]$ её можно представить полиномом степени m_i (но на всём интервале $[a, b]$ функция полиномом не является). Точки x_i , $i = 0, \dots, n$ называют *узлами сплайна*. Максимальная по всем участкам степень многочленов

$$m = \max_{i=0, \dots, n-1} m_i$$

называется *степенью сплайна*. Сплайны степени два называют *квадратичными* или *параболическими*, а сплайны степени три — *кубическими*.

Обозначим через l максимальный порядок непрерывной на $[a, b]$ производной сплайна $S(x) \in C^l[a, b]$. Разность

$$d = m - l$$

между степенью сплайна и порядком производной называют *дефектом сплайна*. «Максимально гладкий» сплайн имеет дефект 1, так как, согласно нашему определению, сплайн степени m не может иметь более $m - 1$ производных (иначе функция S является «чистым» полиномом). Условно можно сказать, что чем больше дефект сплайна, тем он менее гладкий по сравнению с полиномом.

Простым примером сплайна является кусочно-линейная функция, принимающая значения S_i в узлах x_i :

$$S(x) = S_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}(S_{i+1} - S_i), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]. \quad (3.1.1)$$

Такой сплайн называют *линейным*.

Упражнение 3.1.1. Докажите, что кусочно-линейную функцию (3.1.1) можно представить в виде

$$S(x) = \sum_{i=0}^n S_i B_i(x), \quad x \in [a, b], \quad (3.1.2)$$

$$B_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}] \end{cases} \quad (3.1.3)$$

(вне интервала (x_{i-1}, x_{i+1}) функция B_i равна нулю). Нарисуйте график функции B_i .

Очевидно, что линейный сплайн является интерполирующим для значений S_i в узлах интерполяции x_i . При этом узлы интерполяции совпадают с узлами сплайна. Однако в общем случае узлы сплайна могут не совпадать с узлами интерполяции (см. пример ниже).

3.2. Параболические интерполяционные сплайны

В этом параграфе узлы сплайнов, если они не совпадают с узлами интерполяции будем обозначать через \tilde{x}_i .

Рассмотрим задачу интерполяции функции по значениям f_i в узлах интерполяции

$$x_0 = a < x_1 < \dots < x_n = b$$

квадратичным сплайном $S(x)$ (т. е. требуется выполнение равенств $S(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, n$). При этом в качестве узлов \tilde{x}_i сплайна S рассмотрим точки посередине между узлами интерполяции x_i :

$$\begin{aligned} \tilde{x}_0 &= a, & \tilde{x}_{n+1} &= b, \\ \tilde{x}_i &= \frac{x_{i-1} + x_i}{2}, & i &= 1, \dots, n. \end{aligned}$$

На каждом участке $[\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, n-1$, сплайн S можно представить многочленом второй степени:

$$S(x) = S_i(x) = a_i + b_i(x - \tilde{x}_i) + c_i(x - \tilde{x}_i)^2, \quad x \in [\tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}]. \quad (3.2.1)$$

Таким образом, для описания сплайна S нужно задать $3(n+1)$ коэффициентов a_i, b_i, c_i . Требование интерполяции

$$S(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

даёт $n+1$ уравнений.

Мы хотим, чтобы интерполирующий сплайн S был максимально гладким на интервале $[a, b]$, т. е. чтобы его дефект равнялся единице. Это даёт ещё $2n$ уравнений:

$$S_i(\tilde{x}_{i+1}) = S_{i+1}(\tilde{x}_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, n-1,$$

$$S'_i(\tilde{x}_{i+1}) = S'_{i+1}(\tilde{x}_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

В результате получаем $(3n+1)$ уравнений для $3(n+1)$ неизвестных. Ещё два уравнения выбирают из дополнительных соображений и требований к интерполирующему сплайну. Например, рассматривают условия вида

$$S''(a) = A, \quad S''(b) = B,$$

или

$$S'(a) = A, \quad S'(b) = B.$$

Упражнение 3.2.1. Выпишите систему линейных уравнений на коэффициенты только что рассмотренного квадратичного интерполяционного сплайна.

Упражнение 3.2.2. Выпишите систему линейных уравнений на коэффициенты квадратичного интерполяционного сплайна дефекта 1 для узлов интерполяции

$$x_0 = a < x_1 < \dots < x_n = b$$

в случае, когда в качестве узлов сплайна используются узлы интерполяции, $\tilde{x}_i = x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Сколько дополнительных уравнений потребуется для однозначного определения такого сплайна?

Более подробную информацию о квадратичных сплайнах можно найти, например в [12, 49].

3.3. Кубические сплайны

Широкое распространение при решении прикладных задач получили кубические сплайны (дефекта 1), так как они обладают непрерывными вторыми производными. Приведём текст из [55] на стр. 39, где приводится пример, иллюстрирующий это свойство: «железнодорожный путь должен быть кривой с непрерывной второй производной, в противном случае в местах разрыва второй производной при движении поезда возникает удар, разрушающий и рельсы, и колеса».

При построении интерполирующего кубического сплайна узлы сплайна выбирают таким образом, чтобы они совпадали с узлами интерполяции:

$$S(x) = S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3. \quad (3.3.1)$$

Равенства (3.3.1) выполнены на участках

$$x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Условия интерполяции и гладкости запишутся в виде

$$S_i(x_i) = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1, \quad (3.3.2)$$

$$S_i(x_{i+1}) = f_{i+1}, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1, \quad (3.3.3)$$

$$S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, n - 2, \quad (3.3.4)$$

$$S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, n - 2. \quad (3.3.5)$$

Эти выражения определяют систему $4n - 2$ линейных уравнений для $4n$ неизвестных

$$a_i, b_i, c_i, d_i \quad (i = 0, 1, \dots, n - 1).$$

Для однозначного определения интерполирующего полинома требуется ещё два уравнения. Условия

$$S''(x_0) = 0, \quad S''(x_n) = 0, \quad (3.3.6)$$

определяют *естественный* кубический сплайн. В зависимости от конкретной задачи могут использоваться и другие дополнительные условия. В качестве дополнительных часто рассматриваются (1) условия на первые производные

$$S'(x_0) = A, \quad S'(x_n) = B,$$

(2) условия на вторые производные

$$S''(x_0) = A, \quad S''(x_n) = B,$$

(3) условия понижения степени сплайна на краях

$$S'''(x_0) = 0, \quad S'''(x_n) = 0,$$

(4) условия непрерывности третьей производной $S'''(x)$ в узлах x_1 и x_{n-1} (эти условия означают, что один и тот же полином используется на крайнем и ближайшем к нему интервалах; для этих условий используется английский термин «not-a-knot»),
(5) условия периодичности

$$S'(x_0) = S'(x_n), \quad S''(x_0) = S''(x_n) \quad (\text{при } f_0 = f_n).$$

Упражнение 3.3.1. Выпишите систему линейных уравнений на коэффициенты c_i естественного интерполяционного кубического сплайна. Убедитесь, что матрица соответствующей системы уравнений будет трёхдиагональной.

Задание 3.3.1. Напишите программу интерполяции естественным кубическим сплайном функции $f(x)$, заданной таблично на равномерной сетке $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$, $f(x_i) = f_i$.

Можно доказать, что естественный интерполяционный кубический сплайн существует и он единственный [53]. Кроме того, существует единственный интерполяционный кубический сплайн с дополнительными условиями вида (1)–(2), (4)–(5) [18].

Упражнение 3.3.2. Исследуйте существование и единственность интерполяционного кубического сплайна с дополнительными условиями (3).

Замечание. Кусочно-линейная интерполяция (3.1.1) минимизирует функционал

$$\int_a^b [f'(x)]^2 dx.$$

Естественный интерполяционный кубический сплайн (3.3.1) минимизирует функционал энергии

$$\int_a^b [f''(x)]^2 dx.$$

Более точные формулировки см. в [7, 12, 53, 58, 63]. Естественный кубический сплайн описывает форму гибкой рейки, проходящей через точки (x_i, f_i) . Примеры линейного и кубического интерполяционных сплайнов представлены на рис. 3.2.

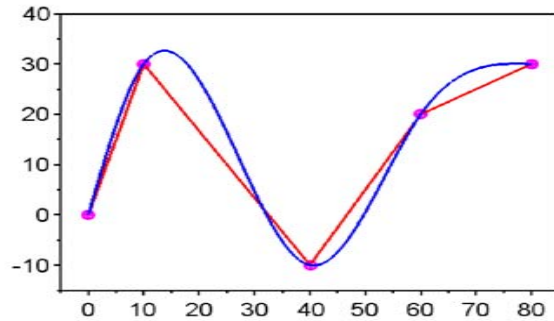


Рис. 3.2. Пример интерполяции линейным сплайном (красная линия) и естественным кубическим сплайном (синяя линия)

Рассмотрим функцию $f(x)$, $x \in [a, b]$, и через $S_n(x)$ обозначим естественный кубический сплайн, интерполирующий значения $f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, на равномерной сетке $x_i = ih$, $h = (b - a)/n$.

Теорема 3.1. Если $f \in C^j[a, b]$ и $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, то

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - S_n(x)| = O(h^j).$$

Доказательство этой теоремы и её более общего варианта для неравномерных сеток можно найти в [53]. Другие результаты о погрешности интерполяции кубическими сплайнами см., например, в [18, 46, 49, 61].

3.4. В-сплайны

Рассмотрим равномерную сетку узлов x_i с шагом h и функции $B_{3,i}(x)$, отличные от нуля лишь на интервалах $[x_i, x_{i+4}]$,

$$B_{3,i}(x) = \begin{cases} \frac{(x - x_i)^3}{6h^4}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ \frac{1}{6h} + \frac{(x - x_{i+1})}{2h^2} + \frac{(x - x_{i+1})^2}{2h^3} - \frac{(x - x_{i+1})^3}{2h^4}, & x \in [x_{i+1}, x_{i+2}], \\ \frac{1}{6h} + \frac{(x_{i+3} - x)}{2h^2} + \frac{(x_{i+3} - x)^2}{2h^3} - \frac{(x_{i+3} - x)^3}{2h^4}, & x \in [x_{i+2}, x_{i+3}], \\ \frac{(x_{i+4} - x)^3}{6h^4}, & x \in [x_{i+3}, x_{i+4}]. \end{cases} \quad (3.4.1)$$

Следующая теорема (см., например, [12, 41]) описывает представление для естественных кубических сплайнов на равномерной сетке, аналогичное представлению линейного сплайна (3.1.2), (3.1.3).

Теорема 3.2. Для любого естественного кубического сплайна $S(x)$ дефекта 1, построенного на сетке равноотстоящих узлов

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

найдутся постоянные

$$\alpha_{-3}, \alpha_{-2}, \alpha_{-1}, \alpha_0, \dots, \alpha_{n-2}, \alpha_{n-1},$$

такие что

$$S(x) = \sum_{i=-3}^{n-1} \alpha_i B_{3,i}(x), \quad x \in [a, b]. \quad (3.4.2)$$

Нетрудно убедиться, что функции $B_{3,i}$ являются естественными кубическими сплайнами дефекта 1. При этом они отличны от нуля лишь на интервалах (x_i, x_{i+4}) . Эти функции относят к классу *В-сплайнов* («B-spline» — это сокращение от «basis spline»). Ниже мы лишь кратко изложим некоторые сведения о В-сплайнах, подробную информацию о них можно найти в [9, 18, 35, 49, 53].

1. Рассмотрим пространство SP^m всех сплайнов степени m дефекта 1 на сетке x_0, \dots, x_n . Общее число коэффициентов полиномов степени m на n отрезках равно $(m+1)n$. Условие равенства всех производных до порядка $(m-1)$ включительно в $(n-1)$ внутреннем узле даёт линейно независимую систему из $m(n-1)$ линейных уравнений. Отсюда следует, что размерность пространства SP^m равна $n+m$. То есть, любой сплайн из SP^m можно представить как сумму $n+m$ линейно независимых базисных функций.

2. Рассмотрим функции $B_0^k(x)$, равные нулю вне интервала $[x_k, x_{k+1})$, такие что

$$B_0^k(x) = \frac{1}{x_{k+1} - x_k}, \quad x \in [x_k, x_{k+1}). \quad (3.4.3)$$

Функции $B_m^k(x)$ для $m \geq 1$ определим по рекуррентному соотношению

$$B_m^k(x) = \frac{x - x_k}{x_{k+m} - x_k} B_{m-1}^k(x) + \frac{x_{k+m+1} - x}{x_{k+m+1} - x_{k+1}} B_{m-1}^{k+1}(x). \quad (3.4.4)$$

Кусочно-полиномиальные функции $B_m^k(x)$ называют В-сплайнами порядка (или степени) m .

3. Система $n+m$ В-сплайнов $B_m^k(x)$, $-m \leq k \leq (n-1)$, образует базис в пространстве SP^m . Отметим, что для задания всех В-сплайнов $B_m^k(x)$ порядка m формально наряду с узлами сетки x_0, \dots, x_n требуется рассмотреть ещё $2m$ дополнительных узлов.

4. Можно доказать, что В-сплайны обладают носителем, содержащим минимально возможное число узлов сетки. (Напомним, что *носителем* функции называют замыкание множества, на котором функция отлична от нуля.)

5. Рассмотрим случай равноотстоящих узлов с шагом h , $x_k = kh$. Тогда В-сплайны $B_m^k(x)$ можно определить по формуле

$$B_m^k(x) = B_m((x-k)/h),$$

где

$$B_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 1), \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (3.4.5)$$

$$B_m(x) = \int_0^1 B_{m-1}(x-y) B_0(y) dy, \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.4.6)$$

Формула (3.4.4) принимает вид

$$B_m(x) = \frac{x}{m} B_{m-1}(x) + \frac{m+1-x}{m} B_{m-1}(x-1). \quad (3.4.7)$$

Графики нескольких функций B_m представлены на рис. 3.3.

6. Функцию (3.4.5) можно интерпретировать как плотность распределения случайной величины $\zeta_0 = \xi_0$, равномерно распределённой на интервале $(0, 1)$. Функции B_m являются плотностями распределения случайных величин $\zeta_m = \xi_0 + \dots + \xi_m$, представимых в виде сумм $m+1$ независимых случайных величин ξ_k равномерно распределённых на интервале $(0, 1)$. В этой интерпретации преобразования Фурье

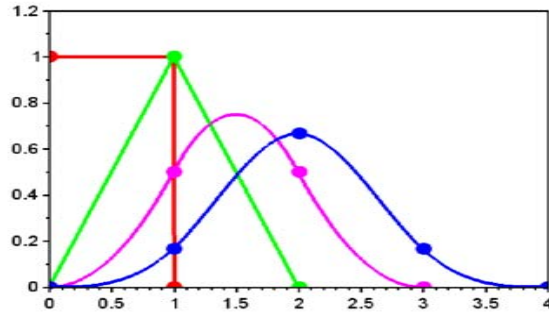


Рис. 3.3. Графики сплайнов B_m для $m = 0$ (красный), $m = 1$ (зеленый), $m = 2$ (пурпурный), $m = 3$ (синий).

$$F[B_m](\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} B_m(x) e^{i\lambda x} dx$$

функции B_m — это характеристическая функция

$$\varphi_{\zeta_m}(\lambda) = \mathbf{M}e^{i\lambda\zeta_m} = F[B_m](\lambda)$$

случайной величины ζ_m . Нетрудно доказать, что

$$F[B_m](\lambda) = [e^{i\lambda/2}]^{m+1} \left[\frac{\sin(\lambda/2)}{\lambda/2} \right]^{m+1}.$$

7. Функции B_m обладают следующими свойствами.

(а) Носитель функции B_m — это множество $[0, m + 1]$.

(б) Функция B_m является сплайном степени m дефекта 1,

при этом

$$B'_m(x) = B_{m-1}(x) - B_{m-1}(x - 1).$$

(в) Для $m = 0, 1, \dots$ выполнено тождество

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} B_m(x - k) \equiv 1.$$

В заключение отметим, что В-сплайны играют существенную роль при построении численных методов решения дифференциальных и интегральных уравнений. На основе линейных В-сплайнов (3.1.3), в частности, строится метод конечных элементов, широко используемый при решении прикладных задач.

Численное дифференцирование

Численное дифференцирование — это вычисление производных от функций, заданных таблично. Основной подход, используемый при разработке методов численного дифференцирования, состоит в предварительной аппроксимации функции по табличным данным и последующем дифференцировании полученной функции непрерывного аргумента. Ниже будут рассмотрены методы численного дифференцирования на основе полиномиальной интерполяции [7, 14, 16, 21, 36, 43, 52, 55].

4.1. Формулы численного дифференцирования на основе полиномиальной интерполяции

Предположим, что заданы значения $f_i = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, достаточно гладкой функции f в узлах x_i . Для расстояния между соседними узлами будем использовать далее обозначение h_i ,

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

или h в случае равноотстоящих узлов, $h = h_i$.

Простые формулы численного дифференцирования могут быть легко получены из формулы Тейлора.

Упражнение 4.1.1. (а) Выведите формулу численного дифференцирования с остаточным членом

$$f'_0 = \frac{f_1 - f_0}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \quad x_0 < \xi < x_1.$$

Воспользуйтесь формулой Тейлора:

$$f_1 = f_0 + hf'_0 + \frac{h^2}{2} f''(\xi).$$

(б) Для равноотстоящих узлов выведите формулы численного дифференцирования с остаточным членом

$$f'_0 = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad x_{-1} < \xi < x_1,$$

$$f''_0 = \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \quad x_{-1} < \xi < x_1,$$

Воспользуйтесь формулами Тейлора:

$$f_{\pm 1} = f_0 \pm hf'_0 + \frac{h^2}{2} f''_0 \pm \frac{h^3}{6} f'''_0 + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(\xi_{\pm}).$$

Рассмотрим следующую процедуру вывода ($n+1$ -точечных) формул численного дифференцирования порядка k на основе полиномиальной интерполяции.

1. Строим интерполяционный полином $P_n(x)$ степени n по значениям f_i , x_i , $i = 0, \dots, n$.

2. Получаем выражение для $P_n^{(k)}(x)$, $k \leq n$.

3. Получаем формулы численного дифференцирования порядка k в узлах x_i , $i = 0, \dots, n$, подставляя в выражение $P_n^{(k)}(x)$ значение узлов x_i : $f_i^{(k)} = P_n^{(k)}(x_i)$.

Замечания. а) При $k = n$ выражение $P_n^{(k)}(x)$ не зависит от x , и его обычно используют для узлов x_i , расположенных в центре. б) Для последовательного вывода формул численного дифференцирования ($n = 1, 2, \dots$) удобно использовать представление интерполяционного полинома в форме Ньютона.

Упражнение 4.1.2. Выведите формулу численного дифференцирования для $n = 2$

$$f'(x) \approx P'_2(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{h_1(h_1 + h_2)} f_0 - \frac{2x - x_0 - x_2}{h_1 h_2} f_1 + \frac{2x - x_0 - x_1}{h_2(h_1 + h_2)} f_2.$$

Рассмотрите случай равноотстоящих узлов, $h_1 = h_2 = h$, и выведите соотношения

$$f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \quad (4.1.1)$$

$$f'_i \approx \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2h},$$

$$f'_i \approx \frac{f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i}{2h}.$$

Соотношение (4.1.1) называется *формулой центральных разностей*. Формулы

$$f'_i \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \quad f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

называют, соответственно, *левой и правой разностью*.

Упражнение 4.1.3. Получите следующую формулу численного дифференцирования ($n = 2$)

$$f''(x) \approx P_2''(x) = \frac{2}{h_1(h_1 + h_2)}f_0 - \frac{2}{h_1h_2}f_1 + \frac{2}{h_2(h_1 + h_2)}f_2.$$

и формулу

$$f''_i \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} \quad (4.1.2)$$

для аппроксимации второй производной при $h_1 = h_2 = h$.

Упражнение 4.1.4. (а) Используя интерполяционную формулу Лагранжа с остаточным членом для $n = 2$ (см. теорему 2.1 и формулы (2.4.1)–(2.4.2))

$$f(x) = P_2(x) + R(x),$$

$$P_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)f_0 - 2(x - x_0)(x - x_2)f_1 + (x - x_0)(x - x_1)f_2}{2h^2},$$

$$R(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

где $x \in [x_0, x_2]$, $\xi \in [x_0, x_2]$, докажите, что

$$f'_0 = \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi),$$

$$f'_1 = \frac{1}{2h}(-f_0 + f_2) - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi),$$

$$f'_2 = \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi).$$

(б) Докажите, что

$$f''_0 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + O(h),$$

$$f''_1 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + O(h^2),$$

$$f''_2 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + O(h).$$

Упражнение 4.1.5. Выведите следующие формулы численного дифференцирования, используя интерполяционный полином степени $n = 3$ [52]:

$$f'_0 = \frac{1}{6h}(-11f_0 + 18f_1 - 9f_2 + 2f_3) - \frac{1}{4}h^3f^{(4)}(\xi),$$

$$f'_1 = \frac{1}{6h}(-2f_0 - 3f_1 + 6f_2 - f_3) + \frac{1}{12}h^3f^{(4)}(\xi),$$

$$f'_2 = \frac{1}{6h}(f_0 - 6f_1 + 3f_2 + 2f_3) - \frac{1}{12}h^3f^{(4)}(\xi),$$

$$f'_3 = \frac{1}{6h}(-2f_0 + 9f_1 - 18f_2 + 11f_3) + \frac{1}{4}h^3f^{(4)}(\xi).$$

Упражнение 4.1.6. Докажите формулы для вторых производных по четырем узлам ($n = 3$):

$$f''_0 = \frac{1}{h^2}(2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3) + O(h^2),$$

$$f''_1 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + O(h^2),$$

$$f''_2 = \frac{1}{h^2}(f_1 - 2f_2 + f_3) + O(h^2),$$

$$f''_3 = \frac{1}{h^2}(-f_0 + 4f_1 - 5f_2 + 2f_3) + O(h^2).$$

Упражнение 4.1.7. Докажите формулы численного дифференцирования для пяти узлов, $n = 4$ [52]:

$$f'_0 = \frac{1}{12h}(-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4) + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi),$$

$$f'_1 = \frac{1}{12h}(-3f_0 - 10f_1 + 18f_2 - 6f_3 + f_4) - \frac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi),$$

$$f'_2 = \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4) + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi),$$

$$f'_3 = \frac{1}{12h}(-f_0 + 6f_1 - 18f_2 + 10f_3 + 3f_4) + \frac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi),$$

$$f'_4 = \frac{1}{12h}(3f_0 - 16f_1 + 36f_2 - 48f_3 + 25f_4) + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi),$$

$$f''_0 = \frac{1}{12h^2}(35f_0 - 104f_1 + 114f_2 - 56f_3 + 11f_4) + O(h^3),$$

$$f''_1 = \frac{1}{12h^2}(11f_0 - 20f_1 + 6f_2 + 4f_3 - f_4) + O(h^3),$$

$$f''_2 = \frac{1}{12h^2}(-f_0 + 16f_1 - 30f_2 + 16f_3 - f_4) + O(h^4),$$

$$f''_3 = \frac{1}{12h^2}(-f_0 + 4f_1 + 6f_2 - 20f_3 + 11f_4) + O(h^3),$$

$$f''_4 = \frac{1}{12h^2}(11f_0 - 56f_1 + 114f_2 - 104f_3 + 35f_4) + O(h^3).$$

Упражнение 4.1.8. (а) Докажите формулы численного дифференцирования [1, 8]:

$$f''_0 = \frac{-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2}{12h^2} + \frac{h^4}{90}f^{(5)}(\xi),$$

$$f_0^{(4)} \approx \frac{f_{-2} - 4f_{-1} + 6f_0 - 4f_1 + f_2}{h^4}.$$

(б) Найдите соответствующую формулу для f_0''' .

Для поиска формул численного дифференцирования может быть использован *метод неопределённых коэффициентов*. Метод неопределённых коэффициентов — это общий математический метод нахождения некоторой искомой функции в виде линейной комбинации заранее заданных «базисных» функций с неизвестными коэффициентами. Неизвестные коэффициенты определяются из системы уравнений, которым должна удовлетворять искомая функция. Метод неопределённых коэффициентов удобно использовать для неравноотстоящих узлов [52] и в многомерном случае [7], когда сложно выписать интерполяционный многочлен.

Рассмотрим простой пример. Предположим, что требуется найти формулу численного дифференцирования

$$f'_0 = c_0f_0 + c_1f_1 + c_2f_2, \quad (4.1.3)$$

которая является точной для всех полиномов второй степени, проходящих через точки $(x_i = x_0 + ih, f_i)$, $i = 0, 1, 2$. Нетрудно найти систему линейных уравнений, которой должны удовлетворять коэффициенты c_i . Для этого достаточно, например, в качестве функций f рассмотреть $f(x) = (x - x_0)^i$, $i = 0, 1, 2$. Это даёт следующую систему линейных уравнений для «неопределённых» коэффициентов:

$$0 = c_0 + c_1 + c_2, \quad 1 = hc_1 + 2hc_2, \quad 0 = h^2c_1 + 4h^2c_2.$$

Решение этой системы уравнений даёт формулу

$$f'_0 = \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2),$$

которая выписана в упражнении 4.1.4(а).

Упражнение 4.1.9. Выполните упражнение 4.1.8(б), используя метод неопределённых коэффициентов.

Упражнение 4.1.10. Докажите следующее утверждение (см. учебное пособие [36]).

Лемма 4.1. *Предположим, что $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$. Тогда для любого целого $k > 0$ и произвольной точки $y \in [a, b]$ существует единственный набор чисел $c_0 < c_1 < \dots < c_n$, такой что для всех полиномов P_n степени n выполнено*

$$P_n^{(k)}(y) = \sum_{i=1}^n c_i P_n(x_i).$$

По поводу аппроксимации частных производных функции по ее значениям в узлах см., например, [52]. В качестве примера приведём формулу для аппроксимации смешанной производной:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x \partial y}(x, y) &\approx \frac{f(x+h_1, y+h_2) - f(x+h_1, y-h_2)}{4h_1h_2} + \\ &+ \frac{-f(x-h_1, y+h_2) + f(x-h_1, y-h_2)}{4h_1h_2}. \end{aligned}$$

Для вывода подобных формул могут быть использованы интерполяционные многочлены или разложение в ряд Тейлора функции двух переменных (см. приложение Б.1).

4.2. Погрешность численного дифференцирования

Погрешность общей формулы численного дифференцирования

$$f^{(m)}(x) \approx P_n^{(m)}(x), \quad 0 \leq m \leq n, \quad (4.2.1)$$

можно оценить, дифференцируя остаточный член интерполяции (2.4.1), (2.4.2). В учебном пособии [14], в частности, доказывается следующая

Теорема 4.1. *Предположим, что $P_n(x)$ — интерполяционный полином степени n , построенный на равномерной сетке $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$ с шагом h для функции $f \in C^{k+1}[x_0, x_n]$, $k \leq n$. Тогда для производной порядка $m \leq k$ существуют величины $A(n, k, m)$, зависящие только от значений n, k, m и независящие от h и f , такие что*

$$\max_{[x_0, x_n]} |f^{(m)}(x) - P_n^{(m)}(x)| \leq \quad (4.2.2)$$

$$h^{k+1-m} A(n, k, m) \max_{[x_0, x_n]} |f^{(k+1)}(x)|.$$

Более подробно о погрешности формул численного дифференцирования см., например, [8, 12, 27, 33]. Описание метода Рунге — Ромберга, который позволяет повысить порядок точности вычисления производных по результатам, полученным на нескольких сетках с различными шагами, можно найти в [26, 33, 52].

4.3. О выборе шага численного дифференцирования

Согласно выражениям для погрешности численного дифференцирования, чем меньше шаг между узлами, тем точнее аппроксимация производных. Однако при этом не учитывается влияние вычислительной погрешности и погрешности исходных данных на конечный результат. Для методов численного дифференцирования типичной является ситуация, когда слишком малые значения шага на практике дают менее точный результат (при этом часто говорят о некорректности [12, 26] и неустойчивости [36] численного дифференцирования). Поэтому шаг сетки для задач численного дифференцирования следует выбирать с учетом точности значений дифференцируемой функции.

Предположим, что вместо точных значений $f(x_i) = f_i$ в узлах нам известны лишь приближённые значения y_i , и уровень абсолютной погрешности δ примерно одинаковый для всех i :

$$|f_i - y_i| \leq \delta. \quad (4.3.1)$$

Рассмотрим аппроксимацию производной

$$f'(x_i) \approx (y_{i+1} - y_i)/h. \quad (4.3.2)$$

Нетрудно убедиться, что при условии (4.3.1) выполнено

$$\left| f'(x_i) - \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \right| \leq g(h),$$

где

$$g(h) = 2\delta/h + M_2 h/2, \quad M_2 = \max_{[x_i, x_{i+1}]} |f''(x)|. \quad (4.3.3)$$

Минимум функции $g(h)$ достигается при

$$h_0 = 2\sqrt{\delta/M_2} \quad (4.3.4)$$

и равен

$$g(h_0) = 2\sqrt{\delta M_2}. \quad (4.3.5)$$

Приведенные выше рассуждения говорят о том, что для «оптимального» численного дифференцирования по формуле (4.3.2) следует брать шаг порядка $\sqrt{\delta}$. При этом производная будет вычисляться также с точностью порядка $\sqrt{\delta}$.

Упражнение 4.3.1. Рассмотрите формулы численного дифференцирования

$$(a) \quad f'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h},$$

$$(b) \quad f''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

и найдите для них выражения аналогичные (4.3.3), (4.3.4) и (4.3.5) при условии (4.3.1). Какие выводы можно сделать об оптимальном шаге h на основании этих выражений?

Замечание. Различные приемы регуляризации для численного дифференцирования, а также другие подходы к вычислению производных обсуждаются в учебниках [18, 26, 27].

Глава 5

Численное интегрирование

В этой главе рассматривается несколько основных подходов к выводу квадратурных формул и построению алгоритмов численного интегрирования. Предполагается, что читатель знаком с понятиями интегралов Ньютона — Лейбница, Римана — Стильтеса, Лебега.

5.1. Основные определения

Численное интегрирование — это нахождение приближённого значения определённого интеграла численными методами. Численное интегрирование целесообразно применять в следующих ситуациях: (1) если значения подынтегральной функции заданы в виде таблиц; (2) если интеграл не выражается в известных функциях, и использование точных методов невозможно; (3) если использование численных методов даёт результат с необходимой точностью с меньшими затратами, чем использование точных методов. Для вычисления определённого интеграла $\int_a^b f(t)dt$ используют *квадратурные формулы* вида

$$\sum_{i=1}^n c_i f(t_i). \quad (5.1.1)$$

Аналогичные формулы для вычисления кратных интегралов по многомерным областям называют *кубатурными*. Величины t_i в формуле (5.1.1) называются *узлами*, а c_i — *весами* квадратурной формулы. Один из основных принципов, используемых при построении квадратурных формул, — это интерполяция подынтегральной функции полиномами и использование явных формул интегрирования для полиномов. При этом квадратурную формулу называют *простой*, если во всей обла-

сти интегрирования функция заменяется одним интерполяционным полиномом. А если область разбивается на более мелкие непересекающиеся интервалы и на каждом интервале используется простая квадратурная формула, то их сумма называется *составной* квадратурной формулой. Обычно из контекста ясно, о какой квадратурной формуле идет речь, и термины «простая» и «составная» опускают.

В качестве примера рассмотрим (простую) формулу прямоугольников:

$$\int_a^b f(\tau) d\tau \approx (b-a)f(t). \quad (5.1.2)$$

Формулу (5.1.2) называют формулой левых, правых или средних прямоугольников, если, соответственно, $t = a$, $t = b$ или $t = (b+a)/2$.

Упражнение 5.1.1. а) Обозначим $h = (b-a)$. Докажите выражения для погрешности формул левых, правых и средних прямоугольников:

$$\int_a^b f(\tau) d\tau - hf(a) = \frac{f'(\xi)}{2} h^2, \quad (5.1.3)$$

$$\int_a^b f(\tau) d\tau - hf(b) = -\frac{f'(\xi)}{2} h^2, \quad (5.1.4)$$

$$\int_a^b f(\tau) d\tau - hf((a+b)/2) = \frac{f''(\xi)}{24} h^3. \quad (5.1.5)$$

Здесь предполагается, что $f \in C^1[a, b]$ для формул левых и правых прямоугольников, а $f \in C^2[a, b]$ для средних прямоугольников. Равенства выполнены для некоторых $\xi \in [a, b]$.

б) Что можно сказать о погрешности формулы средних прямоугольников, если выполнено лишь $f \in C^1[a, b]$?

Составная формула прямоугольников для равномерной сетки с шагом $h = (b-a)/n$ имеет вид

$$I = \int_a^b f(t) dt \approx h \sum_{i=1}^n f(t_i) = I_n. \quad (5.1.6)$$

Здесь $t_i = a + (i-1)h$, $t_i = a + ih$, $t_i = a + (i-0.5)h$ для формул левых, правых и средних прямоугольников, соответственно.

Упражнение 5.1.2. Докажите выражения для погрешности составных формул левых, правых и средних прямоугольников:

$$I - I_n = \frac{f'(\xi)}{2} (b-a)h, \quad (5.1.7)$$

$$I - I_n = -\frac{f'(\xi)}{2} (b-a)h, \quad (5.1.8)$$

$$|I - I_n| \leq \frac{|f'(\xi)|}{4} (b-a)h. \quad (5.1.9)$$

$$I - I_n = \frac{f''(\xi)}{24} (b-a)h^2. \quad (5.1.10)$$

Предполагается, что $f \in C^1[a, b]$ для формул левых (5.1.7), правых (5.1.8) и средних прямоугольников (5.1.9), а для формулы средних прямоугольников (5.1.10) выполнено $f \in C^2[a, b]$. Равенства выполнены для некоторых $\xi \in [a, b]$.

Предположим, что квадратурная формула для определённого интеграла на интервале (a, b) с остаточным членом R имеет вид

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n C_i f(t_i) + R. \quad (5.1.11)$$

Тогда для функции

$$f'(t') = f(t) = f\left((t' - c)\frac{b-a}{d-c} + a\right)$$

на интервале (c, d) выполнено

$$\int_c^d f'(x) dx = \sum_{i=1}^n C'_i f'(t'_i) + R', \quad (5.1.12)$$

где

$$t'_i = (t_i - a) \frac{d-c}{b-a} + c, \quad C'_i = \frac{d-c}{b-a} C_i, \quad R' = \frac{d-c}{b-a} R.$$

Квадратурные формулы (5.1.11) и (5.1.12) называются *подобными*. При этом одна формула получается из другой с помощью линейной замены переменной интегрирования.

Упражнение 5.1.3. Докажите равенство (5.1.12).

5.2. Квадратурные формулы Ньютона — Котеса

Квадратурные формулы Ньютона — Котеса (Issac Newton, 1642–1726; Roger Cotes, 1682–1716) строятся на основе интерполяции полиномом степени m подынтегральной функции по *равномерной* сетке

$$A = x_0, \dots, B = x_m,$$

содержащей $m + 1$ узел, включая концы интервала интегрирования (в этом случае также говорят о формулах Ньютона — Котеса «замкнутого типа»):

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad i = 0, \dots, n, \quad \Delta x = (B - A)/m.$$

В формулах Ньютона — Котеса при $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9$ все веса положительны, а при $n = 8$ и $n \geq 10$ среди них имеются как положительные, так и отрицательные. При больших m формулы Ньютона — Котеса применяются редко.

Упражнение 5.2.1. а) Выведите формулы Ньютона — Котеса для интегралов

$$I(m) = \int_0^m f(x) dx$$

для $m = 1$ (формула трапеций), $m = 2$ (формула Симпсона; Thomas Simpson, 1710–1761), $m = 3$ (формула 3/8), $m = 4$ (формула Буля; George Boole, 1815–1864), $m = 5$.

б) Получите аналогичные формулы, если интерполяция проводится только по внутренним узлам, не включая x_0 и x_m (формулы Ньютона — Котеса открытого типа).

Упражнение 5.2.2. Докажите выражения для погрешности формул трапеций и Симпсона:

$$I(2) - I_2 = -\frac{f''(\xi)}{12}(B - A)^3, \quad (5.2.1)$$

$$I(3) - I_3 = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(B - A)^5 = -\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}\Delta x^5, \quad (5.2.2)$$

Здесь через I_2, I_3 обозначены аппроксимации интегралов по формуле трапеций и Симпсона соответственно:

$$I_2 = \frac{f_0 + f_1}{2},$$

$$I_3 = \frac{f_0 + 4f_1 + f_2}{3}.$$

Упражнение 5.2.3. Выпишите составные формулы трапеций и Симпсона. Получите выражения для их погрешности.

Задание 5.2.1. Напишите программу для вычисления определённого интеграла на конечном интервале с помощью составных квадратурных формул средних прямоугольников, трапеций и Симпсона. Проведите тестовые расчеты (постройте таблицы значений погрешности в зависимости от шага интегрирования). Продемонстрируйте порядки сходимости этих трёх численных методов.

5.3. Квадратурные формулы Чебышёва

Квадратурные формулы Чебышёва (Пафнутий Львович Чебышёв, 1821–1894) строятся на основе следующего принципа: все веса квадратурной формулы совпадают, а узлы располагаются так, чтобы квадратурная формула была точна для всех многочленов степени (меньше и равной) m :

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx C \sum_{i=1}^m f(t_i), \quad C = 2/m. \quad (5.3.1)$$

Упражнение 5.3.1. а) Выпишите систему уравнений, которой удовлетворяют узлы t_i квадратурной формулы Чебышёва (5.3.1). Является ли эта система уравнений линейной?

б) Найдите узлы квадратурных формул Чебышёва для $m = 1, 2, 3, 4, 5$.

Известно, что квадратурные формулы Чебышёва можно построить лишь для $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9$. Узлы квадратурных формул Чебышёва и выражения для остаточного члена можно найти, например, в [8].

5.4. Квадратурные формулы Гаусса

Квадратурные формулы Гаусса (Johann Carl Friedrich Gauss, 1777–1855)

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^m C_i f(t_i) \quad (5.4.1)$$

строятся так, чтобы формула (5.4.1) была точной для полиномов степени $2m - 1$. Квадратуры Гаусса обеспечивают нулевую погрешность для полиномов максимально возможной степени, поэтому их называют квадратурами наивысшей алгебраической точности.

Можно доказать, что узлы квадратур Гаусса являются корнями многочленов Лежандра [12]. Веса квадратур Гаусса положительны, а узлы расположены симметрично относительно нуля. Для симметричных узлов веса совпадают.

Квадратурные формулы Гаусса целесообразно применять для гладких подынтегральных функций, когда желательно минимизировать число узлов.

Для любой подынтегральной функции $f \in C[a, b]$ квадратуры Гаусса обеспечивают сходимость интеграла при $m \rightarrow +\infty$

(этим свойством не обладают квадратуры Ньютона — Котеса). О погрешности квадратур Гаусса см., например, [32, 36].

Упражнение 5.4.1. а) Выпишите систему уравнений, которой удовлетворяют узлы и веса квадратурной формулы Гаусса (5.4.1).

б) Найдите квадратуры Гаусса для $m = 1, 2, 3, 4, 5$.

5.5. Поправка Ричардсона и правило Рунге. Процесс Эйткена

Предположим, что $I(h)$ — составная квадратурная формула Ньютона — Котеса с шагом h и порядком погрешности p :

$$I \approx I(h) + Ch^p \quad (5.5.1)$$

Если известны значения $I(h)$ и $I(H)$ для $H = kh$, то из (5.5.1) можно получить

$$C \approx \frac{I(H) - I(h)}{-(H^p - h^p)},$$

$$I \approx I(h) + \frac{I(h) - I(H)}{k^p - 1} = I(h) \frac{k^p}{k^p - 1} + I(H) \frac{1}{k^p - 1}. \quad (5.5.2)$$

Формула (5.5.2) используется для уточнения $I(h)$ и называется *экстраполяцией Ричардсона* (Lewis Fry Richardson, 1881–1953).

Упражнение 5.5.1. а) Для приближённого вычисления определённого интеграла I от дважды непрерывно дифференцируемой функции используется составная квадратурная формула трапеций с шагом h , которая даёт результат $I(h)$. Уточните результат $I(0.001) = 12.395$ с помощью экстраполяции Ричардсона, если известно, что $I(0.003) = 12.315$.

б) Для приближённого вычисления определённого интеграла I от функции $f \in C^4[a, b]$ используется составная квадратурная формула Симпсона с шагом h , которая даёт результат $I(h)$. Уточните результат $I(0.01) = 7.15$ с помощью экстраполяции Ричардсона, если известно, что $I(0.02) = 7.3$.

в) Что даст экстраполяция Ричардсона для составной квадратурной формулы трапеций при $k = 2$?

Согласно (5.5.2) имеем $I - I(h) \approx \frac{I(h) - I(H)}{k^p - 1}$. Использование величины

$$\frac{I(h) - I(H)}{k^p - 1} \quad (5.5.3)$$

для оценки погрешности $I - I(h)$ называют *правилом (принципом) Рунге* апостериорной оценки погрешности. При $k = 2$ формула для погрешности примет вид

$$I - I(h) \approx \frac{I(h) - I(2h)}{2^p - 1}. \quad (5.5.4)$$

В этом случае правило Рунге рекомендуется применять лишь том случае, когда (см. [14] стр. 121)

$$\left| 2^p \frac{I(2h) - I(h)}{I(4h) - I(2h)} - 1 \right| < 0.1. \quad (5.5.5)$$

Это условие служит для проверки того, что величина C в формуле (5.5.1) отлична от нуля.

Замечание. Описанный способ уточнения результатов вычислений (и оценки погрешности) достаточно универсален. Он может быть использован не только для численного интегрирования по формулам Ньютона — Котеса, а при любых вычислениях, для которых выполнено свойство (5.5.1).

Упражнение 5.5.2. Предположим, что для приближённого вычисления величины I используется численный алгоритм, зависящий от параметра h , результаты которого мы будем обозначать через $I(h)$. Нам известно, что $I \approx I(h) + Ch^{1/2}$. С помощью численного алгоритма были получены результаты $I(h_1)$ и $I(3h_1)$. Как можно уточнить результат $I(h_1)$, используя значение $I(3h_1)$?

Если порядок сходимости p заранее не известен, то его можно оценить, используя результаты вычислений для трёх параметров $I(h)$, $I(kh)$, $I(k^2h)$. Соответствующую процедуру называют *методом (процессом) Эйткена* [27] (Alexander Aitken, 1895–1967).

Упражнение 5.5.3. Выведите формулы для оценки порядка сходимости p в формуле (5.5.1) по значениям $I(h)$, $I(kh)$, $I(k^2h)$.

Замечание. Применение правила Рунге для квадратур Гаусса требует трудоёмких вычислений. Поэтому на практике часто используют квадратуры Гаусса — Кронрода предложенные в 1960-х гг. советским математиком Александром Семёновичем Кронродом (1921–1986). Квадратуры Гаусса — Кронрода [30] являются модификацией квадратур Гаусса. Они позволяют получить апостериорные оценки погрешности численного интегрирования и реализованы в таких известных библиотеках вычислительных программ, как QUADPACK, GNU Scientific Library, NAG, SLATEC [19].

5.6. Дополнительные сведения

1. Квадратурные формулы вида

$$I = \int_a^b f(x)p(x)dx \approx \sum_{i=1}^m C_i f(t_i), \quad (5.6.1)$$

точные для полиномов степени $2m - 1$, называют квадратурами Гаусса — Кристоффеля (Elwin Bruno Christoffel, 1829–1900). Узлы этих квадратур являются корнями полиномов ортогональных с весом $p(x)$. Для частных случаев этих квадратур используют свои названия: квадратуры Эрмита или Меллера ($p(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$), Лаггера ($p(x) = x^\alpha \exp(-x)$), Эрмита ($p(x) = \exp(-x^2)$). Модификации квадратур Гаусса с несколькими фиксированными узлами носят название квадратур Маркова, Лобатто, Радо [12, 21]. Известно множество других квад-

ратурных формул: (1) формулы, в которых кроме значений подынтегральной функции в узлах используются также значения её производной (формулы Эйлера, Эйлера — Маклорена, Грегори) или значения вне интервала интегрирования (формулы Лапласа); (2) формулы, предназначенные для интегрирования осциллирующих функций (формулы Филона); (3) формулы вычисления интегралов с особенностями, кратных интегралов и т. п. (см., например, [8, 12, 21, 32, 38]). Отметим особое место метода Монте-Карло, использующего аппарат теории вероятностей, для вычисления интегралов высокой кратности [17].

2. Необходимые и достаточные условия сходимости квадратурных формул (5.1.1) на классе непрерывных функций даёт теорема Стеклова — Пойа, см. [38, 58]

3. В [52] на с. 93 утверждается, что при ограниченном числе узлов эффективным методом численного интегрирования является метод, использующий интерполяцию подынтегральной функции сплайнами. О применении сплайнов для численного интегрирования см. также [18].

Упражнение 5.6.1. Выясните, можно ли записать формулу численного интегрирования на основе сплайнов в виде (5.1.1)?

4. Квадратурные формулы называют *адаптивными*, если узлы не фиксируются заранее, а выбираются в зависимости от свойств интегрируемой функции. В этом случае говорят об алгоритмах с автоматическим выбором шага или автоматическим контролем точности. О таких алгоритмах см., например, [7, 19].

5. Широкое применение при решении прикладных задач находит анализ дробной размерности и, в частности, понятия производной и интеграла дробного порядка [47, 54]. Для нахождения производных и интегралов нецелых порядков также разрабатываются специальные численные методы [64].

Приложение А

Векторные и матричные нормы

Ниже кратко представлены основные определения и свойства векторных и матричных норм. Более подробную информацию можно найти в обширной учебной и справочной литературе по линейной алгебре и теории матриц (см., например, справочник [13] и представленный там список публикаций).

Аксиомы векторных норм (здесь a — число, x, y — векторы):

$$|x| \geq 0, \quad |0| = 0,$$

$$|ax| = |a||x|,$$

$$|x + y| \leq |x| + |y| \quad (\text{неравенство треугольника}).$$

Эквивалентность векторных норм. Две нормы $|\cdot|_1$ и $|\cdot|_2$ называются эквивалентными, если существуют константы c_1, c_2 , такие что для всех векторов x выполнено

$$c_1|x|_1 \leq |x|_2 \leq c_2|x|_1.$$

Все нормы в конечномерном пространстве эквивалентны.

Норма Гёльдера с показателем $p \geq 1$:

$$|x|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}.$$

Частные случаи:

$$|x|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (l_1 - \text{норма}),$$

$$|x|_2 = \sqrt{(x, x)} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} \quad (\text{евклидова норма}),$$

$$|x|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (\text{равномерная норма}).$$

Для вектора x размерности n выполнены неравенства

$$|x|_p \leq |x|_q \leq n^{(1/q-1/p)} |x|_p, \quad p > q,$$

$$|x|_\infty \leq |x|_2 \leq |x|_1 \leq \sqrt{n} |x|_2 \leq n |x|_\infty.$$

Неравенство Гёльдера:

$$|(x, y)| \leq |x|_p |y|_q, \quad 1/p + 1/q = 1.$$

Неравенство Коши — Буняковского — Шварца:

$$|(x, y)| \leq |x|_2 |y|_2.$$

Аксиомы аддитивных (или обобщенных) матричных норм (здесь a — число, A, B — матрицы):

$$\|A\| \geq 0, \quad \|O\| = 0,$$

$$\|aA\| = |a| \|A\|,$$

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|.$$

Матричная норма называется **мультипликативной**, если выполнена дополнительная аксиома

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\| \quad (\text{кольцевое свойство}).$$

Любую аддитивную матричную норму можно сделать мультипликативной умножением на достаточно большую константу. Наименьшая из таких констант равна

$$\max_{\|C\|=\|D\|=1} \|CD\|.$$

Матричные нормы, подчинённые векторным. Предположим, что на векторном пространстве, на котором действует линейный оператор, соответствующий матрице A , и на образе этого пространства определены векторные нормы. Числовая функция

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{|Ax|}{|x|} = \sup_{|x|=1} |Ax|$$

является (аддитивной) матричной нормой, и она называется подчинённой векторным нормам (или **индуцированной** векторными нормами).

Для квадратных матриц, матричная норма, индуцированная векторными нормами, будет мультипликативной, если векторные нормы на векторных пространствах (образов и прообразов) совпадают. При этом для единичной матрицы I выполнено $\|I\| = 1$. Для произвольной мультипликативной матричной нормы выполнено $\|I\| \geq 1$.

Примеры подчинённых матричных норм. Матричные нормы

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|,$$

$$\|A\|_2 = \text{максимальное сингулярное число матрицы } A,$$

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$$

подчинены, соответственно 1-, 2- и ∞ -нормам векторов. Матричная норма $\|A\|_2$ называется **спектральной**. Таким образом, спектральная матричная норма индуцирована евклидовой нормой векторов.

Собственные числа (значения) λ и векторы x квадратной матрицы A определяются соотношением

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0.$$

Множество всех собственных чисел $\lambda_i(A)$ матрицы называют **спектром** матрицы. Спектр матрицы A — это множество всех корней **характеристического многочлена**

$$\det(\lambda I - A) = 0.$$

Спектральный радиус $\rho(A)$ квадратной матрицы A — это максимальный из модулей её собственных чисел:

$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i(A)|.$$

Для любой мультипликативной матричной нормы выполнено

$$\|A^k\|^{1/k} \searrow \rho(A) \text{ при } k = 1, 2, \dots$$

Если матрица самосопряжённая ($A = A^*$), то

$$\rho(A) = \|A\|_2.$$

Условие $\rho(A) < 1$ обеспечивает сходимость **ряда Неймана**:

$$(I - A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k.$$

Сингулярные числа $\sigma_i(A)$ (необязательно квадратной) матрицы A — это неотрицательные значения квадратных корней общих собственных значений матриц A^*A и AA^* . Отметим, что ненулевые собственные значения матриц A^*A и AA^* совпадают,

$$\sigma_i(A) = \sqrt{\lambda_i(A^*A)} = \sqrt{\lambda_i(AA^*)}.$$

Здесь через A^* обозначена матрица **сопряжённая** к A : $A_{ij}^* = \overline{A_{ji}}$. В этих обозначениях

$$\|A\|_2 = \max_i \sigma_i(A) = \sqrt{\max_i |\lambda_i(A^*A)|}.$$

Евклидова норма (или норма Фробениуса) $\|A\|_E$ матрицы A определяется выражениями

$$\|A\|_E = \sqrt{\sum_i \sum_j |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{tr}(A^*A)} = \sqrt{\text{tr}(AA^*)} = \sqrt{\sum_i \sigma_i^2(A)}.$$

Здесь $\sigma_i^2(A)$ — сингулярные числа матрицы A , а tr обозначает **след** матрицы, $\text{tr}(B) = \sum_i b_{ii}$. Евклидова матричная норма **согласована** с евклидовой векторной нормой:

$$|Ax|_2 \leq \|A\|_E |x|_2.$$

Евклидова матричная норма является мультипликативной и, кроме того,

$$\|AB\|_E \leq \|A\|_E \|B\|_2, \quad \|AB\|_E \leq \|A\|_2 \|B\|_E.$$

Приведём неравенства для матричных норм (**соотношения эквивалентности**) :

$$(\min(m, n))^{-1/2} \|A\|_E \leq \|A\|_2 \leq \|A\|_E,$$

$$m^{-1/2} \|A\|_E \leq \|A\|_1 \leq n^{1/2} \|A\|_E,$$

$$n^{-1/2} \|A\|_E \leq \|A\|_\infty \leq m^{1/2} \|A\|_E,$$

$$m^{-1/2} \|A\|_2 \leq \|A\|_1 \leq n^{1/2} \|A\|_2,$$

$$n^{-1/2} \|A\|_2 \leq \|A\|_\infty \leq m^{1/2} \|A\|_2,$$

$$m^{-1} \|A\|_\infty \leq \|A\|_1 \leq n \|A\|_\infty.$$

Здесь предполагается, что матрица A имеет размерность $n \times m$.

Число обусловленности $\text{cond}(A)$ определяется для квадратной невырожденной матрицы A по формуле

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|.$$

Выполнены свойства:

$$\text{cond}(A) \geq 1, \quad \text{cond}(A) = \text{cond}(cA).$$

Для матричных норм $\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2, \|\cdot\|_\infty, \|\cdot\|_E$ число обусловленности не меняется при перестановке строк или столбцов. Для спектральной матричной нормы $\|\cdot\|_2$ число обусловленности равно отношению максимального сингулярного числа матрицы к минимальному:

$$\text{cond}_2(A) = \frac{\max_i \sigma_i(A)}{\min_i \sigma_i(A)}.$$

Для **нормальной** матрицы A (то есть когда $A^*A = AA^*$) выполнено

$$\sigma_i(A) = |\lambda_i(A)|,$$

и число обусловленности равно отношению максимального модуля собственного числа матрицы к минимальному:

$$\text{cond}_2(A) = \frac{\max_i |\lambda_i(A)|}{\min_i |\lambda_i(A)|}.$$

Сингулярные числа симметричной положительно определенной матрицы совпадают с её собственными значениями.

Приложение Б

Сведения из математического анализа

В данном приложении кратко приводятся сведения из математического анализа, которые используются при изложении основного материала.

Б.1. Формула Тейлора

Если $f \in C^{n+1}(a, b)$, $x_0, x \in (a, b)$, то найдётся ξ ,

$$\min(x, x_0) < \xi < \max(x, x_0),$$

для которого выполнено

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f^{(1)}(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f^{(2)}(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots \quad (\text{Б.1.1})$$

$$\dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}.$$

Разложение в ряд Тейлора функции двух переменных записывается следующим образом:

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

$$\frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Delta x^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Delta x \Delta y + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \Delta y^2 \right) +$$

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Delta x^3 + 3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y} \Delta x^2 \Delta y + 3 \frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y^2} \Delta x \Delta y^2 + \frac{\partial^3 f}{\partial y^3} \Delta y^3 \right) + \dots$$

Б.2. Теорема Ролля

Пусть функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, дифференцируема во всех внутренних точках $x \in (a, b)$ и $f(a) = f(b)$. Тогда существует точка $c \in [a, b]$, такая что $f'(c) = 0$.

Этот результат был известен еще в XII веке в древней Индии [66]. Строго эту теорему доказал французский математик Мишель Ролль (Michele Rolle, 1652–1719).

Б.3. Теорема Больцано — Коши. Теоремы о среднем значении

Теорема Больцано — Коши (о промежуточных значениях непрерывной функции): пусть $f \in C[a, b]$ и $f(a) \neq f(b)$, тогда для любого $y \in [\min(f(a), f(b)), \max(f(a), f(b))]$ существует $x \in [a, b]$, такое что $f(x) = y$ (т.е., если непрерывная функция, определённая на вещественном интервале, принимает два значения, то она принимает и любое значение между ними).

Теорема о среднем значении непрерывной функции. Пусть $f \in C[a, b]$, $\xi_i \in [a, b]$. Тогда найдётся точка $\xi \in [a, b]$, такая что

$$\frac{f(\xi_1) + \dots + f(\xi_n)}{n} = f(\xi).$$

Эта теорема является следствием теоремы Больцано — Коши и неравенств

$$\min_{x \in [a, b]} f(x) \leq \frac{f(\xi_1) + \dots + f(\xi_n)}{n} \leq \max_{x \in [a, b]} f(x).$$

Теорема об интегральном среднем. Если $f, g \in C[a, b]$, а функция g одного и того же знака на $[a, b]$, то найдётся значение $\xi \in [a, b]$, такое что

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

Доказательство см., например, в [14] на с. 104.

Б.4. Сравнение функций в окрестности точки

Предположим, что функции f и g заданы в окрестности точки x_0 . Запись

$$f(x) = o(g(x))$$

при $x \rightarrow x_0$ (читается: o малое от $g(x)$) означает, что

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = 0.$$

При этом говорят, что функция $f(x)$ имеет *более высокий порядок малости* по сравнению с $g(x)$ (в окрестности точки x_0). Запись

$$f(x) = O(g(x))$$

(читается: O большое от $g(x)$) означает, что найдутся $C > 0$ и некоторая окрестность точки x_0 , в которой

$$|f(x)| \leq C|g(x)|.$$

При этом говорят, что у функции f *порядок малости такой же или выше*, чем у функции g (в окрестности точки x_0). В частности, запись $f(h) = O(h^k)$ означает, что $|f(h)| \leq h^k$ в окрестности нуля.

Приложение В

Ответы и указания к упражнениям и заданиям

Упражнение 1.2.1. б) Выражение для относительной погрешности величины

$$y = \sqrt{\frac{a+b}{x^3(1-x)}}$$

имеет вид

$$\delta y = \frac{1}{2}[\delta(a+b) + 3\delta x + \delta(1-x)] = \frac{1}{2}\left[\frac{\Delta a + \Delta b}{|a+b|} + 3\frac{\Delta x}{|x|} + \frac{\Delta x}{|1-x|}\right].$$

Упражнение 1.2.2. Для абсолютной погрешности величин $s = a_1 + \dots + a_{12}$ и $b = s/12$ классический подход даёт: $\Delta s = 12\Delta a$, $\Delta b = \Delta a$. Статистический подход (правило Чеботарева) даёт: $\Delta s = 6\Delta a$, $\Delta b = 0.5\Delta a$.

Упражнение 1.3.1. $2017 = 11111100001_{(2)}$.

Задание 1.3.1. б) Для вещественной переменной одинарной точности $x = 16777216$, для двойной точности — $x = 9007199254740992$.

Упражнение 1.4.1. Если $I_0^* = I_0 + \varepsilon$, то $I_1^* = I_1 - \varepsilon$, $I_2^* = I_2 + 2\varepsilon$, $I_3^* = I_3 - 6\varepsilon$, ..., $I_n^* = I_n + (-1)^n n! \varepsilon$.

Упражнение 2.2.1. б) Выражение слева в равенстве представляет собой интерполяционный полином степени (меньше или равной) n в форме Лагранжа для функции f , такой что $f(x_k) = 1$, $k = 0, \dots, n$. Этот полином существует, единственный и, очевидно, совпадает с функцией, тождественно равной единице.

в) Равенство для $m = n+1$ неверное (функция в левой части равенства является интерполирующим полиномом более низкой степени, чем интерполируемый полином справа; эта функция зависит от выбора узлов).

Упражнение 2.3.1. $2x^2 + x + 2$.

Упражнение 2.4.1. а) Соответствующий пример можно найти в [14] на с. 35. Используйте равенства

$$f'(x) = 0.5x^{-1/2}, \quad f''(x) = -0.25x^{-3/2}, \quad f'''(x) = 3x^{-5/2}/8,$$

$$\max_{[100,144]} |f'''(x)| = \frac{3}{8}10^{-5}.$$

б) Максимум модуля функции $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)$ достигается при $x = (x_0+x_1)/2$, и равен он $h^2/4$.

Упражнение 2.5.1. Интерполяционные полиномы Эрмита имеют вид

$$1) \quad P_2(x) = f_0 + (x-x_0)f'_0 + (x-x_0)^2 \left[\frac{f_1-f_0}{(x_1-x_0)^2} - \frac{f'_0}{x_1-x_0} \right]$$

$$3) \quad P_3(x) = f_0 + (x-x_0) \left\{ f'_0 + \frac{x-x_0}{x_0-x_1} \left[\left(f_0 - \frac{f_1-f_0}{x_1-x_0} \right) + \frac{x_1-x}{x_1-x_0} \left(f'_0 - 2\frac{f_1-f_0}{x_1-x_0} + f'_1 \right) \right] \right\}.$$

Упражнение 2.7.1. Систему линейных уравнений для коэффициентов рациональной интерполяции можно записать в следующем виде

$$\sum_{j=0}^p a_j x_i^j - f_i \sum_{j=0}^q b_j x_i^j = 0, \quad i = 1, \dots, p+q+1.$$

Без ограничения общности можно положить $b_q = 1$. Тогда линейная система примет вид

$$\sum_{j=0}^p a_j x_i^j - f_i \sum_{j=0}^{q-1} b_j x_i^j = x_i^q, \quad i = 1, \dots, p+q+1.$$

Упражнение 3.2.2. Условия интерполяции и гладкости дают систему $2n + (n-1)$ линейных уравнений для $3n$ неизвестных.

Задание 3.3.1. Для вычисления коэффициентов a_i, b_i, c_i, d_i естественного интерполирующего кубического сплайна

$$S(x) = S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

на участках

$$x \in [x_i, x_{i+1}], \quad x_{i+1} = x_i + h, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1$$

со значениями $S(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \dots, n$, воспользуйтесь следующим алгоритмом [45]. Сначала вычисляются значения

$$a_i = f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Затем находятся c_i из уравнений

$$c_{i-1} + 4c_i + c_{i+1} = 3(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})/h^2, \quad (\text{B.0.1})$$

$$i = 1, \dots, n - 1, \quad c_0 = c_n = 0. \quad (\text{B.0.2})$$

Заметим, что в формулах выше используется дополнительный коэффициент $c_n = 0$. Для решения системы линейных уравнений (B.0.1), (B.0.2) с трёхдиагональной матрицей применяют метод прогонки. Остальные коэффициенты сплайна вычисляются по формулам

$$b_i = (f_{i+1} - f_i)/h - h(c_{i+1} + 2c_i)/3, \quad i = 0, 1, \dots, n - 1,$$

$$d_i = (c_{i+1} - c_i)/(3h), \quad i = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Упражнение 4.3.1. Ниже представлены значения «оптимального» шага h_0 , минимизирующего погрешность $g(h)$ для двух формул численного дифференцирования:

$$(a) \quad g(h) = \delta/h + Mh^2/6,$$

$$h_0 = \sqrt[3]{3\delta/M}, \quad g(h_0) = (3\delta)^{2/3}M^3/2,$$

$$M = \max_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} |f'''(x)|.$$

$$(b) \quad g(h) = 4\delta/h^2 + Mh^2/12,$$

$$h_0 = 2\sqrt[4]{3\delta/M}, \quad g(h_0) = 2\sqrt{M\delta/3},$$

$$M = \max_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} |f^{(4)}(x)|.$$

Упражнение 5.1.1. а) Для изучения погрешности формулы прямоугольников воспользуйтесь формулой Тейлора и теоремами о средних (см. приложение В).

б) Погрешность формулы средних прямоугольников для функции $f \in C^1[a, b]$ оценивается неравенством

$$\left| \int_a^b f(\tau) d\tau - hf\left(\frac{a+b}{2}\right) \right| \leq \frac{|f'(\xi)|}{4} h^2.$$

Упражнение 5.1.2. Для исследования погрешности составной формулы прямоугольников воспользуйтесь выражениями из упражнения 5.1.1 и теоремой о средних значениях (см. приложение В).

Упражнение 5.2.1. а) Формулы Ньютона — Котеса можно записать в виде

$$\int_A^B f(x) dx = C\Delta x \sum_{i=0}^m d_i f(x_i) + R(\Delta x),$$

$$x_i = A + i\Delta x, \quad i = 0, \dots, n, \quad \Delta x = (B - A)/m,$$

с коэффициентами и остаточными членами, представленными в таблице В.1

Таблица В.1

Квадратуры Ньютона — Котеса

m	C	d_0	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	$R(\Delta x)$
1	$\frac{1}{2}$	1	1					$-\frac{1}{12}f^{(2)}(\xi)\Delta x^3$
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1				$-\frac{1}{90}f^{(4)}(\xi)\Delta x^5$
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1			$-\frac{3}{80}f^{(4)}(\xi)\Delta x^5$
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7		$-\frac{8}{945}f^{(6)}(\xi)\Delta x^7$
5	$\frac{5}{288}$	19	75	50	50	75	19	$-\frac{275}{12096}f^{(6)}(\xi)\Delta x^7$

Упражнение 5.2.2. Для метода трапеций воспользуйтесь формулой погрешности линейной интерполяции

$$\begin{aligned} f(x) - \left[f(x_0) \left(1 - \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \right) + f(x_1) \frac{x-x_0}{x_1-x_0} \right] = \\ = \frac{f^{(2)}(\xi(x))}{2} x(x - (x_1 - x_0)) \end{aligned}$$

и теоремой об интегральном среднем (см. приложение Б.3). О погрешности формулы Симпсона см., например, [8] с. 252, [14] с. 107, [16] с. 583.

Упражнение 5.2.3. Составная формула трапеций с остаточным членом:

$$\int_A^B f(x) dx = h \left(f_0/2 + f_1 + f_2 + \dots + f_{n-1} + f_n/2 \right) - h^2 \frac{B-A}{12} f''(\xi).$$

Здесь $f_i = f(x_i)$, $x_i = A + ih$, $i = 0, \dots, n$, $h = (B - A)/n$, $\xi \in [A, B]$.

Рассмотрим составную формулу Симпсона, «составленную» из m простых формул:

$$\int_A^B f(x) dx = \sum_{k=1}^m \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x) dx,$$

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x) dx = \frac{h}{3} (f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}) - h^5 \frac{f^{(4)}(\xi_k)}{90},$$

где $h = (B - A)/n$, $n = 2m$, $\xi_k \in [x_{2k-2}, x_{2k}]$. Тогда составную формулу Симпсона можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \int_A^B f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f_0 + f_{2m} + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{2m-2}) + \right. \\ \left. + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{2m-1}) \right] + R, \end{aligned}$$

$$R = -h^5 \frac{m}{90} f^{(4)}(\xi) = -h^4 \frac{(B-A)}{180} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [A, B].$$

Упражнение 5.3.1. а) Система уравнений, которой удовлетворяют узлы t_i квадратурной формулы Чебышёва (5.3.1):

$$t_1 + t_2 + \dots + t_m = 0$$

$$t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_m^2 = m/3$$

$$t_1^3 + t_2^3 + \dots + t_m^3 = 0$$

$$t_1^4 + t_2^4 + \dots + t_m^4 = m/5$$

...

$$t_1^m + t_2^m + \dots + t_m^m = \frac{1 + (-1)^m}{2} \frac{m}{m+1}$$

б) Узлы квадратур Чебышёва (5.3.1):

$$m = 2, \quad -t_1 = t_2 = 0.577350,$$

$$m = 3, \quad -t_1 = t_3 = 0.707107, \quad t_2 = 0,$$

$$m = 4, \quad -t_1 = t_4 = 0.794654, \quad -t_2 = t_3 = 0.187592,$$

$$m = 5, \quad -t_1 = t_5 = 0.832498, \quad -t_2 = t_4 = 0.374541, \quad -t_3 = 0.$$

Упражнение 5.4.1. а) Система уравнений, которой удовлетворяют узлы и веса квадратурной формулы Гаусса (5.4.1):

$$\sum_{i=1}^m C_i = 0, \quad \sum_{i=1}^m C_i t_i = 0,$$

$$\sum_{i=1}^m C_i t_i^2 = 2/3, \quad \sum_{i=1}^m C_i t_i^3 = 0,$$

$$\sum_{i=1}^m C_i t_i^4 = 2/5, \quad \sum_{i=1}^m C_i t_i^5 = 0,$$

...

$$\sum_{i=1}^m C_i t_i^{2m-2} = 2/(2m-1), \quad \sum_{i=1}^m C_i t_i^{2m-1} = 0.$$

б) Узлы и веса квадратур Гаусса (5.4.1):

$$m = 2, \quad -t_1 = t_2 = 0.577350, \quad C_1 = C_2 = 1.0;$$

$$m = 3, -t_1 = t_3 = 0.774597, t_2 = 0,$$

$$C_1 = C_3 = 5/9, C_2 = 8/9;$$

$$m = 4, -t_1 = t_4 = 0.861136, -t_2 = t_3 = 0.339981,$$

$$C_1 = C_4 = 0.347855, C_2 = C_3 = 0.652145;$$

$$m = 5, -t_1 = t_5 = 0.906180, -t_2 = t_4 = 0.538469, -t_3 = 0.$$

$$C_1 = C_5 = 0.236927, C_2 = C_4 = 0.478629, C_3 = 0.568889.$$

Упражнение 5.5.1. а) Экстраполяция Ричардсона даёт значение 12.405 ($p = 2$). б) Экстраполяция Ричардсона даёт значение 7.14 ($p = 4$). в) Экстраполяции Ричардсона приведёт к методу Симпсона.

Упражнение 5.5.3. Формулы для оценки порядка сходимости p имеют вид

$$\frac{I(k^2h) - I(kh)}{I(kh) - I(h)} = k^p, \quad p = \ln \left[\frac{I(k^2h) - I(kh)}{I(kh) - I(h)} \right] / \ln k.$$

Литература

1. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
2. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и её приложения. М.: Мир, 1972.
3. Амосов А. А., Дубинский Ю. А., Копченкова Н. В. Вычислительные методы для инженеров. Москва: Высшая школа, 1994.
4. Алферов В. В., Владимиров В. С., Новиков Б. К., Строгалев В. П. Струйная автоматика в системах управления. – М.: Машиностроение, 1975.
5. Бабенко К. И. Основы численного анализа. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002.
6. Бабушка И., Витасек Э., Прагер М. Численные процессы решения дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1969.
7. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. Н. Численные методы. М.: Бином. Лаб. знаний, 2003.
8. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Том 1. М.: ГИФМЛ, 1962. - 464 с.
9. Де Бор К. Практическое руководство по сплайнам. М.: Радио и связь, 1972.
10. Бугров А. Н., Воеводин А. Ф., Гладышев М. Т., Коробицина Ж. Л., Михайлов А. П., Шапеев В. П. Пособие по практикуму на ЭВМ. Новосибирск: НГУ, 1980.
11. Василенко В. А. Сплайн-функции: теория, алгоритмы и программы. Новосибирск: Наука, 1983.
12. Вержбицкий В. М. Основы численных методов. М.: Высшая школа, 2002.
13. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
14. Волков Е. А. Численные методы. СПб.: Лань, 2004.
15. Голованов Н. Н. Геометрическое моделирование. М.: Изд-во физико-математической литературы, 2002.

16. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. М.: Физматгиз, 1963.
17. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
18. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
19. Зарубежные библиотеки и пакеты программ по вычислительной математике / Под ред. О. Б. Арушаняна. М.: Наука, 1967.
20. Игнатенко М. В. Методы вычислений. Интерполирование и интегрирование : курс лекций. Минск: БГУ, 2006.
21. Ильин В. П. Численный анализ. Ч. 1. Новосибирск: Изд-во ИВ-МиМГ СО РАН, 2004.
22. Ильин В. А., Позняк Э. Г. Линейная алгебра. М.: Наука, 1999.
23. Ильина В. А., Силаев П. К. Численные методы для физиков-теоретиков. М., Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.
24. Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное изд-во, 2009.
25. Казакова И. А. История вычислительной техники. Пенза: Изд-во ПГУ, 2011.
26. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
27. Калиткин Н. Н., Альшина Е. А. Численные методы. Кн. 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
28. Квасов Б. И. Методы изогометрической аппроксимации сплайнами. М.: Физматлит, 2006.
29. Корнейчук Н. П. Сплайны в теории приближений. М.: Наука, 1984.
30. Кронрод А. С. Узлы и веса квадратурных формул. Шестнадцатизначные таблицы. М.: Наука, 1964.
31. Крылов А. Н. Лекции о приближенных вычислениях. Л.: Изд-во АН СССР, 1935.
32. Крылов В. И. Приближенное вычисление интегралов. М.: Наука, 1967.

33. Крылов В. И., Бобков В. В., Монастырский П. И. Вычислительные методы высшей математики. Т. 1. Минск: Вышэйшая школа, 1972.
34. Курош А. Г. Курс высшей алгебры. М.: Наука, 1968.
35. Малоземов В. Н., Певный А. Б. Полиномиальные сплайны. Л.: Изд-во Ленингр. университета, 1986.
36. Мацокин А. М., Сорокин С. Б. Численные методы. Ч 1. Численный анализ. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2006.
37. Милн В. Э. Численный анализ. М.: Изд-во иностранной литературы, 1951.
38. Мысовских И. П. Интерполяционные кубатурные формулы. М.: Наука, 1981.
39. Мысовских И. П. Лекции по методам вычислений. Санкт-Петербург: Изд-во СПбГУ, 1998.
40. Натансон И. П. Конструктивная теория функций. М: Гостехиздат, 1949.
41. Ортега Дж., Пул У. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1986.
42. Петров И. Б., Лобанов А. И. Лекции по вычислительной математике. М.: Бином, 2006.
43. Пирумов У. Г. Численные методы. М.: Изд-во МАИ, 1998.
44. Роженко А. И. Абстрактная теория сплайнов. Новосибирск: Изд. центр НГУ, 1999.
45. Самарский А. А. Введение в численные методы. М.: Наука, 1987.
46. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
47. Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987.
48. Соловьева О. В. Водяные вычислительные машины // Наука и Жизнь. 2000. № 4. С.90–93.
49. Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. М.: Наука, 1976.

50. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
51. Турецкий А. Х. Теория интерполирования в задачах. Минск: Высшая школа, 1968.
52. Турчак Л. И., Плотников П. В. Основы численных методов. М.: Физматлит, 2003.
53. Тыртышников Е. Е. Методы численного анализа. М.: Академия, 2007.
54. Учайкин В. В. Метод дробных производных. Ульяновск: Артишок, 2008.
55. Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. М.: Высшая школа, 2006.
56. Чеботарёв А. С. Способ наименьших квадратов с основами теории вероятностей. М.: Изд-во МВТУ, 1928.
57. Численные методы (Михеев С. Е.,) [Электронный ресурс]. URL: <http://www.apmath.spbu.ru/ru/staff/mikheev/files/numet10.pdf> (дата обращения 24 марта 2018)
58. Шарый С. П. Курс вычислительных методов. Новосибирск: Инст. вычислительных технологий СО РАН, 2018 [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ict.nsc.ru/matmod/files/textbooks/SharyNuMeth.pdf> (дата обращения 13 мая 2018)
59. Arnold D. N. Some disasters attributable to bad numerical computing, 1998 [Электронный ресурс]. URL: <http://www-users.math.umn.edu/arnold/disasters/> (дата обращения 28 июля 2018)
60. Carothers N. L. A Short Course on Approximation Theory. Bowling Green State University, 2009.
61. Hall C., Meyer W. Optimal error bounds for cubic spline interpolation // J. Approx. Theory, Vol. 11 (1976), P. 105–122.
62. Higham N. Accuracy and Stability of Numerical Algorithms (2 ed). SIAM, 2002.
63. Holladay J. C. Smoothest curve approximation // Mathematical Tables and Other Aids to Computation, Vol. 11 (1957), No. 60, P. 233–243.

64. Li C., Zeng F. Numerical methods for fractional calculus. CRC Press, 2015.
65. Neumaier A. Rundungsfehleranalyse einiger Verfahren zur Summation endlicher Summen // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (in German), Vol. 54 (1974), No. 1, S. 39–51.
66. Rolle's theorem (Wikipedia) [Электронный ресурс]. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Rolle> (дата обращения 9 мая 2018)
67. Tyrtyshnikov E. E. How bad are Hankel matrices? // Numer. Math., 1994. Vol. 67, P. 261–269.

Предметный указатель

- В-сплайн [B-spline], 44
- О большое [big O, O notation], 75
о малое [small o], 75
- абсолютная погрешность [absolute error], 7
- алгоритм суммирования Кэхэна [Kahan summation algorithm], 12
- базисные полиномы Лагранжа [Lagrange basis polynomials], 22
- вычислительная неустойчивость [numerical instability], 14
- вычислительная устойчивость [numerical stability], 14
- дефект сплайна [defect of spline], 37
- естественный сплайн [natural spline], 41
- значащие цифры [significant figures], 11
- интерполяционный полином [interpolation polynomial], 19
- интерполяционный полином Лагранжа [Lagrange interpolation polynomial], 22
- интерполяционный полином Ньютона [Newton polynomial], 24
- интерполяция [interpolation], 19
- интерполяция Эрмита [Hermite interpolation], 28
- интерполяция обобщёнными многочленами [generalized polynomial interpolation], 32
- кардинальный синус [sinc function, cardinal sine function], 29
- квадратичный сплайн [quadratic spline], 37
- квадратурная формула [quadrature], 57
- квадратурные формулы Гаусса — Кронрода [Gauss-Kronrod quadrature formulae], 65
- Гаусса [Gaussian quadrature rule], 62
- Ньютона — Котеса [Newton-Cotes rules], 60
- Чебышёва [Chebyshev's quadrature rule], 62
- конечные разности [finite differences], 25
- корректная задача [well-posed problem], 14
- корректность [well-posedness], 14
- кубатурная формула [cubature], 57
- кубический сплайн [cubic spline], 37

- матрица Вандермонда [Vandermonde matrix], 20
- матрица Грама [Gram matrix], 33
- метод неопределённых коэффициентов [method of uncertain coefficients], 53
- некорректная задача [ill-posed problem], 14
- неравенство Гёльдера [Hoelder inequality], 68
- Коши — Буняковского — Шварца [Cauchy-Buniakovsky-Schwarz inequality], 68
- треугольника [triangle inequality], 67
- неустойчивый алгоритм [unstable algorithm], 14
- норма l_1 [l_1 (Manhattan) norm], 68
- Гёльдера [p-norm], 67
- евклидова [Euclidean norm], 68
- равномерная [maximum (infinity, uniform) norm], 68
- норма матрицы евклидова [Frobenius norm], 71
- индуцированная векторной нормой [matrix norm induced by vector norm], 69
- подчинённая векторной норме [matrix norm induced by vector norm], 21, 69
- спектральная [spectral matrix norm], 21, 69
- нормальная матрица [normal matrix], 72
- носитель функции [support of function], 45
- определитель Вандермонда [Vandermonde determinant], 20
- определитель Грама [Gram determinant], 33
- относительная погрешность [relative error], 7
- параболический сплайн [parabolic spline], 37
- плохая обусловленность [ill-conditioning], 14
- плохо обусловленная задача [ill-conditioned problem], 14
- погрешность [error], 6
- подобные квадратурные формулы [change of interval for quadrature], 60
- позиционная система счисления [positional numeral system], 10
- полиномиальная интерполяция [polynomial interpolation], 19
- правило Рунге [Runge's rule], 64
- пример Бернштейна [Bernstein example], 31
- простая квадратурная формула [simple quadrature rule], 58
- процесс Эйткена [Aitken's process], 65
- разделённые разности [divided differences], 23
- ряд Неймана [Neumann series], 70
- сингулярные числа [singular values, s-numbers], 21
- система счисления [numeral system], 10
- собственные числа и векторы [eigenvalues and eigenvectors], 69
- составная квадратурная формула [composite or compound quadrature rule], 58

- спектр [spectrum], 69
 спектральный радиус [spectral radius], 69
 сплайн [spline], 36, 37
 степень сплайна [spline degree], 37
- теорема
 (о полиномиальной аппроксимации)
 Вейерштрасса [Weierstrass approximation theorem], 28
 Больцано — Коши [Bolzano's theorem, intermediate value theorem], 74
 Марцинкевича [Marcinkiewicz theorem], 30
 Ролля [Rolle's theorem], 74
 Стеклова — Поля [Polya-Steklov theorem], 66
 Фабера [G. Faber's theorem], 30
 о промежуточном значении [intermediate value theorem], 74
 теоремы о среднем [mean value theorems], 74
- тригонометрический
 интерполяционный полином [trigonometric interpolation polynomial], 29
- узел интерполяции [interpolation node], 19
 узлы сплайна [spline knots], 37
- феномен Рунге [Runge's phenomenon], 31
- формула
 3/8 [Simpsons's 3/8 rule], 60
 Буля [Boole's rule], 60
 Симпсона [Simpsons's rule], 60
 Тейлора [Taylor formula], 25, 73
 прямоугольников [rectangle rule], 58
 трапеций [trapezoid rule], 60
 центральных разностей [symmetric difference quotient], 50
- формулы Ньютона — Котеса открытого и замкнутого типа [open and closed Newton-Cotes formulae], 61
- характеристический многочлен [characteristic polynomial], 69
- хорошая обусловленность [well-conditioning], 14
 хорошо обусловленная задача [well-conditioned problem], 14
- численное дифференцирование [numerical differentiation], 48
- число обусловленности [condition number], 21, 71
- экстраполяция Ричардсона [Richardson's extrapolation], 63

Пригарин Сергей Михайлович

Численный анализ
 (интерполяция, численное дифференцирование и интегрирование)

Учебное пособие

Редактор *Скворцова А. А.*
 Обложка *Неклюдовой Е. В.*

Подписано в печать 09.08.2018 г.
 Формат 60 × 84¹/₁₆. Гарнитура Computer Modern.
 Уч.-изд. л. 5,6. Усл. печ. л. 5,2. Тираж 40 экз. Заказ № 196

Издательско-полиграфический центр НГУ
 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2