

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ.

§1. Приближённое решение уравнений.

Рассмотрим задачу нахождения нулей функции $f(x)$, т.е. корней уравнения $f(x)=0$. Предположим, что интересующий нас корень ξ изолирован, т.е., что найден содержащий его промежуток $[a, b]$, в котором других корней нет.

Если на концах отрезка $[a, b]$ функция $f(x)$ имеет значения $f(a)$ и $f(b)$ разных знаков, то по 1 теореме Больцано - Коши, деля на части $[a_k, b_k]$, содержащее корень, и определяя знак функции f в точках деления, можно произвольно сужать этот промежуток и таким образом осуществлять приближённое вычисление корня. Такой метод называется *методом половинного деления*. Однако этот приём, не смотря на его принципиальную простоту, на практике часто оказывается непригодным, так как требует слишком большого количества вычислений.

Рассмотрим основные приёмы приближённого вычисления изолированного корня уравнения $f(x)=0$. При этом будем использовать основные понятия и методы дифференцированного исчисления.

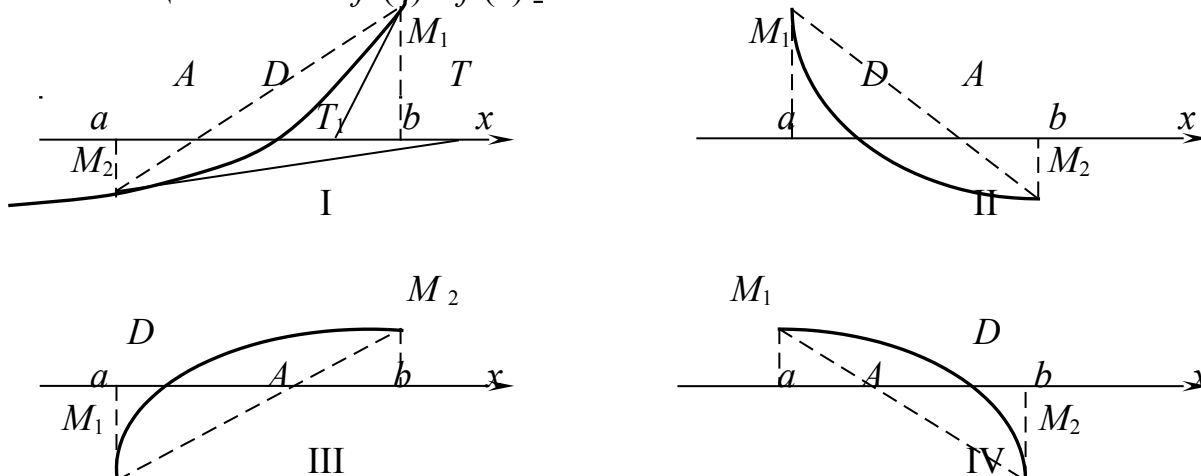
Теорема. Пусть выполнены следующие условия:

- (1) функция f в промежутке $[a, b]$ непрерывна вместе со своими производными $f'(x)$ и $f''(x)$;
- (2) значения $f(a)$ и $f(b)$ функции на концах промежутка имеют разные знаки $f(a)f(b)<0$;
- (3) обе производные $f'(x)$ и $f''(x)$ сохраняют каждая определённый знак на всём промежутке $[a, b]$.

Тогда уравнение $f(x)=0$ на этом промежутке имеет единственный корень.

Следствия: Из непрерывности функции f и условия (2) следует, что между a и b содержится корень ξ уравнения $f(x)=0$. Так как производная $f'(x)$ сохраняет знак, то f в промежутке $[a, b]$ возрастает или убывает и, следовательно, обращается в 0 лишь однажды, корень ξ изолирован.

Условие (3) геометрически означает, что кривая $y=f(x)$ не только идёт в одном направлении, но к тому же строго выпукла или вогнута, смотря по знаку $f''(x)$. На чертеже изобразим 4 возможных случая, соответствующих различным комбинациям знаков $f'(x)$ и $f''(x)$.



§2. Метод хорд.

Если промежуток $[a, b]$ достаточно мал, то с приближением можно считать, что при изменении x в его пределах - приращение функции $f(x)$ пропорционально приращению аргумента. Обозначая через ξ корень функции, имеем, в частности, $\frac{f(\xi) - f(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{\xi - a}{b - a}$, откуда, с учётом того, что $f(\xi) = 0$,

$$\xi = a - \frac{(b - a)f(a)}{f(b) - f(a)}.$$

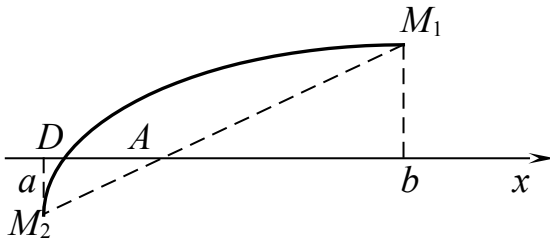
Таким образом, за приближённое значение корня принимается число

$$x_1 = a - \frac{(b - a)f(a)}{f(b) - f(a)} \quad (1).$$

Это выражение можно представить и в такой форме:

$$x_1 = b - \frac{(b - a)f(b)}{f(b) - f(a)} \quad (2).$$

Изложенное правило получения приближённого значения корня называется **правилом пропорциональных частей**. Оно допускает простое геометрическое истолкование. Заменим дугу M_1M_2 хордой M_1M_2 . Уравнение хорды может



быть записано в виде:

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

Правило по существу сводится к тому, что вместо точки пересечения с осью Ox дуги M_1M_2 мы находим точку пересечения с осью Ox её хорды.

Действительно, полагая в уравнении хорды $y=0$ для абсциссы x_1 точки D , мы получаем именно выражение (1). В связи с этим правило пропорциональных частей называют **методом хорд**.

Рассмотрим вопрос о положении точки x_1 по отношению к корню ξ . Ясно, что точка x_1 лежит между a и b , но с какой стороны от ξ ?

В случаях I и IV A левее D , а в случаях II и III - A правее D . Ограничимся случаями I и IV, применим снова выведенное правило, на этот раз к промежутку $[x_1, b]$, заменяя в (1) a на x_1 , получим новое приближённое значение корня ξ :

$$x_2 = x_1 - \frac{(b - x_1)f(x_1)}{f(b) - f(x_1)},$$

содержащееся, по доказанному между x_1 и ξ . Этот процесс можно продолжать неограниченно и построить последовательность возрастающих приближённых значений:

$$a < x_1 < x_2 < \dots < x_n < \dots < \xi.$$

При этом любые два последовательных значения x_n и x_{n+1} связаны формулой:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{(b - x_n)f(x_n)}{f(b) - f(x_n)} \quad (3).$$

Очевидно, что $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \xi$, т.к. (x_n) - возрастающая и ограниченная сверху числом α последовательность. Если перейти к пределу в равенстве (3), используя при этом непрерывность функции f , то получим, что

$$\frac{(b - \alpha)f(\alpha)}{f(b) - f(\alpha)} = 0,$$

откуда $f(\alpha)=0$. Т.к. других корней уравнения $f(x)=0$, кроме ξ , в промежутке $[a, b]$ нет, то $\alpha = \xi$. Таким образом, применив достаточное число раз указанное выше правило, можно вычислить корень ξ с любой степенью точности. При этом остаётся открытым вопрос, как оценить точность уже вычисленного приближённого значения x_n . Для решения его применим к разности $f(x_n)-f(\xi)$ формулу конечных приращений

$$f(x_n)-f(\xi)=(x_n-\xi)f'(c), \quad \xi < c < x_n \quad (\xi > c > x_n).$$

Отсюда $x - \xi = \frac{f(x_n)}{f'(c)}$, если обозначить через m наименьшее значение $|f'(x)|$ в рассматриваемом промежутке (которое можно вычислить), то получим оценку $|x_n - \xi| \leq \frac{|f(x_n)|}{m}$. Так по самой величине $f(x_n)$ оказывается возможным судить о близости x_n к корню.

Пример. Уравнение $x^3-2x^2-4x-7=0$ имеет корень между 3 и 4, так как, если $f(x)=x^3-2x^2-4x-7$, то $f(3)=-10<0$, $f(4)=9>0$. Вычислим этот корень с точностью $\varepsilon=0,01$. В промежутке $[3,4]$ обе производные $f'(x)=3x^2-4x-4$ и $f''(x)=6x-4$ сохраняют знак "плюс". Наименьшее значение первой из них равно $m=11$.

$$\text{Имеем: } x_1 = 3 - \frac{f(3)}{f(4) - f(3)} = 3 + \frac{10}{19} = 3 + 0,52\dots; \quad \text{округляя, положим } x_1=3,52.$$

Т.к. $f(3,52) = -2,246592$, то по неравенству для оценки точности, требуемая точность ещё не достигнута.

$$\text{Продолжаем: } x_2 = 3,52 - \frac{0,48 \cdot f(3,52)}{f(4) - f(3,52)} = 3,52 + \frac{1,07836416}{11246592} = 3,52 + 0,09\dots, \quad \text{или,}$$

округляя, $x_2=3,61$. Вычислим $f(3,61)=-0,458319$ и, пользуясь формулой оценки, снова видим, что цель ещё не достигнута. Наконец,

$$x_3 = 3,61 - \frac{0,39 \cdot f(3,6)}{f(4) - f(3,6)} = 3,61 + \frac{0,17874441}{9,458319} = 3,61 + 0,0188\dots \quad \text{или, округляя, положим}$$

$x_3=3,63$. Т.к. мы округлили в сторону корня, то могли и перескочить через него; что этого не произошло видно по знаку числа $f(3,63) = -0,041653$.

На этот раз $|x_3 - \xi| = \xi - x_3 < \frac{0,041653}{11} < 0,004$. Таким образом, $3,630 < \xi < 3,634$, то есть $\xi=3,63+0,004$.

Метод хорд все же мало эффективен, поэтому рассмотрим еще несколько методов решения уравнений.

§3. Правило Ньютона (метод касательных).

Пусть f удовлетворяет тем же условиям:

(1) $f(x)$ непрерывна в $[a, b]$ вместе со своими производными f', f'' ;

(2) $f(a)$ и $f(b)$ имеют разные знаки;

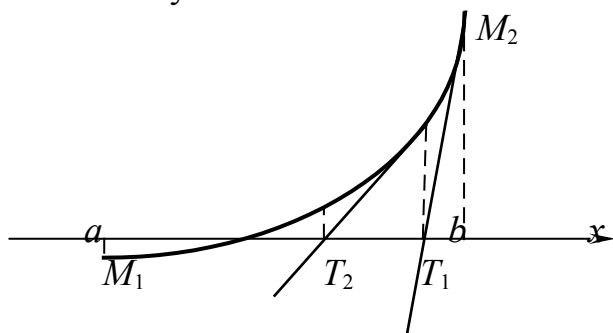
(3) обе производные f' и f'' сохраняют каждый определённый знак во всём $[a, b]$.

Кроме того, искомый корень $f(x)=0$ изолирован в $[a, b]$: $a < \xi < b$. Отправляясь от какого-нибудь из концов этого промежутка, например, от b , запишем формулу Тейлора с дополнительным членом в форме Лагранжа:

$$0 = f(\xi) = f(b) + f'(b) \cdot (\xi - b) + \frac{1}{2} f''(c) \cdot (\xi - b)^2, (\xi < c < b) \quad (1).$$

Отбрасывая дополнительный член, приближённо положим: $f(b) + f'(b)(\xi - b) = 0$, откуда $\xi = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$. Таким образом, мы приходим к приближённому значению корня ξ : $x_1 = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$ (2).

Получение этого значения можно наглядно использовать геометрически.



Рассмотрим касательную к кривой $y=f(x)$ в точке M_2 с абсциссой b . Её уравнение имеет вид: $y-f(b)=f'(b)(x-b)$. Полагая здесь $y=0$, найдём абсциссу точки T_1 пересечения касательной с осью Ox , она в точности совпадает с точкой x_1 , найденной выше. Значит, суть дела в приближённой замене дуги

кривой M_1M_2 - касательной к ней в одном из её концов.

Это правило, называемое именем Ньютона, называется также **методом касательных**.

Покажем, что если значение $f(b)$ одного знака с $f''(x)$, то x_1 лежит между ξ и b .

Действительно, т.к. $f(b)$ и $f'(b)$ одного знака, то из $x_1 = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$ ясно, что $x_1 < b$. С другой стороны, из (1) и (2) следует:

$$\xi - x_1 = \xi - b + \frac{f(b)}{f'(b)} = -\frac{1}{2} \frac{f''(c)}{f'(b)} (\xi - b)^2.$$

Но $f''(x)$ в рассматриваемом случае имеет одинаковый знак с $f'(x)$, следовательно, $\xi - x_1 < 0$ или $\xi < x_1 < b$.

Аналогично, если исходить из точки a , и касательную к кривой провести в точку M_1 (с абсциссой a), то взамен (2), получим приближённое значение $x_1 = a - \frac{f(a)}{f'(a)}$. Относительно вычисленного по этой формуле значения можно установить, как и выше: если значение $f''(x)$ имеет одинаковый знак с $f'(x)$, то x_1 лежит между a и ξ . Таким образом, для каждого из четырёх возможных случаев понятно, с какого конца гарантирована успешность приближения к корню по правилу Ньютона. Повторное применение его в случаях I и IV даёт последовательность убывающих значений:

$$b > x_1 > x_2 > \dots > x_n > x_{n+1} > \dots > \xi,$$

а в случаях II и III - последовательность возрастающих значений:

$$a < x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} < \dots < \xi.$$

Причём вычисление последующего значения по предыдущему всегда производится по формуле:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (3).$$

Покажем, что $x_n \rightarrow \xi$. Монотонная и ограниченная последовательность имеет конечный предел β . Переходя к пределу в (1), с учётом непрерывности обеих

функций f и f' найдём $\beta = \beta - \frac{f(\beta)}{f'(\beta)}$, откуда $f(\beta)=0$ и $\beta=\xi$. Таким образом, правило Ньютона, повторно применённое, позволяет вычислить корень ξ с любой степенью точности. При этом точность уже вычисленного приближённого значения оценивается по формуле:

$$x_{n+1} - \xi = \frac{1}{2} \cdot \frac{f''(c)}{f'(c)} \cdot (x_n - \xi)^2$$

Обозначим через M наибольшее значение $|f''(x)|$ в заданном промежутке $[a, b]$ и через m - наименьшее значение $|f'(x)|$ на $[a, b]$. Отсюда тогда получим:

$$|x_{n+1} - \xi| \leq \frac{M}{2m} |x_n - \xi|^2.$$

Поскольку справа стоит квадрат, этим обеспечено весьма быстрое приближение x_n к ξ (по крайней мере, начиная с некоторого места), что и делает метод касательных одним из самых эффективных методов приближённого вычисления корня.

Замечание: Последнее неравенство выполняет ещё одну функцию. Если точность приближённого значения x_n уже найдена то последнее неравенство позволяет оценить точность ещё не вычисленного значения x_{n+1} . Это может оказаться полезным при решении вопроса о том, на каком знаке целесообразно его округлять.

Пример. Вычислить внутри отрезка $[3,4]$ с точностью до $\varepsilon=0,01$ корень уравнения $x^3-2x^2-4x-7=0$,

Решение: $f(x)=x^3-2x^2-4x-7, f(3)=-10<0, f(4)=9>0, f'(x)=3x^2-4x-4>0, f''(x)=6x-4>0$ при $3 \leq x \leq 4$.

Методом хорд мы нашли $\xi=3,63+0,004$. Наименьшее значение $|f'(x)|$ есть $m=11$. Отправляемся от $b=4$, так как в этом конце отрезка $[3,4]$ знак $f(x)$ совпадает со знаком $f''(x)$. Тогда, используя формулу (2) получим:

$$x_1 = 4 - \frac{f(4)}{f'(4)} = 4 - \frac{9}{28} = 4 - 0,32\dots; \text{ округляя, положим } x_1=4-0,3=3,7. \text{ Т.к.}$$

$f(x_1)=f(3,7)=1,473$, то по неравенству $|x_n - \xi| \leq \frac{|f(x_n)|}{m}$ имеем:

$$x_1 - \xi < \frac{1,473}{11} < 0,14, \text{ т.е. достигнутая точность недостаточна. Далее,}$$

$$x_2 = 3,7 - \frac{f(3,7)}{f'(3,7)} = 3,7 - \frac{1,473}{22,27} = 3,7 - 0,066\dots; \text{ положим } x_2=3,7-0,066=3,634. \text{ На этот}$$

раз $f(x_2)=f(3,634)=0,042\dots$, так что в силу того же неравенства: $x_2 < \frac{0,042}{11} < 0,004$.

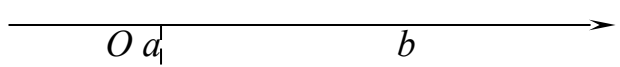
Поэтому $3,630 < \xi < 3,634$ и $\xi=3,63$ с требуемой точностью. Получение этого результата методом хорд потребовало трёх шагов.

§4. Комбинированный метод.

Этот метод состоит в одновременном использовании как метода касательных, так и метода хорд. Для определённости предположим, что мы имеем дело со случаем I.



Приближенные значения x_1 и x_1' вычислим по формулам:


 $x_1 = a - \frac{(b-a)f(a)}{f(b)-f(a)}, x_1 = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$, тогда по доказанному: $a < x_1 < \xi < x_1' < b$. При следующем же шаге мы заменяем в этих формулах a и b на x_1 и x_1' :

$$x_2 = x_1 - \frac{(x_1' - x_1)f(x_1)}{f(x_1') - f(x_1)}; x_2' = x_1' - \frac{f(x_1')}{f'(x_1')}$$

Этот процесс можно продолжать; имея два приближённых значения x_n и x_n' , между которыми содержится корень ξ , мы переходим к следующей паре приближённых значений по формулам:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{(x_n' - x_n)f(x_n)}{f(x_n') - f(x_n)}; x_{n+1}' = x_n' - \frac{f(x_n')}{f'(x_n')}$$

Таким образом, при комбинированном методе мы получаем одновременно с недостатком и с избытком приближённые значения корня, которые стремятся к точному с разных сторон.

Пример. Найти корни уравнения $2x^3 - x^2 - 7x + 5 = 0$ с точностью до $\varepsilon = 0,001$.

Решение: Подставляя целочисленные значения в выражение функции $f(x) = 2x^3 - x^2 - 7x + 5$, находим, что искомые корни содержатся в промежутках:

$$-2 < \xi_1 < -1, \quad 0 < \xi_2 < 1, \quad 1 < \xi_3 < 2.$$

Решим для первого неравенства, то есть в промежутке $(-2, -1)$:

$f'(x) = 6x^2 - 2x - 7 > 0$, $f''(x) = 12x - 2 < 0$. Значит, это случай (II). Так как, $f(-2) = -1 < 0$, $f(-1) = 9 > 0$, то правило Ньютона применяем к левым концам промежутков. Имеем $f(-2) = 21$ и следующие значения x_1' и x_1 :

$$x_1' = -2 - \frac{-1}{21} = -1,952, \quad x_1 = -1 + \frac{9}{9 - (-1)} = -1,9$$

Округляя x_1' в сторону уменьшения, получим число $-1,96 > \xi_1$.

Если же округлить его в сторону увеличения, т.е. в сторону корня, то получим число $-1,95$; но $f(-1,95) = 0,01775 > 0$, то есть в этом случае мы перескочим через корень. Это обстоятельство выгодно для нас, ибо даёт возможность сузить промежуток, содержащий корень, и отбросив прежнее значение x_1 , положить $x_1' = -1,96$, $x_1 = -1,95$.

Далее имеем $f(-1,96) = -0,180672$, $f'(-1,96) = 19,9696$,

$$x_2' = -1,96 + \frac{0,180672}{19,9696} = -1,96 + 0,00904... = -1,95095...$$

$$x_2 = -1,95 - \frac{0,01 * 0,01775}{0,01775 + 0,180672} = -1,95 - 0,00089... = -1,95089...$$

Поскольку ξ_1 должно быть заключено между этими границами, то ясно, что $\xi_1 = -1,9509 \pm 0,0001$, так что требуемая точность превзойдена.

Оставшиеся два случая рассмотреть самостоятельно.

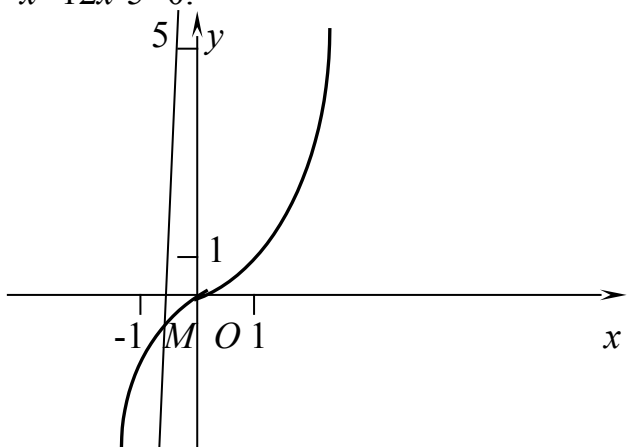
§5. Метод итераций.

Рассмотрим вначале сущность итерационного метода. В отличие от прямых или точных методов, итерационные дают возможность получить решение лишь приближенно, путем повторения некоторой совокупности операций, позволяющей по исходному приближенному значению решения определить его уточненное значение. Выполнение этой совокупности операций составляет одну итерацию. Многократное повторение итераций позволяет получать все бо-

лее точное решение при условии, что итерационный процесс сходится к искомому решению.

Если данное уравнение $f(x)=0$ приведено к виду $x=\varphi(x)$, где $|\varphi'(x)|\leq r < 1$ всюду на отрезке $[a, b]$, на котором оно имеет единственный корень, то исходя из некоторого начального значения x_0 , принадлежащего отрезку $[a, b]$, можно построить такую последовательность: $x_1=\varphi(x_0)$, $x_2=\varphi(x_1)$, ..., $x_n=\varphi(x_{n-1})$, Пределом этой последовательности является единственный корень уравнения $f(x)=0$ на отрезке $[a, b]$. Погрешность приближенного значения x_m корня \bar{x} определяется неравенством: $|\bar{x} - x_m| < \frac{r}{1-r} |x_m - x_{m-1}|$.

Пример: Методом итераций решить с точностью до 0,01 уравнение $x^3-12x-5=0$.



Решение:

Найдем интервал изоляции действительного корня уравнения. Представим данное уравнение в виде $x^3=12x+5$ и построим графики двух функций $y = x^3$ (1) и $y=12x+5$ (2). Абцисса точки M пересечения этих графиков находит в промежутке $[-1,0]$, поэтому за начальное значение \bar{x} можно взять $x_0 = -1$. Запишем исходное уравнение в

виде: $x = \frac{x^3}{12} - \frac{5}{12}$. Здесь $\varphi(x) = \frac{x^3 - 5}{12}$, $\varphi'(x) = \frac{x^2}{4}$, то есть $|\varphi'(x)| < 1$ в промежутке $[-1,0]$ и поэтому метод итераций применим. Найдем теперь первое приближенное

значение: $x_1 = \frac{(-1)^3 - 5}{12} = -\frac{1}{2}$. Найдем второе и последующие приближения:

$$x_2 = \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)^3 - 5}{12} = -0,4271;$$

$$x_3 = \frac{\left(-\frac{41}{96}\right)^3 - 5}{12} = -0,4236;$$

$$x_4 = \frac{(-0,4236)^3 - 5}{12} = -0,4230.$$

Следовательно, искомый корень $x \approx 0,42$.

Замечание 1. Уравнение $y=f(x)$ можно записать иначе. Одним из самых распространенных представлений является представление в виде: $x=x+cf(x)$, где c - произвольная постоянная.

Замечание 2. Для нахождения приближенного значения корня с погрешностью, не превышающей ε , достаточно определить m так, чтобы выполнялось неравенство $|\bar{x} - x_m| < \frac{r}{1-r} \varepsilon$.

ИНТЕРПОЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ.

§6. Интерполяционная формула Лагранжа.

Пусть для некоторой функции $f(x)$, определённой на $[a, b]$ вычислены $(m+1)$ её значений в точках x_0, x_1, \dots, x_m : $f(x_0), f(x_1), f(x_m)$ и требуется по этим значениям вычислить значение $f(x)$ при некотором новом значении x . В этом состоит простейшая задача интерполирования. Обычно задачу понимают так: ищется

многочлен $L(x)$ наименьшей степени, который в заданных точках x_i ($k=0,1,\dots,m$), называемых **узлами интерполирования**, принимает те же значения $f(x_i)$, что и функция $f(x)$, и приближённо полагают для любого x из $[a, b]$ $f(x) \approx L(x)$.

Подобное приближённое равенство называется интерполяционной формулой. Итак, нужно прежде всего найти интерполяционную формулу, а затем при определённых предположениях относительно функции $f(x)$ - оценить погрешность приближённой формулы.

Для отыскания многочлена $L(x)$, удовлетворяющего условиям $L(x_i) = f(x_i)$ ($i=0,1,\dots,m$), удобно ввести базисный многочлен m -й степени $l_k(x)$, $k=0,1,\dots,m$, который, соответственно индексу, принимает значение **1** при $x = x_k$ и обращается в **0** при $x=x_i$, если $i \neq k$.

Замечание 1. Индекс этого многочлена, в отличие от общепринятых обозначений многочленов, указывает не степень, а номер многочлена k .

Конкретизируем многочлен $l_k(x)$. Так как при $x=x_i$, если $i \neq k$ имеет место $l_k(x)=0$, то его можно записать в виде:

$$l_k(x) = C_k (x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_m)$$

Так как при $x = x_k$ имеет место $l_k(x)=1$, то подставляя в выражение $l_k(x)$ значения $x = x_k$ и приравнявая результат единице, получим:

$$C_k = 1 / ((x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_m))$$

В результате получим:

$$l_k(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_m)}{(x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_m)}, \quad (1)$$

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_m)}{(x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_m)} f(x_k)$$

а многочлен $L(x) = \sum_{k=0}^m L_k(x)$ вычисляется по формуле:

$$L(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_m)}{(x_k - x_0) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_m)} f(x_k) \quad (2)$$

Тогда многочлен $L(x) = \sum_{k=0}^m f(x_k) l_k(x)$ удовлетворяет всем из условий $L(x_i) = f(x_i)$. Степень этого многочлена не выше m и значит условиями $L(x_i) = f(x_i)$ он определяется однозначно; его называют **интерполяционным многочленом Лагранжа**, а приближённое равенство $f(x) \approx L(x)$ - **интерполяционной формулой Лагранжа**.

Замечание. Многочлен $l_k(x)$ можно записать более сжато, если ввести выражение $w(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_m)$, обращающееся в **0** в узлах интерполирования x_0, x_1, \dots, x_m .

Покажем это: $(x - x_0) \times \dots \times (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \times \dots \times (x - x_m) = \frac{w(x)}{x - x_k}$ ($x \neq x_k$) а

$$(x - x_0) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_m) = \lim_{x \rightarrow x_k} \frac{w(x)}{x - x_k} = \lim_{x \rightarrow x_k} \frac{w(x) - w(x_k)}{x - x_k} = w'(x_k)$$

Таким образом, $l_k(x) = \frac{w(x)}{w'(x_k)(x-x_k)}$ и

$$L(x) = \sum_{k=0}^m \frac{w(x)}{w'(x_k)(x-x_k)} \times f(x_k). \quad (3)$$

§7. Дополнительный член формулы Лагранжа.

Оценим разность $f(x)-L(x)$, где x -любое фиксированное значение из отрезка $[a, b]$, отличное от узлов интерполирования. Предположим, что функция $f(z)$ на этом отрезке имеет производные всех порядков до $(m+1)$ -го включительно. Какова бы ни была постоянная K , функция $\varphi(z)=f(z)-L(z)-Kw(z)$ тоже имеет $(m+1)$ производных и к тому же обращается в 0 в узлах x_i ($i=0,1,\dots,m$). Выберем постоянную K так, чтобы и при $z = x$ было $\varphi(x)=0$, т.е. положим

$$K = \frac{f(x) - L(x)}{w(x)} \quad (1), \text{ (так как } x \neq x_i, \text{ то } w(x) \neq 0 \text{)}.$$

По теореме Ролля в $(m+1)$ промежутках между $m+2$ корнями x, x_0, x_1, \dots, x_m функции $\varphi(z)$ найдётся $m+1$ различных корней её производной $\varphi'(z)$. Применяя снова теорему Ролля к функции $\varphi'(z)$ и к m промежуткам между её $(m+1)$ корнями, установим существование m различных корней второй производной и так далее. Продолжая это рассуждение, на $(m+1)$ -ом его шаге придём к существованию корня ξ $(m+1)$ -й производной $\varphi^{(m+1)}(z)$, так что:

$$\varphi^{(m+1)}(\xi) = 0 \quad (a < \xi < b) \quad (2).$$

Но $L^{(m+1)}(z) \equiv 0$ ибо степень многочлена $L(z)$ не выше m , а $w^{(m+1)}(z) \equiv (m+1)!$ Учитывая определение вспомогательной функции $\varphi(z)$, имеем:

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

Так что из (1) получается, что $K = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}$. Окончательно получим:

$$f(x) = L(x) + \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} w(x) \quad (a < \xi < b) \quad (3).$$

Это **интерполяционная формула Лагранжа с дополнительным членом**. В отличие от $f(x) \approx L(x)$ она является точной.

Замечание: Если на отрезке $[a, b]$ $\max |f^{(m+1)}(z)| = M_{m+1} < \infty$ то, так как на этом отрезке $|w(z)| \leq (b-a)^{m+1}$, получаем такую оценку для погрешности формулы $f(x) \approx L(x)$: $|f(x) - L(x)| \leq \frac{M_{m+1}}{(m+1)!} (b-a)^{m+1}$.

§8. Интерполяционные формулы Ньютона.

Пусть $f(x_0), f(x_1), f(x_n)$ - $(n+1)$ значений некоторой функции $y=f(x)$, определённой на $[a, b]$, которые вычислены в узловых точках x_0, x_1, \dots, x_n . При этом функция $y=f(x)$ задана на сетке равностоящих узлов интерполирования $x_k = kh$ ($k=0,1,\dots,n$) и для нее построена таблица конечных разностей.

Замечание 1. Конечные разности представляют собой выражения вида:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta y_0 = y_1 - y_0, \Delta y_1 = y_2 - y_1, \dots, \Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-2} \\ \Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0, \Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1, \dots, \Delta^2 y_{n-2} = \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2} \\ \dots \\ \Delta^k y_0 = \Delta^{k-1} y_1 - \Delta^{k-1} y_0, \Delta^k y_1 = \Delta^{k-1} y_2 - \Delta^{k-1} y_1, \dots, \Delta^{k-1} y_{n-k} = \Delta^{k-1} y_{n-k+1} - \Delta^{k-1} y_{n-k} \end{array} \right. \quad \text{ВПЛ}$$

отъ до k -го порядка включительно (при этом $\Delta^0 y_{n-i} = y_{n-i}$, где $i=0,1,2,\dots,n$).

Таблица конечных разностей.

x_0	y_0					
		Δy_0				
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$			
		Δy_1		$\Delta^3 y_0$		
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$		$\Delta^4 y_0$	
		Δy_2		$\Delta^3 y_1$...
x_3	y_3		$\Delta^2 y_2$		$\Delta^4 y_1$	
		Δy_3		$\Delta^3 y_2$		
x_4	y_4		$\Delta^2 y_3$...	
		Δy_4		...		
x_5	y_5		...			
		...				
...	...					

Будем строить интерполяционный многочлен $P_n(x)$ в виде:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}) \quad (1)$$

Его $n+1$ коэффициент $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ находится из $n+1$ интерполяционных равенств $P_n(x_i) = y_i$ ($i=0,1,\dots, n$) следующим образом: пусть $i=0$, $x=x_0$, тогда $P_n(x_0) = a_0$, а по условию интерполяции $P_n(x_0) = y_0$, следовательно, $a_0=y_0$.

Аналогичными рассуждениями, при $i=1$ выводится равенство

$$a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_1$$

в которое подставим уже найденное значение $a_0=y_0$. Разрешая полученное равенство относительно a_1 получим $a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y_0}{h}$.

При $i=2$ имеем: $a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$ отсюда $y_0 + 2h \frac{\Delta y_0}{h} + a_2 \cdot 2h \cdot h$ и в результате получим: $a_2 = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2!h^2} = \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}$.

В итоге, a_k коэффициент вычисляется по формуле: $a_k = \frac{\Delta^k y_0}{k!h^k}$ (это можно доказать, применив метод математической индукции). Подставляя найденные коэффициенты $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ в формулу (1) получим многочлен

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \quad (2)$$

Полученный многочлен называется **первым интерполяционным многочленом Ньютона**.

Так как каждое слагаемое многочлена, начиная со второго, содержит множитель $x - x_0$, то многочлен (2) наиболее приспособлен для интерполирования

в окрестности узла x_0 . В таких случаях узел x_0 называется **базовым**. Введем новую переменную q , которая определяется равенством: $q = \frac{x - x_0}{h}$, то есть $x = x_0 + qh$. Тогда $x - x_i = x_0 + qh - x_0 - ih = h(q - i)$ и многочлен Ньютона примет вид:

$$f(x) \approx P_n(x_0 + qh) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} q(q-1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} q(q-1)\dots(q-n+1) \quad (3)$$

Полученная формула называется **первой интерполяционной формулой Ньютона**

Замечание 2. Первая интерполяционная формула Ньютона обычно применяется при значениях $|q| < 1$, для *интерполирования вперед* (при $x \in (x_0, x_1)$), то есть при $q \in (0, 1)$.

Так как реально степени интерполяционных многочленов бывают не так велики, в то время как таблицы значений функций достаточно обширны, и так как в реальной числовой таблице нет никаких индексов - номеров узлов, то за базовый для формулы (3) узел x_0 можно принимать узел, ближайший к заданной фиксированной точке x , если за ним имеется достаточное число узлов для построения необходимых для (3) разностей. Поскольку в первой формуле Ньютона используются исходящие диагонали таблицы конечных разностей (см. таб.), то такое смещение узла, принимаемого за базовый, в конце таблицы будет неприемлемо.

Учёт этого обстоятельства приводит к потребности в симметричной, в определённом смысле слова, формулы для (3), которая была бы пригодной для интерполирования в конце таблицы. Для этого, в отличие от (1), форма интерполяционного многочлена $P_n(x)$ берётся такой, которая предусматривает поочерёдное подключение узлов в обратном порядке: сначала последний, потом предпоследний и так далее, то есть

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_n) + a_2(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots + a_n(x - x_n)\dots(x - x_1) \quad (4)$$

Его коэффициенты $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ находится из $n+1$ интерполяционных равенств $P_n(x_i) = y_i$ ($i=0, 1, \dots, n$) аналогичным выше изложенному способом, но подстановка узловых точек вместо x и рассмотрение интерполяционных равенств производится в обратном порядке. Полагая $x=x_n, x=x_{n-1}, \dots, x=x_1$ получим: $P_n(x_n) = a_n = y_n$,

$$P_n(x_{n-1}) = y_n + a_1(x_{n-1} - x_n) = y_{n-1}, \text{ отсюда } a_1 = \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h},$$

$$P_{n-2} = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x_{n-2} - x_n) + a_2(x_{n-2} - x_n)(x_{n-2} - x_{n-1}) = y_{n-2}, \text{ следовательно}$$

$$a_2 = \frac{y_{n-2} - y_n + 2\Delta y_{n-1}}{(x_{n-2} - x_n)(x_{n-2} - x_{n-1})} = \frac{y_n - 2\Delta y_{n-1} + y_{n-2}}{-2h \cdot (-h)} = \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2} \text{ и так далее.}$$

В результате: $a_k = \frac{\Delta^k y_{n-k}}{k!h^k}$ (это можно доказать, применив метод математической индукции). Подставляя найденные коэффициенты $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ в формулу (*) получим многочлен

$$P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_n)\dots(x - x_1) \quad (5)$$

Полученный многочлен называется **вторым интерполяционным многочленом Ньютона** в котором базовым является узел x_n и коэффициенты которого

определяются конечными разностями, расположенными на восходящей от y_n диагонали.

Пусть $x = x_n + qh$, то есть введем новую переменную q , которая определяется равенством: $q = \frac{x - x_n}{h}$ и преобразуем к ней входящие в (5) разности. Тогда $x - x_i = x_n + qh - x_0 - ih = x_0 + nh + qh - x_0 - ih = h(q + n - i)$ и многочлен Ньютона примет вид:

$$f(x) \approx P_n(x_0 + qh) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!} q(q+1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} q(q+1)\dots(q+n-1) \quad (6)$$

Полученная формула называется **второй интерполяционной формулой Ньютона**.

Замечание 3. Вторая интерполяционная формула Ньютона обычно применяется при значениях $|q| < 1$, для *интерполирования назад* при $q \in (-1, 0)$, то есть в окрестности узла x_n .

Дополнительный член формулы Ньютона.

Замечание 4. Конечноразностный многочлен Ньютона является одной из форм представления интерполяционного многочлена Лагранжа, поэтому справедливо представление остаточного члена в форме Лагранжа.

То есть, многочлен $w(x)$ - вспомогательный многочлен формулы Лагранжа, с учетом того, что $m = n$, преобразуется к $\frac{x - x_0}{h}$ (новой переменной) следующим образом: $w(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_m) = h^{n+1}(q - 1)(q - 2)\dots(q - n)$, тогда

$R_n(x_0 + qh) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} q(q-1)(q-2)\dots(q-n)$ - для первой интерполяционной формулы Ньютона,

$R_n(x_n + qh) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} q(q+1)(q+2)\dots(q+n)$ - для второй интерполяционной формулы Ньютона.

В итоге точное равенство имеет вид: $f(x) = P_n(x + qh) + R_n(x + qh)$.

§9. Интерполирование с кратными узлами. Формула Эрмита.

Можно поставить более общую задачу интерполирования, задав в узлах x_0, x_1, \dots, x_m , кроме значений самой функции f , также и значения последовательных её производных:

$$\begin{cases} f(x_0), f'(x_0), \dots, f^{(n_0)}(x_0) \\ f(x_1), f'(x_1), \dots, f^{(n_1)}(x_1) \\ \text{-----} \\ f(x_m), f'(x_m), \dots, f^{(n_m)}(x_m) \end{cases} \quad (1)$$

где n_0, n_1, \dots, n_m - неотрицательные целые числа. Общее число этих условий равно $(n_0+1) + (n_1+1) + \dots + (n_m+1) = N$.

Задача вычисления функции $f(x)$ при любом отличном от узлов значении x на $[a, b]$ с использованием всех данных (1) понимается так: имеется многочлен $H(x)$ наименьшей степени, который в каждом узле x_i , вместе со своими производными до порядка n_i включительно, принимает те же значения, что и

сама функция f и её соответствующие производные, а затем приближенно предполагается, что $f(x) \cong H(x)$ (2). Узлы x_i называются **узлами интерполирования** соответственно **кратности n_i+1** .

Можно доказать существование и единственность многочлена $H(x)$ степени не выше $N-1$, удовлетворяющего всем поставленным условиям. Его называют **интерполяционным многочленом Эрмита**, а формулу (2)-**интерполяционной формулой Эрмита**.

Замечание 1. Если все n_i положить равными 0 , то получится формула Лагранжа $f(x) \cong L(x)$.

Замечание 2. Если взять один лишь узел x_0 , но кратности $(n+1)$, т.е. от многочлена не выше n -й степени $T(x)$ потребовать, чтобы в точке x_0 его значение и значения n его производных совпадали, соответственно, со значениями самой функции $f(x)$ и её производных, то получится многочлен Тейлора.

$$T(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

Таким образом, формула Лагранжа $f(x) \cong L(x)$ и приближенная формула $f(x) \cong T(x)$ (многочлен Тейлора) являются частными случаями интерполяционной формулы Эрмита.

Дополнительный член формулы (2), восстанавливающий её точность, выводится с помощью рассуждений, аналогичных приведённым выше. Рассмотрим многочлен N -ой степени:

$$\Omega(z) = (z-z_0)^{n_0+1} (z-z_1)^{n_1+1} \cdot \dots \cdot (z-z_m)^{n_m+1}$$

и положим для $a \leq z \leq b$

$$\Phi(z) = f(z) - H(z) - K\Omega(z), \text{ где } K = \text{const.}$$

Если предположить, что функция $f(z)$ на отрезке $[a, b]$ имеет N последовательных производных, то это будет справедливо и для $\Phi(z)$. Фиксируя значения $z=x$, отличное от узлов, мы выберем постоянную K так:

$$K = \frac{f(x) - H(x)}{\Omega(x)} \quad (\Omega(x) \neq 0) \quad (3)$$

при таком выборе функция $\Phi(x)$ обращается в 0 и при $z=x$. Всего она будет иметь $N+1$ корней, если каждый корень считать столько раз, какова его кратность.

Определение. Число α называется корнем p -ой кратности функции $\Phi(z)$, если α обращает в 0 вместе с $\Phi(z)$ и $p-1$ её производных.

Применяя последовательно теорему Ролля как и выше (с тем лишь усложнением, что каждый кратный корень функции $\Phi(z)$ ещё в течение нескольких шагов будет фигурировать и как корень её последовательных производных), окончательно придём к утверждению, что в некоторой точке ξ обратится в 0

производная $\Phi^{(N)}(z)$. Отсюда $K = \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}$ и в виду (3)

$$f(x) = H(x) + \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!} \Omega(x) \quad (4).$$

АППРОКСИМИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ.

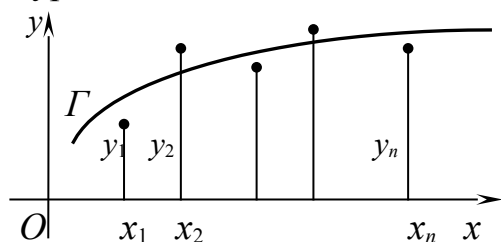
§10. Эмпирические формулы.

Пусть, изучая функциональную зависимость $y=f(x)$ мы провели ряд измерений величин x и y и в результате получили таблицу значений;

x	x_1	x_2	...	x_n
y	y_1	y_2	...	y_n

Если аналитическое выражение функции $f(x)$ неизвестно или весьма сложно, то возникает практически важная задача: найти эмпирическую формулу $\tilde{y} = \tilde{f}(x)$, значения которой при $x=x_i$ возможно мало отличались бы от опытных данных y_i ($i = \overline{1, n}$). В такой постановке наша задача весьма неопределённая, поэтому обычно, по ряду соображений, указывают достаточно узкий класс функций K (например, множество функций линейных, показательных и так далее), которому должна принадлежать искомая функция $\tilde{f}(x)$, и дело, таким образом, сводится к нахождению лишь наилучших значений параметров. Во многих случаях класс K определяется требованием простоты эмпирической формулы; иногда этот класс подсказывается самой природой явления.

Геометрически задача построения эмпирической формулы состоит в проведении кривой Γ вида $\tilde{y} = \tilde{f}(x)$ из некоторого класса K "возможно ближе прилегающей" к системе точек $M_i(x_i, y_i)$, $i=1, 2, \dots, n$. Разумеется, при этом должен быть выяснен точный математический смысл понятия близости кривой Γ и конфигурации точек M .



Заметим, что задача построения эмпирической формулы отлична от задачи интерполирования. Как правило, исходный материал весьма обширен и ищется сравнительно простая аналитическая зависимость между данными

переменными x , y . Эта зависимость обычно не сводится к интерполяционным формулам (которые дают значения, совпадающие в заданных точках с заданными значениями), так как график эмпирической функции $\tilde{y} = \tilde{f}(x)$, вообще говоря, не проходит точно через соответствующую систему точек $M_i(x_i, y_i)$ ($i = \overline{1, n}$). Кроме того, сами исходные эмпирические данные x_i и y_i , как правило, являются приближёнными и содержат ошибки. Поэтому интерполяционная формула, повторяющая эти ошибки, не говоря даже об её сложности, не является идеальным решением поставленной задачи. Возможно простая эмпирическая формула, сглаживающая местные неправильности, лучше отобразит действительность.

Построение эмпирической формулы складывается из двух этапов:

- 1) выяснение общего вида этой формулы,
- 2) определение лучших её параметров.

Если неизвестен характер зависимости между данными величинами x и y , то вид эмпирической формулы является произвольным. Предпочтение отдаётся простым формулам, обладающим хорошей точностью. Если отсутствуют сведения о промежуточных данных, то обычно предполагается, что эмпирическая функция аналитическая, без точек разрыва, и график её - плавная кривая.

При известном навыке по положению точек, определяющих некоторую гладкую кривую, можно примерно угадать общий вид зависимости путём уста-

новления сходства между построенным графиком и образцами известных кривых (отдельные неправильности при этом игнорируются).

Во многих случаях можно ограничиться многочленом $y = \sum_{k=0}^m a_k x^k$. Нередко употребляются другие элементарные функции (дробно-линейная, степенная, показательная, логарифмическая т.п.). Имеются приёмы, облегчающие выбор вида эмпирической формулы. Что касается определения наилучших значений параметров, входящих в эмпирическую формулу, то эта задача более лёгкая, и решается определёнными методами.

Замечание: При построении эмпирической формулы можно предполагать, что исходные данные (x_i, y_i) ($i = \overline{1, n}$) положительны.

Действительно, если бы, например, все $x_i < 0$ (или все $y_i < 0$), то достаточно рассмотреть таблицу значений $(-x_i, y_i)$ или соответственно $(x_i, -y_i)$. Аналогично при $x_i < 0, y_i < 0$ достаточно построить эмпирическую формулу для таблицы $(-x_i, y_i)$.

Пусть теперь имеем общий случай, когда знаки x_i и y_i переменные. Так как таблица значений (x_i, y_i) конечна, то всегда можно подобрать положительные числа m и n такие, что $\xi_i = m + x_i > 0$ и $\eta_i = n + y_i > 0$. Отсюда получаем, что решение поставленной задачи сводится к нахождению эмпирической формулы для системы положительных значений (ξ_i, η_i) . Поэтому в дальнейшем будем рассматривать таблицы с положительными элементами.

§11. Простейшие способы обработки опытных данных.

1. Графический способ.

Пусть данные опыта представлены таблицей. Через точки, определяемые этой таблицей или близкие к ним, проводим график и по виду графика подбираем вид эмпирической формулы. Простейшим случаем считается тот, для которого данные опыта приводят к точкам, располагающимся приблизительно на прямой $y = a_0 + a_1 x$ или на кривых, уравнения которых $S = At^{\alpha}$ и $S = Ae^{at}$ преобразуются заменой переменных к линейной функции. Решая эту задачу графическим способом, наносим точки на координатную сетку (с равномерной или логарифмической шкалой) и проводим прямую приблизительно через эти точки так, чтобы она лежала возможно ближе к каждой из нанесенных точек, а затем берем две произвольные точки на этой прямой (возможно дальше одна от другой) и подставляем их координаты в соотношение $y = a_0 + a_1 x$. Из полученных таким образом двух уравнений найдем a_0 и a_1 .

2. Способ средних.

Он основывается на допущении, что наиболее подходящей линией служит та, для которой алгебраическая сумма отклонений равна нулю. Для того чтобы найти этим способом неизвестные постоянные в эмпирической формуле, сначала подставим в эту формулу все пары наблюдавшихся или замеренных значений x и y и получаем столько отклонений, сколько пар значений $(x; y)$ в таблице (уклонения – вертикальные расстояния от данных точек до графика функции). Затем распределяем эти отклонения по группам, составляя столько групп, сколько неизвестных параметров эмпирической формулы надо найти.

Наконец, приравнивая к нулю сумму уклонений по каждой группе, получим систему линейных уравнений относительно параметров.

Рассмотрим на примере применение способа средних.

Пример. Найти формулу вида $S = At^\alpha$, отвечающую таблице

t	273	283	288	293	313	333	353	373
S	29,4	33,3	35,2	37,2	45,8	55,2	65,6	77,3

Здесь уклонения имеют вид $\delta = At^\alpha - S$. Подставляя значения t и S , взятые из таблицы, и приравнивая уклонения нулю, получим систему уравнений относительно параметров A и α , решение которой затруднительно. Без большой потери в точности можно приравнять нулю сумму уравнений логарифма S , т.е. $\delta' = \lg A + \alpha \lg t - \lg S$.

Тогда уравнения выразятся формулами

$$\begin{aligned} \delta'_1 &= \lg A + 2,4362\alpha - 1,4683, & \delta'_5 &= \lg A + 2,4955\alpha - 1,6609, \\ \delta'_2 &= \lg A + 2,4518\alpha - 1,5224, & \delta'_6 &= \lg A + 2,5224\alpha - 1,7419, \\ \delta'_3 &= \lg A + 2,4594\alpha - 1,5465, & \delta'_7 &= \lg A + 2,5478\alpha - 1,8169, \\ \delta'_4 &= \lg A + 2,4669\alpha - 1,5705, & \delta'_8 &= \lg A + 2,5717\alpha - 1,8882. \end{aligned}$$

Приравняв нулю сумму уклонений по этим двум группам, получим систему уравнений для определения параметров A и α :

$$\begin{cases} 4 \lg A + 9,8143\alpha - 6,1077, \\ 4 \lg A + 10,1374\alpha - 7,1079. \end{cases}$$

Решение этой системы $\alpha = 3,096$, $\lg A = 7,9345$; отсюда $A = 8,5 \cdot 10^{-7}$. Таким образом, $S = 8,6 \cdot 10^{-7} t^{3,096}$.

§12. Точечное квадратичное аппроксимирование функций.

Метод наименьших квадратов.

Одним из самых распространенных и наиболее точных способов обработки опытных данных является метод наименьших квадратов.

1. На практике часто приходится решать такую задачу. Пусть для двух функционально связанных величин x и y известны n пар соответствующих значений $(x_1; y_1), (x_2; y_2), \dots, (x_n; y_n)$. Требуется в наперед заданной формуле $y = f(x, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ определить m параметров $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ ($m < n$) так, чтобы в эту формулу наилучшим образом «укладывались» бы известные n пар значений x и y . Считается (исходя из принципов теории вероятности), что наилучшими являются те значения $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$, которые обращают к минимуму сумму $\sum_{k=1}^{k=n} [f(x_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) - y_k]^2$ (т.е. сумму квадратов отклонений значений y , вычисленных по формуле, от заданных), поэтому сам способ и получил название *способа наименьших квадратов*.

Это условие дает систему m уравнений, из которых определяются $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$:

$$\sum_{k=1}^{k=n} [f(x_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) - y_k] \frac{\partial f(x_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)}{\partial \alpha_j} = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, m) \quad (1)$$

На практике заданную формулу $y = f(x, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ иногда приходится (в ущерб строгости полученного решения) преобразовывать к такому виду, чтобы систему (1) было проще решать. Ниже будет рассмотрен подбор параметров в формулах видов $y = Ae^{cx}$ и $y = Ax^q$.

Рассмотрим частные случаи различных видов аппроксимирующих многочленов

а) $y = a_0x^m + a_1x^{m-1} + \dots + a_m$ ($m+1$ параметров a_0, a_1, \dots, a_m ; $n > m+1$).

В этом случае система (1) принимает следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 + x_2 + \dots + x_n = y_1 \\ x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = y_2 \\ \dots \\ x_1^{2m} + x_2^{2m} + \dots + x_n^{2m} = y_n \end{array} \right. \quad (2)$$

Эта система $m+1$ уравнений с $m+1$ неизвестными всегда имеет единственное решение, так как ее определитель отличен от нуля.

Для определения коэффициентов системы (2) удобно составить вспомогательную таблицу вида

k	x_k	x_k^2	x_k^3	...	x_k^{2m}	y_k	$x_k y_k$	$x_k^2 y_k$...	$x_k^m y_k$
1	x_1	x_1^2	x_1^3	...	x_1^{2m}	y_1	$x_1 y_1$	$x_1^2 y_1$...	$x_1^m y_1$
2	x_2	x_2^2	x_2^3	...	x_2^{2m}	y_2	$x_2 y_2$	$x_2^2 y_2$...	$x_2^m y_2$
...
...
n	x_n	x_n^2	x_n^3	...	x_n^{2m}	y_n	$x_n y_n$	$x_n^2 y_n$...	$x_n^m y_n$
Σ										

В последней строке записывают суммы элементов каждого столбца, которые и являются коэффициентами системы (2).

Систему (2) обычно решают методом Гаусса или другими методами решения систем уравнений.

Несколько упростить решение поставленной задачи можно следующим образом: введём обозначения

$$s = x_0^i + x_1^i + \dots + x_n^i \quad (i=0,1,2,\dots)$$

$$t_k = x_0^i y_0 + x_1^i y_1 + \dots + x_n^i y_n \quad (i=0,1,2,\dots)$$

Преобразуя систему (2) и используя введённые обозначения, будем иметь

$$\left. \begin{array}{l} a_0 s_0 + a_1 s_1 + a_2 s_2 + \dots + a_m s_m = t_0 \\ a_0 s_1 + a_1 s_2 + a_2 s_3 + \dots + a_m s_{m+1} = t_1 \\ a_0 s_2 + a_1 s_3 + a_2 s_4 + \dots + a_m s_{m+2} = t_2 \\ \dots \\ a_0 s_m + a_1 s_{m+1} + a_2 s_{m+2} + \dots + a_m s_{2m} = t_m \end{array} \right\} \quad (3) \quad \text{где } s_0 = n+1.$$

Теорема. Если среди точек x_0, x_1, \dots, x_n нет совпадающих и $m \leq n$; то определитель системы (3) отличен от нуля и, следовательно, эта система имеет единственное решение $a_0 = a_0^*, a_1 = a_1^*, \dots, a_m = a_m^*$.

Многочлен $y = a_0 x^m + a_1 x^{m-1} + \dots + a_m$ с такими коэффициентами будет обладать минимальным квадратичным отклонением S_{min} . Если $m=n$, то аппроксимирующий многочлен $Q_m(x)$ совпадает с многочленом Лагранжа для системы точек $x_0, x_1, x_2, \dots, x_m$, причём $S_{min}=0$.

б) $y = A e^{cx}$, где A, c – постоянные величины, x – переменная.

Для упрощения системы (1) это выражение, связывающее переменные x и y , предварительно логарифмируют и заменяют формулой $\lg y = \lg A + c \cdot \lg e \cdot x$. Система (1) примет в этом случае следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} c \cdot \lg e \sum_{k=1}^{k=n} x_k + n \cdot \lg A = \sum_{k=1}^{k=n} \lg y_k, \\ c \cdot \lg e \sum_{k=1}^{k=n} x_k^2 + \lg A \cdot \sum_{k=1}^{k=n} x_k = \sum_{k=1}^{k=n} x_k \cdot \lg y_k. \end{array} \right. \quad (4)$$

Вспомогательная таблица имеет вид

k	x_k	x_k^2	$\lg y_k$	$x_k \cdot \lg y_k$
1	x_1	x_1^2	$\lg y_1$	$x_1 \cdot \lg y_1$
2	x_2	x_2^2	$\lg y_2$	$x_2 \cdot \lg y_2$
...
n	x_n	x_n^2	$\lg y_n$	$x_n \cdot \lg y_n$
Σ				

Из системы (4) определяют C и $\lg A$.

в) $y = Ax^q$, где q — постоянная величина

Эту формулу также предварительно логарифмируют и заменяют следующей: $\lg y = \lg A + q \cdot \lg x$. Система (1) теперь имеет вид

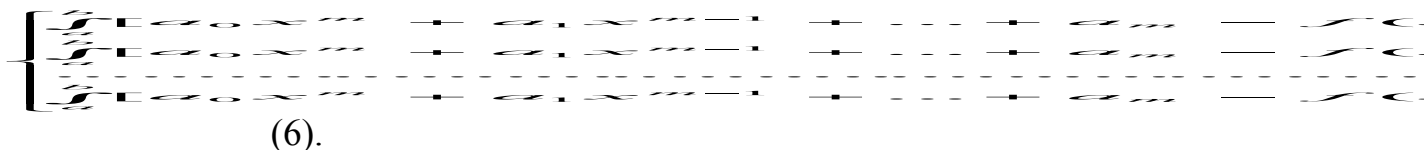
$$\begin{cases} q \sum_{k=1}^{k=n} \lg x_k + n \lg A = \sum_{k=1}^{k=n} \lg y_k, \\ q \sum_{k=1}^{k=n} \lg^2 x_k + \lg A \sum_{k=1}^{k=n} \lg x_k = \sum_{k=1}^{k=n} \lg x_k \cdot \lg y_k. \end{cases} \quad (5)$$

Соответствующим образом изменяется и вспомогательная таблица.

2. Часто возникает необходимость замены наилучшим образом некоторой заданной функции $y = f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом m -й степени: $y \approx a_0 x^m + a_1 x^{m-1} + \dots + a_m$. Применение способа наименьших квадратов в этом случае приводит к отысканию коэффициентов a_0, a_1, \dots, a_m из условия минимума интеграла вида:

$$\int_a^b [\varphi(x) - f(x)]^2 dx = \int_a^b [a_0 x^m + a_1 x^{m-1} + \dots + a_m - f(x)]^2 dx.$$

Необходимые условия минимума этого интеграла приводят к системе $m+1$ уравнений с $m+1$ неизвестными a_0, a_1, \dots, a_m , из которых определяют все эти коэффициенты:



(6).

В заключении обратим внимание на некоторые замечания, относительно применения метода наименьших квадратов.

Замечание 1. При точечном квадратичном аппроксимировании за меру отклонений многочлена $Q_m(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$ (7) от данной функции $y = f(x)$ на множестве точек x_0, x_1, \dots, x_n принимают величину

$$S = \sum_{i=1}^n |Q_m(x_i) - f(x_i)|^2 \quad (8),$$

называемую **квадратичным отклонением**. Метод наименьших квадратов обладает тем преимуществом, что если сумма S квадратов отклонений ε_i мала, то сами эти отклонения также малы по абсолютной величине.

Замечание 2. Недостатком метода наименьших квадратов является громоздкость вычислений. Поэтому к нему прибегают обычно при обработке наблюдений высокой точности, когда нужно получить также весьма точные значения параметров. В этом случае промежуточные вычисления нужно проводить с надлежащим количеством десятичных знаков, так как в противном случае при

неблагоприятных условиях искомые коэффициенты будут иметь мало верных знаков. Но грубые значения этих коэффициентов могут быть получены значительно проще, т.е. применение метода не будет оправдано.

Замечание 3. На практике обычно бывает, что степень многочлена $Q_m(x)$ значительно меньше числа точек x_i ($i=0,1,\dots,n$) и поэтому построение точного интерполяционного многочлена, вообще говоря, невозможно. Таким образом, аппроксимирование функций представляет собой более общий процесс, чем интерполирование.

Пример. Подобрать аппроксимирующий многочлен второй степени $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$ для данных

x	0,78	1,56	2,34	3,12	3,81
y	2,50	1,20	1,12	2,25	4,28

Решение. Вычисления, которые нам нужно произвести, расположим по схеме (для $m=2, n=4$) в таблице 1:

x^0	x	x^2	x^3	x^4	y	xy	x^2y
1	x_0	x_0^2	x_0^3	x_0^4	y_0	x_0y_0	$x_0^2y_0$
1	x_1	x_1^2	x_1^3	x_1^4	y_1	x_1y_1	$x_1^2y_1$
1	x_2	x_2^2	x_2^3	x_2^4	y_2	x_2y_2	$x_2^2y_2$
1	x_3	x_3^2	x_3^3	x_3^4	y_3	x_3y_3	$x_3^2y_3$
1	x_4	x_4^2	x_4^3	x_4^4	y_4	x_4y_4	$x_4^2y_4$
s_0	s_1	s_2	s_3	s_4	t_0	t_1	t_2

Для данного примера получим таблицу 2 (вычисления проводим с тремя десятичными знаками).

Вычисления по способу наименьших квадратов.

Таблица 2.

x^0	x	x^2	x^3	x^4	y	xy	x^2y
1	0,78	0,608	0,475	0,370	2,50	1,950	1,521
1	1,56	2,434	3,796	5,922	1,20	1,872	2,920
1	2,34	5,476	12,813	29,982	1,12	2,621	6,133
1	3,12	9,734	30,371	94,759	2,25	7,020	21,902
1	3,81	14,516	55,306	210,717	4,28	16,307	62,128
5	11,61	32,768	102,761	341,750	11,35	29,770	94,604

Отсюда система для определения коэффициентов a_0, a_1, a_2 имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} 5a_0 + 11,61a_1 + 32,768a_2 &= 11,35 \\ 11,61a_0 + 32,768a_1 + 102,761a_2 &= 29,770 \\ 32,768a_0 + 102,761a_1 + 341,750a_2 &= 94,604 \end{aligned} \right\}$$

Решив систему, будем иметь: $a_0=5,045$; $a_1=-4,043$; $a_2=1,009$.

Следовательно, искомый многочлен имеет вид: $y=5,045-4,043x+1,009x^2$.

Сравним исходные значения для y с соответствующими значениями \tilde{y} . Соответствующие результаты приведём в таблице 3.

Погрешность вычисления по способу наименьших квадратов.

Таблица 3.

x	y	\tilde{y}	$\tilde{y} - y$
0,78	2,50	2,505	+0,005
1,56	1,20	1,194	-0,006
2,34	1,12	1,110	-0,010
3,12	2,25	2,252	+0,002

3,81	4,28	4,288	+0,008
------	------	-------	--------

§13. Нормальная система определения коэффициентов для метода наименьших квадратов.

Пусть известен вид эмпирической формулы

$$y = \tilde{f}(x_i, a_1, a_2, \dots, a_m) \quad (1)$$

Согласно методу наименьших квадратов наилучшими коэффициентами a_1, a_2, \dots, a_m считаются те, для которых сумма квадратов отклонений

$$S(a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n (\tilde{f}(x_i; a_1, a_2, \dots, a_m) - y_i)^2 \quad (2),$$

будет минимальной. Отсюда, используя необходимые условия экстремума функции нескольких переменных, получаем так называемую нормальную систему для определения коэффициентов a_i ($i = \overline{1, n}$)

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 0, \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0, \dots, \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0 \quad (3).$$

Если система (3) имеет единственное решение, то оно будет искомым.

Утверждение. Система (3) упрощается, если эмпирическая функция $\tilde{f}(x_i; a_1, a_2, \dots, a_m)$ является линейной относительно параметров a_1, a_2, \dots, a_m .

Доказательство:

Пусть $\tilde{f}(x_i; a_1, a_2, \dots, a_m) = \varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + \dots + a_m\varphi_m(x_i)$, тогда будем иметь:

$$S(a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n [a_1\varphi_1(x_i) + \dots + a_m\varphi_m(x_i) - Y_i]^2,$$

где $Y_i = y_i - \varphi_0(x_i)$.

$$\text{Отсюда, } \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\partial S}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^n \varphi_1(x_i) [a_1\varphi_1(x_i) + \dots + a_m\varphi_m(x_i) - Y_i] = 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial S}{\partial a_2} = \sum_{i=1}^n \varphi_2(x_i) [a_1\varphi_1(x_i) + \dots + a_m\varphi_m(x_i) - Y_i] = 0 \\ \dots \\ \frac{1}{2} \frac{\partial S}{\partial a_m} = \sum_{i=1}^n \varphi_m(x_i) [a_1\varphi_1(x_i) + \dots + a_m\varphi_m(x_i) - Y_i] = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Введя сокращённые обозначения

$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=1}^n \varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)$ и $(\varphi_j, Y) = \sum_{i=1}^n \varphi_j(x_i)Y_i$ систему (4) можно записать в виде нормальной системы

$$\left. \begin{aligned} a_1(\varphi_1, \varphi_1) + a_2(\varphi_1, \varphi_2) + \dots + a_m(\varphi_1, \varphi_m) &= (\varphi_1, Y) \\ \dots \\ a_1(\varphi_m, \varphi_1) + a_2(\varphi_m, \varphi_2) + \dots + a_m(\varphi_m, \varphi_m) &= (\varphi_m, Y) \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

В частном случае, если эмпирическая формула представляет многочлен (для удобства обозначений изменим нумерацию коэффициентов a_i)

$$Y = a_0 + a_1x + \dots + a_mx^m, \text{ то } \varphi_j(x) = x^j \text{ (} j = \overline{0, m}\text{)}.$$

Отсюда: $(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=1}^n x_i^{j+k} = [x^{j+k}]$, $(\varphi_j, Y) = (\varphi_j, y) = \sum_{i=1}^n x_i^j y_i = [x^j, y]$.

Следовательно, нормальная система (5) будет иметь вид:

$$\left. \begin{aligned} a_0 n + a_1 [x] + a_2 [x^2] + \dots + a_m [x^m] &= [y], \\ a_0 [x] + a_1 [x^2] + a_2 [x^3] + \dots + a_m [x^{m+1}] &= [xy], \\ \text{-----} \\ a_0 [x^m] + a_1 [x^{m+1}] + a_2 [x^{m+2}] + \dots + a_m [x^{2m}] &= [x^m y] \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Пример. Используя метод наименьших квадратов, вывести эмпирическую формулу для табличной функции $Q=f(x)$, Q -количество вещества в процентах, оставшегося в системе через t минут от начала химической реакции.

t	7	12	17	22	27	32	37
Q	83,7	72,9	63,2	54,7	47,5	41,4	36,3

Пусть $y=ax^2+bx+c$. Для вычисления коэффициентов нормальной системы введем таблицу.

t^0	t^1	t^2	t^3	t^4	Q	tQ	t^2Q
1	7	49	343	2401	83,7	585,9	4101,3
1	12	144	1728	20736	72,9	874,8	10497,6
1	17	289	4913	83521	63,2	1074,4	18264,8
1	22	484	10648	234256	54,7	1203,4	26474,8
1	27	729	19683	531441	45,5	1282,5	34627,5
1	32	1024	32768	10485576	41,4	1324,8	42393,6
1	37	1364	50653	1874161	36,3	1343,1	49694,7
7	154	4088	120736	3795092	399,7	7688,9	186054,3

Тогда имеем следующую систему нормальных уравнений:

$$\begin{cases} 4088a + 154b + 7c = 399,7 \\ 120736a + 4088b + 154c = 7688,9 \\ 3795092a + 120736b + 4088c = 186054,3 \end{cases}$$

Решив эту систему, получим: $a = 0,023381$; $b = -2,6066$, $c = 100,791$.

Следовательно, искомая эмпирическая формула запишется так:

$$\bar{Q} = 0,02338 t^2 - 2,6066t + 100,791$$

Следующая таблица показывает согласованность полученной эмпирической формулы с опытными данными:

i	Q	\bar{Q} , вычисленное по формуле $\bar{Q} = 0,02338 t^2 - 2,6066t + 100,791$	Отклонение $\varepsilon = Q - \bar{Q}$
1	83,7	83,69	+0,01
2	72,9	72,88	+0,02
3	63,2	63,24	-0,04
4	54,7	54,76	-0,06
5	47,5	47,46	+0,04
6	41,4	41,32	+0,08
7	36,3	36,36	-0,06

Имеем $\sum_{i=1}^7 \varepsilon_i^2 = 0,0173$.

ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ.

§14. Вычисление производной по её определению.

Пусть функция $y=f(x)$ определена в некоторой окрестности точки x_0 и имеет производную в этой точке, т.е. существует предел отношения приращения функции Δy к приращению аргумента Δx при стремлении Δx к нулю

$$y'(x_0) = f'(x_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}, \quad \Delta x = x - x_0, \quad \Delta y = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0) \quad (1).$$

Значение производной в точке x_0 можно получить, переходя к пределу в (1) по последовательности целых чисел n и полагая, например $\Delta x = (\Delta x)_n = \frac{(\Delta x)_0}{\alpha^n}$. Здесь $(\Delta x)_0$ - некоторое начальное приращение аргумента, α - некоторое число, большее 1, $n=0, 1, 2, \dots$. Тогда значение производной функции $f(x)$ в точке x_0 запишется так: $y'(x_0) = f'(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(\Delta y)_n}{(\Delta x)_n}$, $(\Delta y)_n = f(x_0 + (\Delta x)_n) - f(x_0)$.

Отсюда получим приближённое равенство $y'(x_0) \approx \frac{(\Delta y)_n}{(\Delta x)_n}$ (2).

Для функции $y=f(x)$, имеющей непрерывную производную до второго порядка включительно в окрестности точки x_0 , точность приближения производной соотношением (2) можно установить, воспользовавшись формулой Тейлора

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{2} f''(\xi)\Delta x^2, \quad \xi \in (x_0, x). \text{ Тогда}$$

$$\left| f'(x) - \frac{f(x) - f(x_0)}{\Delta x} \right| \leq \frac{M}{2} \Delta x, \quad M = \max_{x_0 \leq \xi \leq x} |f''(\xi)| \text{ и окончательно имеем}$$
$$\left| y'(x_0) - \frac{(\Delta y)_n}{(\Delta x)_n} \right| \leq \frac{M}{2} (\Delta x)_0 \alpha^{-n}, \quad M = \max_{x_0 \leq \xi \leq x} |f''(\xi)|.$$

Замечание. Для достижения заданной точности ε приближения производной при определённом числе вычислений можно использовать неравенство

$$\left| \frac{(\Delta y)_n}{(\Delta x)_n} - \frac{(\Delta y)_{n-1}}{(\Delta x)_{n-1}} \right| < \varepsilon \quad (3).$$

Пример. Вычислить производную функции $y=\sin x$ в точке $x_0 = \frac{\pi}{3}$ с точностью $\varepsilon=10^{-3}$ ($\pi/3 \approx 1,047198$).

Решение:

Пусть $(\Delta x)_0 = 0,1$, $\alpha = 10$, $(\Delta x)_n = 0,1 \cdot 10^{-n}$, тогда $(\Delta y)_n = \sin\left(\frac{\pi}{3} + 0,1 \cdot 10^{-n}\right) - \sin \frac{\pi}{3}$.

Определим приближённое значение производной:

$$y'\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx \frac{(\Delta y)_n}{(\Delta x)_n} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3} + 0,1 \cdot 10^{-n}\right) - \sin \frac{\pi}{3}}{0,1 \cdot 10^{-n}} \quad (n=0,1,2,\dots).$$

Найдём отношения, аппроксимирующие производную

$$\frac{(\Delta y)_0}{(\Delta x)_0} = 0,45590189, \quad \frac{(\Delta y)_1}{(\Delta x)_1} = 0,49566158, \quad \frac{(\Delta y)_2}{(\Delta x)_2} = 0,49956690,$$
$$\frac{(\Delta y)_3}{(\Delta x)_3} = 0,49995670; \quad \left| \frac{(\Delta y)_3}{(\Delta x)_3} - \frac{(\Delta y)_2}{(\Delta x)_2} \right| = 0,00038979390 < \varepsilon.$$

Итак, начиная с третьего приближения в соответствии с оценкой (3) получаем искомое приближение производной данной функции $y' \left(\frac{\pi}{3} \right) = \cos \left(\frac{\pi}{3} \right) = 0,5$ с точностью, не меньшей, чем заданное $\varepsilon=0,001$.

§15. Конечно-разностные аппроксимации производных.

Пусть отрезок $[a, b]$ разбит на $n, n \geq 2$ равных частей точками $x_i, a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$. Разность между соседними значениями аргумента постоянна, то есть шаг $h = x_i - x_{i-1}, i = \overline{1, n}$. Пусть на отрезке $[a, b]$ определена функция $y=f(x)$, значения которой в точках x_i равны $y_i=f(x_i), i=0, 1, \dots, n$.

Запишем выражения для первой производной функции в точке x_i с помощью отношения конечных разностей:

a) аппроксимация с помощью разностей вперёд (правых разностей) $y'(x_i) \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}$,

$$\Delta x_i = \Delta x_{i+1} - x_i = h, \quad \Delta y_i = y_{i+1} - y_i, \quad y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad i=0, 1, \dots, n-1.$$

b) аппроксимация с помощью разностей назад (левых разностей)

$$y'(x_i) \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}, \quad \Delta x_i = x_{i-1} - x_i = -h, \quad \Delta y_i = y_{i-1} - y_i, \quad y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, \quad i = \overline{1, n}.$$

c) аппроксимация с помощью центральных разностей (точка x_i является центром системы точек x_{i-1}, x_i, x_{i+1}).

$$y'(x_i) \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}, \quad \Delta x_i = x_{i+1} - x_{i-1} = 2h, \quad \Delta y_i = y_{i+1} - y_{i-1}, \quad y'(x_i) \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}, \quad i=1, \dots, n-1.$$

Замечание 1. Аппроксимация производной с помощью центральных разностей представляет собой среднее арифметическое производных с помощью левых и правых разностей в точках $x_i, i = \overline{1, n-1}$.

Замечание 2. Соотношения (a) и (c) не позволяют вычислить производную в точке $x_n=b$, а (b) и (c) - в точке $x_0=a$.

Теорема. Для функции $y=f(x)$, имеющей непрерывную производную до второго порядка включительно, погрешность аппроксимации производных разностями вперёд и назад имеет один и тот же порядок $O(h)$, а погрешность аппроксимации центральными разностями для функции $y=f(x)$, имеющей непрерывную производную до третьего порядка включительно, имеет порядок $O(h^2)$.

Доказательство:

Приближённое значение производной второго порядка в точке x_i выразим через значение функции y_{i-1}, y_i, y_{i+1} . Для этого представим вторую производную с

помощью правой разности: $y''(x) \approx \frac{\Delta y'_i}{\Delta x_i}, \quad \Delta x_i = x_{i+1} - x_i = h, \quad \Delta y'_i = y'_{i+1} - y'_i,$

а производные первого порядка y'_{i+1} и y'_i - с помощью левых разностей:

$$y'_{i+1} = y'(x_{i+1}) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad y'_i = y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad \text{и окончательно получим}$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (1).$$

Погрешность последней аппроксимации имеет порядок $O(h^2)$ для функции $y=f(x)$, имеющей непрерывную производную до четвёртого порядка включи-

тельно на отрезке $[a, b]$. Естественно, представление (1) с помощью конечных разностей позволяет вычислить значения второй производной только во внутренних точках отрезка.

§16. Использование интерполяционных многочленов Лагранжа для формул численного дифференцирования.

Пусть функция $y=f(x)$ определена на отрезке $[a, b]$ и в точках x_i ($i=0, 1, 2, \dots, n$) принимает значения $y_i=f(x_i)$.

Разность между соседними значениями аргумента x_i постоянна и является шагом $h=x_i-x_{i-1}$ ($i=\overline{1, n}$) разбиения отрезка на n частей, причём $a=x_0$ и $b=x_n$.

Найдём аппроксимации производных первого и второго порядков с помощью значений функции y_i в узловых точках x_i с погрешностью одного и того же порядка в зависимости от шага h , причём этот порядок не ниже, чем достигаемый при конечно-разностной аппроксимации производных для того же шага.

Для того, чтобы выразить значения производных через значения функции y_i в узлах интерполяции x_i , построим интерполяционный многочлен Лагранжа $L_m(x)$ степени m , удовлетворяющий условиям: $L_m(x_k)=f(x_k)=y_k$, $k=i, i+1, \dots, i+m$; $i+m \leq n$. Многочлен $L_m(x)$ интерполирует функцию $f(x)$ на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$. Дифференцируя многочлен $L_m(x)$, получаем значения производных в точках x_k , $k=i, i+1, \dots, i+m$.

Если $m=1$, то $L_1(x)$ -линейная функция, график которой проходит через точки (x_i, y_i) и (x_{i+1}, y_{i+1}) . Тогда $L_1(x) = -y_i \frac{x-x_{i+1}}{h} + y_{i+1} \frac{x-x_i}{h}$

$$y'_i = f'(x_i) \approx L'_1(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad y'_{i+1} = f'(x_{i+1}) \approx L'_1(x).$$

Если $m=2$, график интерполяционного многочлена Лагранжа $L_2(x)$ -парабола, проходящая через три точки (x_i, y_i) , (x_{i+1}, y_{i+1}) , (x_{i+2}, y_{i+2}) . Вычислим первую и вторую производные многочлена $L_2(x)$ на отрезке (x_i, x_{i+2}) :

$$L_2(x) = \frac{1}{2h^2} [y_i(x-x_{i+1})(x-x_{i+2}) - 2y_{i+1}(x-x_i)(x-x_{i+2}) + y_{i+2}(x-x_i)(x-x_{i+1})]$$

$$L'_2(x) = \frac{1}{2h^2} [y_i(2x-x_{i+1}-x_{i+2}) - 2y_{i+1}(2x-x_i-x_{i+2}) + y_{i+2}(2x-x_i-x_{i+1})]$$

$$L''_2(x) = \frac{1}{h^2} (y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}).$$

Первая и вторая производные многочлена Лагранжа $L_2(x)$ в точках x_i, x_{i+1}, x_{i+2} являются приближениями производных соответствующих функции $f(x)$ в этих точках:

$$\left. \begin{aligned} y'_i = f'(x_i) \approx L'_2(x_i) &= \frac{1}{2h} (-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}) \\ y'_{i+1} = f'(x_{i+1}) \approx L'_2(x_{i+1}) &= \frac{1}{2h} (-y_i + y_{i+2}) \\ y'_{i+2} = f'(x_{i+2}) \approx L'_2(x_{i+2}) &= \frac{1}{2h} (y_i - 4y_{i+1} + 3y_{i+2}) \end{aligned} \right\} \quad (1).$$

$$y''_i = y''_{i+1} = y''_{i+2} \approx L''_2(x) = \frac{1}{h^2} (y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}) \quad (2).$$

Если функция $f(x)$ на отрезке $[x_i, x_{i+2}]$ имеет непрерывную производную до третьего порядка включительно, то справедливо представление функции в

виде суммы $f(x)=L_2(x)+R_2(x)$ (3), где $R_2(x)$ -остаточный член интерполяционной формулы, причём

$$R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_i)(x-x_{i+1})(x-x_{i+2}), \quad \xi \in (x_i, x_{i+2})$$

В этом случае можно дать оценку погрешности приближений производных соотношениями (1) и (2). Дифференцируя (3), получим

$$f'(x) = L_2'(x) + R_2'(x) \quad (4)$$

$$f''(x) = L_2''(x) + R_2''(x) \quad (5)$$

Здесь

$$R_2'(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}[(x-x_{i+1})(x-x_{i+2}) + (x-x_i)(x-x_{i+2}) + (x-x_i)(x-x_{i+1})],$$

$$\xi \in (x_i, x_{i+2}) \quad (6)$$

$$R_2''(x) = \frac{f''''(\xi)}{3!}[(x-x_i) + (x-x_{i+1}) + (x-x_{i+2})],$$

$$\xi \in (x_i, x_{i+2}), \quad (7)$$

Погрешности при вычислении производных в точках x_i, x_{i+1}, x_{i+2} определяются следующими значениями остатков:

$$R_2'(x_i) = -2R_2'(x_{i+1}) = R_2'(x_{i+2}) = \frac{1}{3}h^2 f'''(\xi) \quad (8)$$

$$R_2''(x_i) = -hf''''(\xi), \quad R_2''(x_{i+1}) = 0, \quad R_2''(x_{i+2}) = hf''''(\xi) \quad (9)$$

Следствие 1. Таким образом, равенство (8) показывает, что погрешности аппроксимации первой производной $f'(x)$ с помощью формул (1) имеют один и тот же порядок $O(h^2)$ и естественна следующая рекомендация по их применению на отрезке $[a, b]$ в точках $x_i, i=0,1,2,\dots, n$ при $n \geq 2$

$$y_0' \approx \frac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2),$$

$$y_i' \approx \frac{1}{2h}(-y_{i-1} + y_{i+1}) \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (10)$$

$$y_n' \approx \frac{1}{2h}(y_{n-2} - 4y_{n-1} + 3y_n).$$

Следствие 2. Из равенства (9) следует, что приближение второй производной с помощью формулы (2) имеет различный порядок в зависимости от h в разных точках: в точках x_i и x_{i+2} имеет погрешность порядка h , а в точке x_{i+1} порядок погрешности выше ($R_2''(x_{i+1}) = 0$).

Пример. Значения функции $y = \sin x$ определены таблицей

x	0	$\pi/6$	$\pi/3$
$\sin x$	0	0,5	0,866

с помощью формул (1) и (2) приближения найти $y'(0)$ и $y''(0)$ и оценить погрешность результатов вычислений.

Решение:

$$y_0' \approx \frac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2) = \frac{3}{\pi}(-3 \cdot 0 + 4 \cdot 0,5 - 0,866) \approx 1,08$$

$$R_2'(0) = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{6}\right)^2 \cdot f'''(\xi), \quad 0 < \xi < \frac{\pi}{3}.$$

Так как $f'(x) = \cos x$, $f''(x) = -\sin x$, $f'''(x) = -\cos x$, $|f'''(x)| < 1$,

то $|R_2'(0)| < \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{6}\right)^2 \approx 0,09$.

Итак $y'(0) \approx 1,08 \pm 0,09$ (точное значение $y'(0) = \cos 0 = 1$). Теперь воспользуемся формулой (2):

$$y_0'' \approx \frac{1}{h^2}(y_0 - 2y_1 + y_2) = \frac{-1 + 0,866}{\pi^2} \cdot 36 \approx -0,489$$

$$R_2''(0) = -\frac{\pi}{6} f'''(\xi), \quad |R_2''(0)| \leq \frac{\pi}{6} \approx 0,52.$$

Как видим, для лучшей оценки производной второго порядка необходимо увеличить число узловых точек и выбрать меньший шаг.

ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ.

Для приближённого вычисления определённого интеграла $\int_a^b f(x) dx$ разобьём отрезок интегрирования $[a, b]$ на n равных частей точками $x_0 = a, x_1 = x_0 + h, \dots, x_{i+1} = x_i + h, \dots, x_n = b$

(h - шаг разбиения, $\frac{b-a}{n} = h$). Значения функции $f(x)$ в точках разбиения x_i обозначим y_i . Непрерывная подинтегральная функция $y = f(x)$ заменяется **сплайном** (кусочно-полиномиальной функцией) $S(x)$, аппроксимирующей данную функцию. Интегрируя функцию на отрезке $[a, b]$, придём к некоторой формуле численного интегрирования (квадратурной формуле).

В зависимости от функции $S(x)$, аппроксимирующей подинтегральную функцию, будем получать различные квадратурные формулы.

§17. Формула прямоугольников.

Если на каждой части $[x_{i-1}, x_i], i = \overline{1, n}$ деления отрезка $[a, b]$ функцию $f(x)$ заменить функцией, принимающей постоянное значение, равное, например, значению функции $f(x)$ в серединной точке i -й части, то есть $x_{i-\frac{1}{2}} = \frac{x_{i-1} + x_i}{2}$, то функция $S(x)$ будет иметь ступенчатый вид:

$$S(x) = \sum_{i=1}^n S_i(x) = \sum_{i=1}^n y_{i-\frac{1}{2}} = \sum_{i=1}^n f(x_{i-\frac{1}{2}}), x \in (x_{i-1}, x_i), i = \overline{1, n}.$$

В этом случае $\int_a^b S(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} S_i(x) dx = \sum_{i=1}^n h y_{i-\frac{1}{2}}$ и получаем квадратурную формулу прямоугольников

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b S(x) dx = h(y_{\frac{1}{2}} + y_{\frac{3}{2}} + \dots + y_{i-\frac{1}{2}} + \dots + y_{n-\frac{1}{2}}) \quad (1).$$

Пример. Найти приближённое значение интеграла $\int_0^1 e^{x^2} dx$ по формуле прямоугольников.

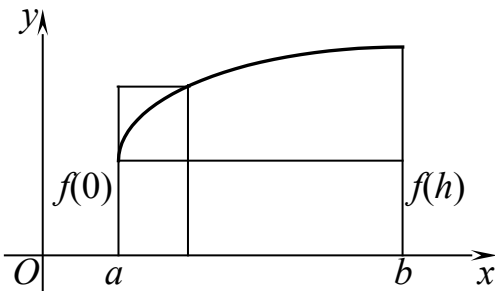
Решение. Пусть $n=10$. Тогда $x_0=0, x_1 = \frac{1}{10}, x_2 = \frac{1}{5}, \dots, x_{10}=1$.

$$x_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{20}, x_{\frac{3}{2}} = \frac{3}{20}, x_{\frac{5}{2}} = \frac{5}{20}, \dots, x_{\frac{9}{2}} = \frac{19}{20}, y_{\frac{1}{2}} = e^{\frac{1}{400}}, y_{\frac{3}{2}} = e^{\frac{9}{400}}, y_{\frac{5}{2}} = e^{\frac{25}{400}}, \dots$$

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx \frac{1}{10} \left(e^{\frac{1}{400}} + e^{\frac{9}{400}} + \dots + e^{\frac{381}{400}} \right) = \frac{e^{\frac{1}{400}} (1 + e^9 + \dots + e^{381})}{10}$$

Погрешность квадратурной формулы оценивается величиной остаточного члена $R(h)$, зависящего от шага разбиения h (или от числа разбиений n).

$$R(h) = \left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b S(x) dx \right| \quad \delta(x) = \int_0^h f(x) dx - f(0)h$$



На одном (первом) отрезке разбиения имеем: $\delta'(h) = f(h) - f(0) = f'(c) \cdot h$, где $0 \leq c \leq h$.

Если $m_1 \leq f'(x) \leq M_1$, то $m_1 h \leq \delta'(h) \leq M_1 h$. Проинтегрируем неравенство на отрезке $[0, h]$:

$$m_1 \frac{h^2}{2} \leq \delta(h) - \delta(0) \leq M_1 \frac{h^2}{2}$$

Но легко заметить, что $\delta(0) = 0$, тогда $m_1 \frac{h^2}{2} \leq \delta(h) \leq M_1 \frac{h^2}{2}$, откуда (переходя от h

к x) получим: $|\delta(x)| \leq \mu_1 \frac{h^2}{2}$, где $\mu_1 = \sup_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$, то есть, уже на всем отрезке $[a, b]$.

Таким образом получаем общую погрешность на $[a, b]$

$$\Delta(h) \leq \mu_1 \frac{h^2}{2} n = \frac{\mu_1 (b-a)}{2} h \quad (\text{так как } hn = b - a).$$

§18. Формула трапеций.

Если функцию $f(x)$ на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ заменить её линейной интерполяцией по точкам $(x_{i-1}, y_{i-1}), (x_i, y_i)$ то получим непрерывную кусочно-линейную функцию

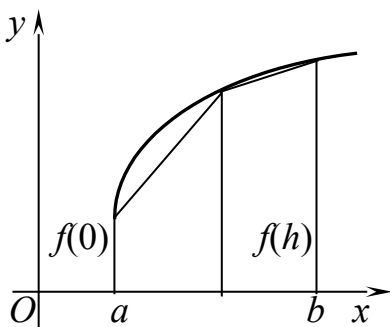
$$S(x) = S_i(x) = y_{i-1} \frac{x_i - x}{h} + y_i \frac{x - x_{i-1}}{h}, x \in (x_{i-1}, x_i) \quad i = \overline{1, n}.$$

Здесь $y_i = f(x_i)$. Графиком этой функции является ломаная линия. В этом случае

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} S_i(x) dx = \sum_{i=1}^n h \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \quad \text{и получаем квадратурную формулу}$$

трапеций: $\int_a^b S(x) dx = \frac{y_0 + y_1}{2} h + \frac{y_1 + y_2}{2} h + \dots + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} h$ таким образом:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b S(x) dx = h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + \dots + y_{n-1} \right) \quad (1).$$



Оценка погрешности этой формулы:

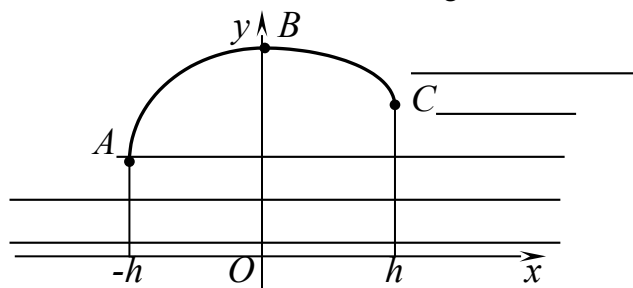
$$\delta(h) = \int_0^h f(x) dx - \frac{f(0) + f(h)}{2} h$$

$$\delta'(h) = f(h) - \frac{h}{2} f'(h) - \frac{f(0) - f(h)}{2} = \frac{f(h) - f(0)}{2} - \frac{h}{2} f'(h)$$

$$\delta''(h) = \frac{f'(h)}{2} - \frac{f'(h)}{2} - \frac{hf''(h)}{2} = -\frac{h}{2} f''(h).$$

$|\delta(h)| \leq \mu_2 \frac{h}{2}$, где $\mu_2 = \sup_{[a,b]} f''(h)$, а $|\delta'(h)| \leq \mu_2 \frac{h^2}{4}$, тогда $|\delta(h)| \leq \mu_2 \frac{h^3}{12}$, а общая погрешность на $[a, b]$ тогда равна $|\Delta(h)| \leq \mu_2 \frac{h^3}{12} n = \mu_2 \frac{(b-a)h^2}{12}$.

§19. Формула Симпсона (парабол).



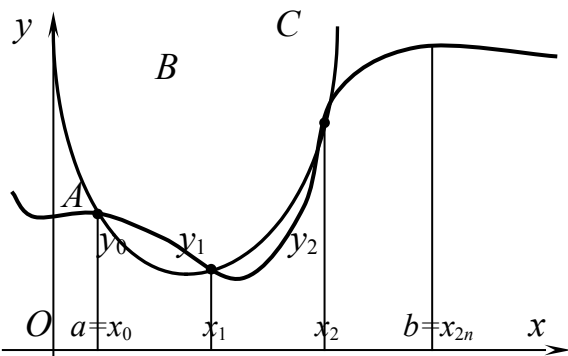
Рассмотрим точки $A(-h, y_{-1})$, $B(0, y_0)$, $C(h, y_1)$. Уравнение параболы, проходящей через эти точки: $y = a + bx + cx^2$

$$(1) \quad \begin{cases} y_{-1} = a - bh + ch^2 \\ y_0 = a \\ y_1 = a + bh + ch^2 \end{cases}$$

Площадь параболы, проходящей через точки A , B , и C вычисляется по формуле: $S = \int_{-h}^h (a + bx + cx^2) dx = \left(ax + \frac{bx^2}{2} + \frac{cx^3}{3} \right) \Big|_{-h}^h = 2ah + \frac{2}{3}ch^3$ (2).

Из (1), сложив первое и третье равенства, найдём: $y_{-1} + y_1 = 2y_0 + 2ch^2$, откуда $2ch^2 = y_{-1} - 2y_0 + y_1$ и тогда $S = 2y_0h + \frac{y_{-1} - 2y_0 + y_1}{3}h = \frac{h}{3}(y_{-1} + 4y_0 + y_1)$.

Рассмотрим теперь функцию $y = f(x)$, заданную на $[a, b]$. Требуется вычислить $\int_a^b f(x) dx$. Разобьём отрезок $[a, b]$ на $2n$ отрезков $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{2n} = b$. Заменяем дугу кривой $y = f(x)$ (ABC) параболой, проходящей через эти точки и тогда



площадь криволинейной трапеции, ограниченной сверху параболой, будет вычисляться по формуле: $S_1 = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$.

Вычислим площадь следующей криволинейной трапеции на $[x_2, x_4]$:

$S_2 = \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4)$ и так далее. Искомая площадь будет приближённо равна:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2 + y_2 + 4y_3 + y_4 + \dots + y_{2n-2} + 4y_{2n-1} + y_{2n}) = \frac{h}{3}[y_0 + y_{2n} + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-1})]$$

Оценка погрешности для формулы Симпсона (без вывода):

$$\Delta(h) \leq \mu_4 \frac{(b-a)h^4}{180}$$

Пример 1. Найти приближённое значение интеграла $\int_0^1 e^{x^2} dx$ с помощью квадратурных формул прямоугольников, трапеций и Симпсона, если отрезок $[0, 1]$ разбит на 10 равных частей.

Решение: $f(x) = e^{x^2}$, $f'(x) = 2xe^{x^2}$, $f''(x) = 2e^{x^2} + 4x^2e^{x^2}$,

$$f'''(x) = 4xe^{x^2} + 8xe^{x^2} + 8x^3e^{x^2}, f^{(4)}(x) = \left[4xe^{x^2}(3 + 2x^2)\right]' = 4e^{x^2}(3 + 12x^2 + 4x^4)$$

$$\max_{[0,1]} |f'(x)| = \max_{[0,1]} 2xe^{x^2} = 2e,$$

$$\max_{[0,1]} |f''(x)| = \max_{[0,1]} 2e^{x^2}(1 + 2x^2) = 6e.$$

$$\max_{[0,1]} |f^{(4)}(x)| = \max_{[0,1]} 4e^{x^2}(3 + 12x^2 + 4x^4) = 76e$$

При $n=10$ получим следующие оценки величин погрешности результатов:

$$\Delta_{\text{прям}} \leq \frac{2e}{2 \cdot 10} = \frac{e}{10} = 0,0731;$$

$$\Delta_{\text{трапец}} = \frac{6e}{12 \cdot 100} = \frac{e}{200} = 0,0136$$

$$\Delta_{\text{параб}} \leq \frac{76e}{180 \cdot 10^4} = 0,0001$$

Пример 2. Вычислить интеграл $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \text{arctg}|_0^1 = \frac{\pi}{4}$. по формуле Симпсона.

на.

Решение: Возьмём $h = \frac{1}{2}$.

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \approx \frac{h}{3}(y_0 + y_1 + y_2) = \frac{1}{6} \left(1 + \frac{4}{1+4} + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{6} \left(1 + \frac{16}{5} + \frac{1}{2}\right) =$$

$$= \frac{1}{6}(1 + 3,2 + 0,5) = \frac{4,7}{6} = 0,7833. \text{ Тогда } \pi \approx 4 \cdot 0,7833 = 3,13.$$

§20. Приемы приближенного вычисления несобственных интегралов.

Рассмотрим интегралы вида:

$$\int_0^{\infty} f(x) dx \quad (1),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx \quad (2),$$

$$\int_a^b f(x) dx \quad (3).$$

Для случая (3) функция $f(x)$ имеет бесконечный разрыв либо в точке $x=a$, либо $x=b$, либо $x=c \in [a, b]$. Вычисляемые несобственные интегралы при этом предполагаются сходящимися.

Одним из источников получения численных значений несобственных интегралов (1) и (2) являются квадратурные формулы вида: $\int_a^b p(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ (Гаусса-Кристоффеля). Для их применения нужно выделить под интегралом подходящую весовую функцию и воспользоваться соответствующей квадратурой.

Тогда для интеграла (1): $\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^{\infty} e^{-x} e^x f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i e^{x_i} f(x_i)$ - формула

Лагерра, где $A_i = \left[\frac{(n-1)!}{nL_{n-1}(x_i)} \right]^2 x_i$, L_{n-1} - $n-1$ -ый многочлен Лагерра.

Аналогично, для интеграла (2) имеем: $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} e^{x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i e^{x_i^2} f(x_i)$ -

формула Эрмита, где $A_i = \frac{2^{n-1}(n-1)!\sqrt{\pi}}{nH_{n-1}^2(x_i)}$, H_{n-1} - $n-1$ -ый многочлен Эрмита.

К вычислению интегралов с бесконечной верхней границей можно применять различные формулы численного интегрирования, пользуясь равенством,

определяющим несобственный интеграл: $\int_a^{+\infty} f(x)dx = \lim_{b \rightarrow +\infty} \int_a^b f(x)dx$. Оно позволяет считать, что для достаточно больших значений b выполняется $\int_a^{+\infty} f(x)dx \approx \int_a^b f(x)dx$ и вычислять интеграл $\int_a^b f(x)dx$ с помощью известных квадратурных правил. Предполагая исходный интеграл абсолютно сходящимся, величину абсолютной погрешности, то есть $\left| \int_b^{+\infty} f(x)dx \right|$, за счет увеличения b можно сделать как угодно малой.

В случае (2) без ограничения общности можно считать, что подынтегральная функция имеет особенность на границе промежутка интегрирования, то есть если точкой c , где $f(x)$ обращается в бесконечность, окажется внутренняя точка интервала (a, b) , то данный интеграл можно представить символически как $\int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx$. Также без потери общности, достаточно рассматривать

$\int_1^{-1} f(x)dx$. Но к таким интегралам, в которых подынтегральная функция имеет особыми точками значения -1 и (или) 1 , можно применить квадратурную

формулу Эрмита (Мелера) в виде $\int_1^{-1} f(x)dx = \int_1^{-1} \frac{\sqrt{1-x^2} f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{n} \sum_{i=1}^n \sqrt{1-x_i^2} f(x_i)$

или более общую формулу, где параметры $\alpha > -1$, $\beta > -1$ желательно подобрать так, чтобы функция $\varphi(x) := (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} f(x)$ была как можно более гладкой. Такой прием при вычислении несобственных интегралов называют **мультипликативным выделением особенностей**. Существует несколько специальных квадратурных формул, позволяющих "загнать" в весовые функции различные типы особенностей: степенную, логарифмическую и другие.

Применяются и другие приемы вычисления несобственных интегралов. Надо отметить, что иногда достаточно сделать удачную замену переменной, чтобы преобразовать несобственный интеграл к более подходящему для вычисления виду.

§21. Приближенное вычисление кратных интегралов.

1. Аналог формул прямоугольников.

а) Рассмотрим замкнутую область D , ограниченную линиями $x=a$, $x=b$, $y = \varphi(x)$, $y = \psi(x)$, где $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ - непрерывные на отрезке $[a, b]$ функции, причем $\varphi(x) \leq \psi(x)$. Разделим область D на n частей линиями

$$y = \varphi(x) + \frac{j}{n} [\psi(x) - \varphi(x)] \quad (j=0, 1, 2, \dots, n). \quad (1)$$

Далее разобьем отрезок $[a, b]$ на m равных частей $a=x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$ и через эти точки проведем прямые параллельные оси Oy :

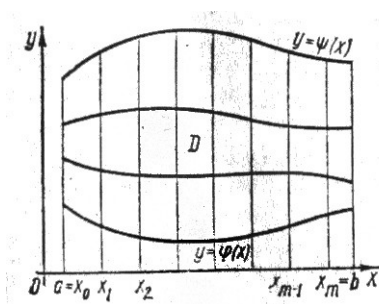
$$x = x_i \quad (i=0, 1, 2, \dots, m). \quad (2)$$

Двумя семействами линий (1) и (2) область D разделится на mn криволинейных четырехугольников с вершинами в точках $P_{ij}(x_i; y_{ij})$, $P_{i+1,j}(x_{i+1}; y_{i+1,j})$, $P_{i,j+1}(x_i; y_{i,j+1})$, $P_{i+1,j+1}(x_{i+1}; y_{i+1,j+1})$; $i=0, 1, 2, \dots, m; j=0, 1, 2, \dots, n$. При фиксиро-

ванном $i(0 \leq i \leq m)$ длина вертикальной стороны четырехугольника не зависит от j и составляет

$$|P_{i,j} P_{i,j+1}| = \frac{\psi(x_i) - \varphi(x_i)}{n}; \quad i=0, 1, 2, \dots, n.$$

Обозначим площадь криволинейного четырехугольника, изображенного на рисунке, через $\Delta\omega_{ij}$. Эта площадь вычисляется по формуле



$$\Delta\omega_{ij} = \frac{1}{n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} [\psi(x) - \varphi(x)] dx. \quad (3)$$

Из равенства (3) следует, что значение $\Delta\omega_{ij}$ от j не зависит. Учитывая это, обозначим

$$\Delta\omega_{ij} = \Delta\omega_i; \quad 0 < i < m-1, \quad 0 < j < n-1.$$

Двойной интеграл $\iint_D f(x, y) dx dy$, где функция $f(x, y)$ непрерывна в области D , заменим двумерной интегральной суммой, выбирая в качестве узлов точки P_{ij} :

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \sum_{i=0}^{m-1} \Delta\omega_i \sum_{j=0}^{n-1} z_{ij}, \quad (4)$$

где
$$z_{ij} = f(x_i, y_{ij}), \quad y_{ij} = \varphi(x_i) + \frac{j}{n} [\psi(x_i) - \varphi(x_i)] \quad (5)$$

Выбирая в качестве узлов последовательно точки $P_{i+1,j}$, $P_{i,j+1}$, $P_{i+1,j+1}$, получим соответственно еще три формулы для приближенного вычисления двойного интеграла:

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \sum_{i=0}^{m-1} \Delta\omega_i \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1,j}; \quad (6)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \sum_{i=0}^{m-1} \Delta\omega_i \sum_{j=0}^{n-1} z_{i,j+1}; \quad (7)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \sum_{i=0}^{m-1} \Delta\omega_i \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1,j+1}; \quad (8)$$

Формулы (4), (6), (7) и (8) являются аналогом формул прямоугольников приближенного вычисления определенного интеграла. Очевидно, что эти формулы тем точнее, чем больше числа m и n , т.е. чем меньше длина каждого из отрезков разбиения.

б) В частном случае, когда область D – прямоугольник, определяемый неравенствами $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$, площади $\Delta\omega_i$ элементарных площадок равны между собой и вычисляются по формуле $\Delta\omega = (b-a)(d-c)/(mn)$. Формулы (4), (6), (7) и (8) соответственно примут вид

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{ij}, \quad (9)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1,j}, \quad (10)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i,j+1}, \quad (11)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1, j+1}, \quad (12)$$

Формулы (9)-(12) можно назвать *формулами параллелепипедов*.

в) Если функция $f(x, y)$ монотонна по каждой из переменных x и y , то для двойного интеграла справедлива оценка

$$\frac{(b-a)(d-c)}{mn} \mu \leq \iint_D f(x, y) dx dy \leq \frac{(b-a)(d-c)}{mn} M, \quad (13)$$

где M и μ - соответственно наибольшая и наименьшая из сумм

$$\sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{ij}, \quad \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1, j}, \quad \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i, j+1}, \quad \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{i+1, j+1}.$$

г) Пусть функция $f(x, y)$ и ее частные производные $f'_x(x, y)$ и $f'_y(x, y)$ непрерывны в области D – прямоугольнике $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$. Тогда оценка погрешности приближенных формул (9)-(12) определяется с помощью неравенства

$$|R| < \frac{(b-a)(d-c)}{2} \left[\frac{M_1(b-a)}{m} + \frac{M_2(d-c)}{n} \right], \quad (14)$$

где $M_1 = \max_{\substack{a \leq x \leq b \\ c \leq y \leq d}} |f'_x(x, y)|$, $M_2 = \min_{\substack{a \leq x \leq b \\ c \leq y \leq d}} |f'_y(x, y)|$

2. Аналог формулы касательных.

а) Рассмотрим двойной интеграл $I = \iint_D f(x, y) dx dy$. Пусть область D – прямоугольник $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$, во всех точках которого выполнены условия: $AC - B^2 < 0, A < 0, C < 0$ (15)

где $A = f''_{x^2}, C = f''_{y^2}, B = f''_{xy}$. Эти условия обеспечивают выпуклость поверхности $z=f(x, y)$ во всех точках области D (аналогично образом условия $AC - B^2 > 0, A > 0, C > 0$ обеспечивают вогнутость этой поверхности).

Тогда для приближенного вычисления двойного интеграла справедлива формула

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx (b-a)(d-c) f(\bar{x}, \bar{y}), \quad (16)$$

где $\bar{x} = (a+b)/2, \bar{y} = (c+d)/2$.

б) Разобьем область D прямыми

$$x=x_i (i=0, 1, 2, \dots, m) \text{ и } y=y_j (j=0, 1, 2, \dots, m)$$

на mn равных прямоугольников. Вычисляя двойной интеграл по каждому элементарному прямоугольнику с помощью формулы (16) и суммируя полученные результаты, приходим к следующей формуле для приближенного вычисления двойного интеграла:

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(\bar{x}_i, \bar{y}_j), \quad (17)$$

где $\bar{x}_i = (x_{i+1} + x_i)/2, \bar{y}_j = (y_{j+1} + y_j)/2$.

Формула (17) дает приближенное значение двойного интеграла с избытком, если выполнены условия (15). Заметим, что формулой (17) можно пользоваться и в том случае, когда первое из условий (15) не выполнено. Однако в этом случае нельзя указать, найдено ли приближенное значение двойного интеграла с недостатком или с избытком.

3. Аналог формулы трапеций.

а) Рассмотрим двойной интеграл $I = \iint_D f(x, y) dx dy$, если область D – прямоугольник $a \leq x \leq b$, $c \leq y \leq d$. Тогда для приближенного вычисления двойного интеграла справедлива формула

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{4} (z_1 + z_2 + z_3 + z_4), \quad (18)$$

где $z_1 = f(a, c)$, $z_2 = f(b, c)$, $z_3 = f(a, d)$, $z_4 = f(b, d)$.

Эта формула дает приближенное значение двойного интеграла с избытком, если выполнено условие (15).

Оценка погрешности формулы (18) определяется неравенством

$$(b-a)(d-c) f\left(\frac{a+b}{2}, \frac{c+d}{2}\right) < \iint_D f(x, y) dx dy < (b-a)(d-c) \frac{f(a, c) + f(b, c) + f(a, d) + f(b, d)}{4} \quad (19)$$

б) Разобьем область D прямыми параллельными осям координат, на mn равных прямоугольников. Вычисляя двойной интеграл по каждому элементарному прямоугольнику с помощью формулы (18) и суммируя полученные результаты, приходим к следующей формуле для приближенного вычисления двойного интеграла:

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{4} (S_0 + 2S_1 + 4S_2), \quad (20)$$

где $S_0 = z_{00} + z_{m0} + z_{0n} + z_{mn}$ – сумма значений функции в вершинных прямоугольника

ника $S_1 = \sum_{i=0}^{m-1} (z_{i0} + z_{in}) + \sum_{j=0}^{n-1} (z_{0j} + z_{mj})$ – сумма значений функции в узлах, лежащих на

сторонах прямоугольника, не считая вершин; $S_2 = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} z_{ij}$ – сумма значений функции в узлах, лежащих внутри прямоугольника.

При выполнении условий (15) по аналогии с неравенством (19) получаем оценку

$$\frac{(b-a)(d-c)}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(\bar{x}_i, \bar{y}_j) < \iint_D f(x, y) dx dy < \frac{(b-a)(d-c)}{mn} (S_0 + 2S_1 + 4S_2), \quad (21)$$

где $\bar{x}_i = (x_{i+1} + x_i)/2$, $\bar{y}_j = (y_{j+1} + y_j)/2$.

Для оценки погрешности приближенного равенства (20) также справедлива неравенство (14).

в) Если область D ограничена линиями $x=a$, $x=b$, $y = \varphi(x)$, $y = \psi(x)$, то в качестве приближенного значения двойного интеграла $\iint_D f(x, y) dx dy$ можно рассматривать среднее арифметическое результатов приближенных вычислений двойного интеграла по формулам (4), (6), (7) и (8):

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{m-1} \Delta\omega_i \sum_{j=0}^{n-1} (z_{ij} + z_{i+1, j} + z_{i, j+1} + z_{i+1, j+1}), \quad (22)$$

где $\Delta\omega_i$ ($i=0, 1, 2, \dots, m-1$) вычисляется по формуле (3), а значение z_{ij} – по формулам (5). Формулы (4), (6), (7), (8) и (22) целесообразно использовать в тех случаях, когда точное или приближенное вычисление площадей $\Delta\omega_i$ не вызывает особых затруднений.

4. Аналог формул Симпсона.

а) Рассмотрим случай прямоугольной области D , заданной неравенствами $-h \leq x \leq h, -l \leq y \leq l$. Подберем коэффициенты многочлена третьей степени

$$P_3(x,y) = a_{30}x^3 + a_{21}x^2y + a_{12}xy^2 + a_{03}y^3 + a_{20}x^2 + a_{11}xy + a_{02}y^2 + a_{10}x + a_{01}y + a_{00}$$

так чтобы в специальном образом выбранных пяти точках (узлах) значения функции $f(x,y)$ и многочлена $P_3(x,y)$ совпали. Тогда

$$\int_{-h}^h \int_{-l}^l f(x,y) dx dy \approx \int_{-h}^h \int_{-l}^l P_3(x,y) dx dy.$$

Учитывая, что $\int_{-a}^a \varphi(t) dt = 0$, если $\varphi(-t) = -\varphi(t)$ на $[-a, a]$, получим формулу

$$\int_{-h}^h \int_{-l}^l f(x,y) dx dy \approx \frac{4hl}{3} (a_{20}h^2 + a_{20}l^2 + 3a_{00}). \quad (23)$$

Если выбрать узлы так, как показано на рисунках 77 и 78, то формулу (23) можно записать соответственно в виде

$$\int_{-h}^h \int_{-l}^l f(x,y) dx dy \approx \frac{hl}{3} [f(h,l) + f(-h,l) + f(h,-l) + f(-h,-l) + 8f(0,0)] \quad (24)$$

или

$$\int_{-h}^h \int_{-l}^l f(x,y) dx dy \approx \frac{2}{3} hl [f(h,0) + f(-h,0) + f(0,l) + f(0,-l) + 2f(0,0)]. \quad (25)$$

Для прямоугольника $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$ формулы (24) и (25) соответственно примут вид

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{12} \left[f(a,c) + f(a,d) + f(b,c) + f(b,d) + 8f\left(\frac{a+b}{2}, \frac{c+d}{2}\right) \right], \quad (26)$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{6} \left[f\left(a, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(b, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, c\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, d\right) + 2f\left(\frac{a+b}{2}, \frac{c+d}{2}\right) \right] \quad (27)$$

Формулы (26) (27) тем точнее, чем меньше размеры прямоугольника; как следует из изложенного, они точны для многочленов третьей степени.

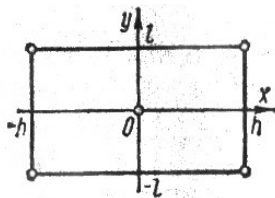


Рис. 77

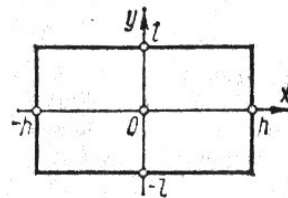


Рис. 78

б) Разбивая прямоугольник прямыми, параллельными осям координат, на $4mn$ равных прямоугольников, применяя к каждому такому прямоугольнику формулу (26) и суммируя полученные результаты, приходим к формуле

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{12mn} (S_0 + 2S_1 + 4S_2 + 8S_3), \quad (28)$$

где, $S_0=f(a,c)+f(a,d)+f(b,c)+a(b,d)$,

$$S_1 = \sum_{i=0}^{m-1} [f(x_{2i}, c) + f(x_{2i}, d)] + \sum_{j=0}^{n-1} [f(a, y_{2j}) + f(b, y_{2j})],$$

$$S_2 = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{2i}, y_{2j}), \quad S_3 = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{2i} + x_{2(i+1)}}{2}, \frac{y_{2j} + y_{2(j+1)}}{2}\right).$$

Если в предыдущих рассуждениях использовать формулу (27), то

$$\iint_{a \ c}^{b \ d} f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-c)}{6mn} (S_1 + S_2 + 4S_3), \quad (29)$$

где, $S_1 = \sum_{i=0}^{m-1} \left[f\left(a, \frac{y_{2j} + y_{2(j+1)}}{2}\right) + f\left(b, \frac{y_{2j} + y_{2(j+1)}}{2}\right) \right] + \sum_{j=0}^{n-1} \left[f\left(\frac{x_{2i} + x_{2(i+1)}}{2}, c\right) + f\left(\frac{x_{2i} + x_{2(i+1)}}{2}, d\right) \right],$

$$S_2 = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{2i} + x_{2(i+1)}}{2}, \frac{y_{2j} + y_{2(j+1)}}{2}\right),$$

$$S_3 = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{x_{2i} + x_{2(i+1)}}{2}, \frac{y_{2j} + y_{2(j+1)}}{2}\right)$$

Формулы (25) – (28) дают точный результат, если подынтегральная функция является многочленом выше третьей степени от переменных x, y , т. е. $f(x, y) \equiv P_3(x, y)$.

в) Пусть область D определена прямой $x_1=(x_0+x_2)/2$, неравенствами $x_0 \leq x \leq x_2, y_0(x) \leq y \leq y_2(x)$. и линией $y_1 = [y_0(x) + y_2(x)]/2$. Разобьем область D на четыре части. Обозначим $y_j(x_i) = y_{ij}$. Как и ранее, $f(x_i, y_{ij}) = z_{ij}$ ($i=0, 1, 2$). Рассмотрим

$$I = \iint_D f(x, y) dx dy = \int_{x_0}^{x_2} dx \int_{y_0(x)}^{y_2(x)} f(x, y) dy.$$

Применяя несколько раз малую формулу Симпсона, в результате получим следующее приближенное равенство:

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{x_2 - x_0}{36} [(y_{02} - y_{00})(z_{00} + 4z_{01} + z_{02}) + 4(y_{12} - y_{10})(z_{10} + 4z_{11} + z_{12}) + (y_{22} - y_{20})(z_{20} + 4z_{21} + z_{22})] \quad (30)$$

Заметим, что если $y_2(x) - y_0(x) + k = const$, то формула (30) принимает вид

$$\iint_D f(x, y) dx dy = k \frac{x_2 - x_0}{36} [z_{00} + z_{02} + z_{20} + z_{22} + 4(z_{01} + z_{10} + z_{12} + z_{21}) + 16z_{11}]. \quad (31)$$

В частности, формула (31) справедлива, если областью интегрирования D является прямоугольник $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$ со сторонами, параллельными осями координат. В этом случае

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{(b-a)(d-\tilde{n})}{36} \left\{ f(a, c) + f(a, d) + f(b, c) + f(b, d) + 4 \left[f\left(a, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(b, \frac{c+d}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, \tilde{n}\right) + f\left(\frac{a+b}{2}, d\right) \right] \right\} \quad (32)$$

Формула (30) дает точный результат, если подынтегральная функция является многочленом третьей степени относительно y при фиксированном x и результат вычисления внутреннего интеграла – многочленом не выше третьей степени по x . Формула (32) точна, если $f(x, y)$ - многочлен третьей степени относительно x при фиксированном y (или относительно y при фиксированном x).

г) Если областью интегрирования D является круг с центром в начале координат и радиусом r , то для приближенного вычисления двойного интеграла целесообразно перейти к полярным координатам:

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^r f(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) \rho d\rho.$$

Разделим прямоугольник в плоскости $\varphi O \rho$ прямыми $\varphi = \pi$ и $\rho = r/2$ на четыре равные части. Вычислив значение подынтегральной функции в узлах и применив последовательно формулы (24) и (26), соответственно получим

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{S}{3} \left[f(r, 0) + 2f\left(-\frac{r}{2}, 0\right) \right], \quad (33)$$

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{S}{3} \left[f\left(\frac{r}{2}, 0\right) + f(-r, 0) + f\left(-\frac{r}{2}, 0\right) \right], \quad (34)$$

где, $S = \pi r^2$ - площадь круга. Формулы (33) и (34) точны, если $F(\rho, \varphi)$ - многочлен не выше третьей степени относительно ρ и φ .

Используя формулу (32), получим

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{S}{9} \left[f(r, 0) + 2f\left(\frac{r}{2}, 0\right) + 2f(-r, 0) + 4f\left(-\frac{r}{2}, 0\right) \right]. \quad (35)$$

Эта формула точна, если функция $F(\rho, \varphi)$ является многочленом не выше третьей степени относительно ρ при фиксированном φ (или относительно φ при фиксированном ρ).

д) Если область интегрирования ограничена эллипсом $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$, то с помощью преобразования координат по формулам $x = a\rho \cos \varphi$, $y = b\rho \sin \varphi$ двойной интеграл можно переписать так:

$$I = \iint_D f(x, y) dx dy \approx \int_0^{2\pi} \int_0^1 ab\rho \cdot f(a\rho \cos \varphi, b\rho \sin \varphi) d\rho d\varphi.$$

Формулы (24), (25) и (32) для такой области соответственно примут вид

$$I \approx \frac{S}{3} \left[f(a, 0) + 2f\left(-\frac{a}{2}, 0\right) \right], \quad (36)$$

$$I \approx \frac{S}{3} \left[f\left(\frac{a}{2}, 0\right) + f(-a, 0) + f\left(-\frac{a}{2}, 0\right) \right], \quad (37)$$

$$I \approx \frac{S}{3} \left[f(a, 0) + 2f\left(\frac{a}{2}, 0\right) + 2f(-a, 0) + 4f\left(-\frac{a}{2}, 0\right) \right], \quad (38)$$

где $S = \pi ab$ - площадь эллипса.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ.

§22. Понятие о численном решении задачи Коши.

Дифференциальное уравнение первого порядка, разрешённое относительно производной имеет вид

$$y' = f(x, y) \quad (1).$$

Решением дифференциального уравнения называется функция $\varphi(x)$, подстановка которой в уравнение обращает его в тождество:

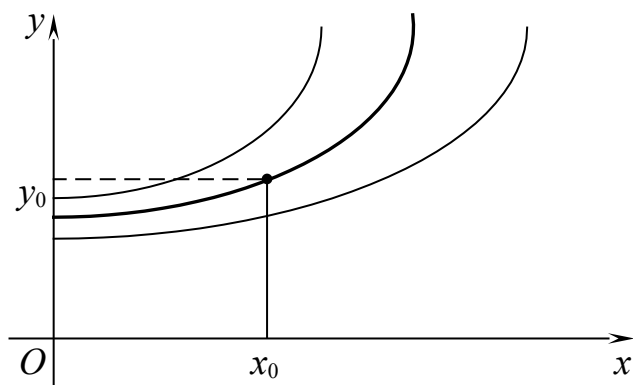
$$\varphi'(x) = f(x, \varphi(x)).$$

График решения $y = \varphi(x)$ называется интегральной кривой. Например, решением уравнения $y' = y$ является функция $y(x) = ce^x$ при любом значении произвольной постоянной C .

Задача Коши для дифференциального уравнения (1) состоит в том, чтобы найти решение этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию

$$y|_{x=x_0} = y_0 \quad (2).$$

Пару чисел (x_0, y_0) называют **начальными данными**. Решение задачи Коши называют **частным решением уравнения (1) при условии (2)**.



Пример:

частным решением задачи Коши $y' = y, y|_{x=x_0} = 1$ является функция $\varphi(x) = e^x$.

Частному решению соответствует одна из интегральных кривых, проходящая через точку (x_0, y_0) .

Условия существования и единственности решения задачи Коши содержатся в следующей теореме.

Теорема. Пусть функция $f(x, y)$ -**правая часть** дифференциального уравнения (1)-**непрерывная** вместе со своей частной производной $\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$ в некоторой области D на плоскости. Тогда при любых начальных данных $(x_0, y_0) \in D$ задача Коши (1) - (2) имеет **единственное решение** $y = \varphi(x)$.

При выполнении условий теоремы через точку (x_0, y_0) на плоскости проходит единственная интегральная кривая. Будем считать, что условия теоремы существования и единственности выполняются. Численное решение задачи Коши (1)-(2) состоит в том, чтобы искомое решение $\varphi(x)$ получить в виде таблицы его приближённых значений для заданных значений аргумента x на некотором отрезке (a, b) : $a=x_0, x_1, x_2, \dots, x_m=b$ (3).

Точки (3) называют **узловыми точками**, а множество этих точек называют **сеткой на отрезке $[a, b]$** . Будем использовать равномерную сетку с шагом h . $h = \frac{b-a}{m}$, $x_i - x_{i-1} = h$ или $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, 2, \dots, m$. Приближённые значения численного решения задачи Коши в узловых точках x_i обозначим y_i ; таким образом, $y_i = \varphi(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$.

Для любого численного метода решения задачи Коши начальное условие (2) выполняется точно, то есть $y_0 = \varphi(x_0)$.

Величина погрешности численного метода решения задачи Коши на сетке отрезка $[a, b]$ оценивается величиной $d = \max_{1 \leq i \leq m} (|y_i - \varphi(x_i)|)$, то есть расстоянием между векторами приближённого решения (y_0, y_1, \dots, y_m) и точного решения $(\varphi(x_0), \varphi(x_1), \dots, \varphi(x_m))$ на сетке по m -норме.

Определение. Численный метод имеет p -й порядок точности по шагу h на сетке, если расстояние d можно представить в виде степенной функции от h : $d = ch^p$, $p > 0$, где c -некоторая положительная постоянная, зависящая от правой части уравнения (1) и от рассматриваемого метода.

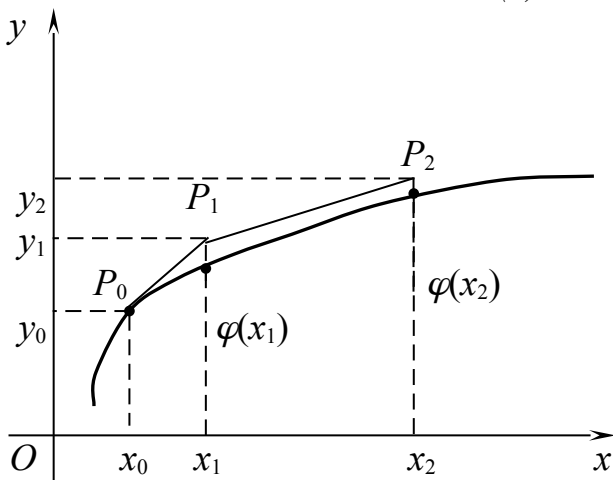
В данном случае очевидно, что когда h стремится к нулю, погрешность d также стремится к нулю.

§23. Метод Эйлера.

Простейшим численным методом решения задачи Коши (1)-(2) (§20) является **метод Эйлера**, называемый иногда **методом ломаных Эйлера**.

Угловым коэффициентом касательной к интегральной кривой в точке $P_0(x_0, y_0)$ есть $y'_0 = f(x_0, y_0)$. Найдём ординату y_1 касательной, соответствующей абсциссе $x_1 = x_0 + h$. Так как уравнение касательной к кривой в точке P_0 имеет вид $y - y_0 = y'_0(x - x_0)$, то $y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$. Угловым коэффициентом в точке $P_1(x_1, y_1)$ также находится из данного дифференциального уравнения $y'_1 = f(x_1, y_1)$. На следующем шаге получаем новую точку $P_2(x_2, y_2)$, причём $x_2 = x_1 + h$, $y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$.

Продолжая вычисления в соответствии с намеченной схемой, получим формулы Эйлера для m приближённых значений решения задачи Коши с начальными данными (x_0, y_0) на сетке отрезка $[a, b]$ с шагом h : $x_i = x_{i-1} + h$, $y_i = y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1})$, $i = \overline{1, m}$ (1).



Графической иллюстрацией приближённого решения является ломаная, соединяющая последовательно точки $P_0, P_1, P_2, \dots, P_m$, которую называют **ломаной Эйлера**.

Оценим погрешность метода Эйлера на одном шаге. Для этого запишем разложение точного решения задачи Коши в точке x_1 по формуле Тейлора с дополнительным членом в форме Лагранжа:

$$\varphi(x_1) = \varphi(x_0 + h) = \varphi(x_0) + \varphi'(x_0)h + \frac{1}{2}\varphi''(\xi)h^2 = y_0 + hf(x_0, y_0) + \frac{1}{2}\varphi''(\xi)h^2, \quad \xi \in (x_0, x_1).$$

Погрешность метода на одном шаге имеет h^2 , т.к.

$$d_0 = |\varphi(x_1, y_1) - \varphi(x_1)| = \frac{1}{2}|\varphi''(\xi)|h^2 \leq \frac{1}{2}\max_{a \leq x \leq b} |\varphi''(x)|h^2$$

После m шагов погрешность вычисления значения y_m в конечной точке отрезка возрастёт не более чем в m раз. Погрешность метода Эйлера можно оценить неравенством

$$d \leq \frac{1}{2}\max_{a \leq x \leq b} |\varphi''(x)|h^2 m = \frac{1}{2}\max_{a \leq x \leq b} |\varphi''(x)| \cdot (b - a)h$$

или представить в виде

$$d = ch, \quad \text{где } c \in \left[0, \frac{1}{2}\max_{a \leq x \leq b} |\varphi''(x)| \cdot (b - a)\right]$$

Это означает, что метод Эйлера имеет первый порядок точности. В частности, при уменьшении шага h в 10 раз погрешность примерно уменьшится в 10 раз.

Практическую оценку погрешности решения, найденного на сетке с шагом $\frac{h}{2}$, в точке $x_i \in [a, b]$ производят с помощью приближённого равенства **правила Рунге**:

$$\left| \varphi(x_i) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right| \approx \frac{\left| y_i(h) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right|}{2^p - 1}, \quad (2)$$

где p -порядок точности численного метода. Таким образом, оценка полученного результата по формуле (2) вынуждает проводить вычисления дважды: один раз с шагом h , другой - с шагом $\frac{h}{2}$.

Пример. Решить задачу Коши $y' = x + y, y|_{x=0} = 1$ методом Эйлера на отрезке $[0; 0,4]$. Найти решение на равномерной сетке с шагом $h_1=0,1, h_2=0,05$ в четырёх узловых точках. Аналитическое решение задачи имеет вид $\varphi(x) = 2e^x - x - 1$.

Решение: Здесь $f(x, y) = x + y, m=4, a=0, b=0,4, h = \frac{b-a}{m} = \frac{0,4}{4} = 0,1$. Используя рекуррентные формулы $x_0=0, y_0=1, x_i=x_{i-1}+0,1; y_i=y_{i-1}+0,1(x_{i-1}+y_{i-1}); i=1,2,3,4$ последовательно находим

при $i=1: x_1=0,1; y_1=1+0,1(0+1)=1,1$

при $i=2: x_2=0,2; y_2=1,1+0,1(0,1+1,1)=1,22$

при $i=3: x_3=0,3; y_3=1,22+0,1(0,2+1,22)=1,362$

при $i=4: x_4=0,4; y_4=1,362+0,1(0,3+1,362)=1,5282$

Обозначим $\tilde{d}_i = \left[y_i(h) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right], d_i = \left[\varphi(x_i) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right]$ и представим результаты вычислений в таблице:

i	x_i	$y_i(h)$	$y_i\left(\frac{h}{2}\right)$	$\varphi(x_i)$	\tilde{d}_i	d_i
1	0,1	1,1	1,105	1,110342	0,005	0,005332
2	0,2	1,22	1,231012	1,242805	0,011012	0,011793
3	0,3	1,362	1,380191	1,399718	0,018191	0,019527
4	0,4	1,5282	1,554911	1,583649	0,026711	0,028738

Отметим, что оценка погрешностей \tilde{d}_i решения $y_i\left(\frac{h}{2}\right)$, вычисляемых по формулам (2), близки к отклонениям d_i и обе величины достигают значения $d \approx 0,03$ - ошибки метода Эйлера при вычислении с шагом 0,05. Для сравнения заметим, что погрешность при вычислениях с шагом 0,1 составляет $d = |y_4 - \varphi(x_4)| \approx 0,06$.

§24. Методы Рунге - Кутты.

Определение. Численные методы решения задачи Коши $y' = f(x, y), y|_{x=x_0} = y_0$ на равномерной сетке $(x_0=a, x_1, x_2, \dots, x_m=b)$ отрезка $[a, b]$ с шагом $h = \frac{b-a}{m}$ называются **методами Рунге - Кутты**, если, начиная с данных (x_0, y_0) , решение ведётся по следующим рекуррентным формулам:

$$x_i = x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1} \quad (i = \overline{1, m}) \quad (1)$$

$$\Delta y_{i-1} = \sum_{j=1}^p d_j k_j^{[i-1]}, \quad k_j^{(i-1)} = hf(x_{i-1} + c_j h, y_{i-1} + c_j k_{j-1}^{[i-1]})$$

Метод называется методом Рунге - Кутты **порядка p** , если он имеет **p -й порядок точности по шагу h на сетке**. Порядок точности p достигается с помощью формул (1) при определённых значениях коэффициентов c_j и d_j ($j=1,2,\dots,p$); причем c_1 всегда полагают равным нулю. Эти коэффициенты вычисляются по следующей схеме:

1) точное решение $\varphi(x_0 + h)$ и его приближение $y_1 = y_0 + \Delta y_0(h)$ представляют в виде разложения по формуле Тейлора с центром x_0 вплоть до слагаемого порядка h^{p+1} ;

2) из равенств подобных членов при одинаковых степенях h в двух разложениях получают уравнения, решая которые находят коэффициенты c_j и d_j .

1 случай. Метод Рунге - Кутта первого порядка.

Этот метод также можно назвать *методом Эйлера*

Покажем это. Пусть $p=1$, $c_1=0$, $d_1=1$, формулы (1) преобразуются в соотношения:

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1}, \quad i = \overline{1, m} \\ \Delta y_{i-1} &= d_1 k_1^{[i-1]} = k_1^{[i-1]}, \quad k_1^{[i-1]} = hf(x_{i-1}, y_{i-1}) \quad \text{или} \\ x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1}). \end{aligned}$$

2 случай. Метод Рунге-Кутта второго порядка.

Этот метод также называется *методом Эйлера - Коши*.

Пусть $p=2$, $c_1=0$, $c_2=1$, $d_1=d_2=\frac{1}{2}$. Алгоритм метода Эйлера - Коши получается из формул (1):

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1}, \quad \Delta y_{i-1} = \frac{1}{2}(k_1^{[i-1]} + k_2^{[i-1]}) \quad i = \overline{1, m} \quad (2) \\ k_1^{[i-1]} &= hf(x_{i-1}, y_{i-1}), \quad k_2^{[i-1]} = hf(x_{i-1} + h, y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1})). \end{aligned}$$

Для практической оценки решения можно применять правило Рунге, полагая в приближённом равенстве (правиле Рунге) $p=2$.

Пример. Решить задачу Коши $y' = x + y$, $y|_{x=0} = 1$ методом Эйлера - Коши на отрезке $[0; 0,4]$. Найти решение на равномерной сетке с шагом 0,1 в четырёх узловых точках.

Решение. Формулы (2) в данном случае примут вид:

$$\begin{aligned} k_1^{[i-1]} &= hf(x_{i-1}, y_{i-1}), \quad k_2^{[i-1]} = hf(x_{i-1} + h, y_{i-1} + hf(x_{i-1}, y_{i-1})). \\ x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \frac{1}{2}[k_1^{[i-1]} + k_2^{[i-1]}], \quad i = 1, 2, 3, 4. \end{aligned}$$

Полагая $x_0=0$, $y_0=1$ при $i=1$ последовательно находим

$$\begin{aligned} k_1^{[0]} &= 0,1(0 + 1) = 0,1; \quad k_2^{[0]} = 0,1(0 + 0,1 + 1 + 0,1) = 0,12 \\ x_1 &= 0 + 0,1 = 0,1; \quad y_1 = 1 + \frac{1}{2}(0,1 + 0,12) = 1,11 \end{aligned}$$

при $i=2$

$$\begin{aligned} k_1^{[1]} &= 0,1(0,1 + 1,11) = 0,121; \quad k_2^{[1]} = 0,1(0,1 + 0,1 + 1,121) = 0,1431 \\ x_2 &= 0,1 + 0,1 = 0,2; \quad y_2 = 1,11 + \frac{1}{2}(0,121 + 0,1431) = 1,24206. \end{aligned}$$

Далее получаем: при $i=3$, $x_3=0,3$ -- $y_3=1,398405$, при $i=4$, $x_4=0,4$ -- $y_4=1,581804$.

Погрешность полученного решения не превышает величины $|y_4 - \varphi(x_4)| \approx 0,002$.

3 случай. Метод Рунге - Кутта четвёртого порядка.

Этот метод также называют *классическим методом Рунге - Кутта*.

Пусть $p=4$, $c_1=0$, $c_2=c_3=\frac{1}{2}$, $c_4=1$, $d_1=d_4=\frac{1}{6}$, $d_2=d_3=\frac{1}{3}$. Из рекуррентных формул (1) получим алгоритм решения задачи Коши классическим методом Рунге - Кутта:

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1} \quad i = \overline{1, m} \\ \Delta y_{i-1} &= \frac{1}{6}[k_1^{[i-1]} + 2k_2^{[i-1]} + 2k_3^{[i-1]} + k_4^{[i-1]}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k_1^{[i-1]} &= hf(x_{i-1}, y_{i-1}) \\
k_2^{[i-1]} &= hf\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}h, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_1^{[i-1]}\right) \\
k_3^{[i-1]} &= hf\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}h, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_2^{[i-1]}\right) \\
k_4^{[i-1]} &= hf\left(x_{i-1} + h, y_{i-1} + k_3^{[i-1]}\right).
\end{aligned} \tag{3}$$

Графиком приближённого решения является ломаная, последовательно соединяющая точки $P_i(x_i, y_i)$ ($i=0, 1, \dots, m$). С увеличением порядка численного метода, звенья ломаной приближаются к ломаной, образованной хордами интегральной кривой $y=\varphi(x)$, последовательно соединяющими точки $(x_i, \varphi(x_i))$ на интегральной кривой.

Правило Рунге практической оценки погрешности решения для численного метода четвёртого порядка имеет вид:

$$\left| \varphi(x_i) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right| \approx \frac{1}{15} \left| y_i(h) - y_i\left(\frac{h}{2}\right) \right|$$

Пример. Решить задачу Коши $y'=x+y$, $y|_{x=0} = 1$ классическим методом Рунге - Кутты на отрезке $[0; 0,4]$. Найти решение на равномерной сетке с шагом 0,1 в четырёх узловых точках.

Решение: Так как $f(x,y)=x+y$, то согласно формулам (3) получаем

$$\begin{aligned}
k_1^{[i-1]} &= hf(x_{i-1}, y_{i-1}); \quad k_2^{[i-1]} = hf\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}h, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_1^{[i-1]}\right) \\
k_3^{[i-1]} &= hf\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}h, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_2^{[i-1]}\right); \quad k_4^{[i-1]} = hf\left(x_{i-1} + h, y_{i-1} + k_3^{[i-1]}\right). \\
x_i &= x_{i-1} + h, \quad y_i = y_{i-1} + \frac{1}{6}(k_1^{[i-1]} + 2k_2^{[i-1]} + 2k_3^{[i-1]} + k_4^{[i-1]})
\end{aligned}$$

Полагая $x_0=0, y_0=1$, последовательно находим при $i=1$:

$$k_1^{[0]} = 0,1(0 + 1) = 0,1; \quad k_2^{[0]} = 0,1(0 + 0,05 + 1 + 0,05) = 0,11$$

$$k_3^{[0]} = 0,1(0+0,05+1+0,055)=0,1105$$

$$k_4^{[0]} = 0,1(0+0,1+1+0,1105)=0,121050$$

$$x_1=0+0,1=0,1; \quad y_1=1 + \frac{1}{6}(0,1 + 2 \cdot 0,11 + 2 \cdot 0,1105 + 0,12105) = 1,110342$$

при $i=2$:

$$k_1^{[1]} = 0,1(0,1 + 1,110342) = 0,1210342$$

$$k_2^{[1]}=0,1(0,1+0,05+1,110342+0,0605171)=0,1320859$$

$$k_3^{[1]}=0,1(0,1+0,05+1,110342+0,06604295)=0,1326385$$

$$k_4^{[1]}=0,1(0,1+0,1+1,110342+0,1326385)=0,1442980$$

$$x_2=0,1+0,1=0,2; \quad y_2=y_1 + \frac{1}{6}(k_1^{[1]} + 2k_2^{[1]} + 2k_3^{[1]} + k_4^{[1]}) = 1,242805.$$

Далее получаем при $i=3$, $x_3=0,3$, $y_3=1,399717$; при $i=4$, $x_4=0,4$; $y_4=1,583648$.

Погрешность полученного решения не превышает величины $|y_4 - \varphi(x_4)| \approx 0,000001$.

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ.

§25. Приближенное решение систем линейных уравнений.

Рассмотрим сущность итерационного метода при решении систем линейных уравнений на примере. Пусть дана система $Ax=B$, где $A=(a_{ij})$ - матрица коэффициентов при переменных x_{ij} размерности $n \times n$, $x=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ - матрица

переменных, $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$ - матрица свободных членов. Она может быть преобразо-

вана к эквивалентной ей системе вида $x=Bx+c$, где B и c - некоторые новые матрица и свободный член соответственно. Данную систему можно трактовать как задачу о неподвижной точке линейного отображения B в пространстве R_n и определить последовательность приближений $x^{(k)}$ к неподвижной точке x^* рекуррентным равенством $x^{(k+1)}=Bx^{(k)}+c$, $k=0, 1, 2, \dots$. Итерационный процесс, начинающийся с некоторого значения $\bar{x}^{[0]} = (x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]})$ называется **методом простых итераций**.

Пусть исходная линейная система уравнений имеет вид:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \text{-----} \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad \text{где } \bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) - \text{искомое решение.} \quad (1)$$

При решении этой системы необходимо:

I. Задать начальное приближенное решение $\bar{x}^{[0]} = (x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]})$ (индекс в скобках указывает номер итерации), которое будет уточняться в процессе итераций. При этом надо учитывать, что, если метод сходится, то он сходится при любом начальном приближении. Обычно в качестве начального приближения, в зависимости от задачи, берутся либо вектор правых частей \bar{b} и тогда $x_1^{[0]} = b_1, x_2^{[0]} = b_2, \dots, x_n^{[0]} = b_n$, либо нулевой вектор и тогда $x_1^{[0]} = 0, x_2^{[0]} = 0, \dots, x_n^{[0]} = 0$.

II. Привести исходную систему (1) к виду, удобному для проведения итераций, то есть к виду

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_2, \dots, x_n) \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_3, \dots, x_n) \\ \text{-----} \\ x_n = \varphi_n(x_1, \dots, x_{n-1}) \end{cases} \quad (2)$$

где $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ - произвольные линейные функции переменных x_1, x_2, \dots, x_n , причем некоторые переменные могут отсутствовать в правых частях системы (2), но каждая переменная должна присутствовать в левой части соответствующего уравнения.

III. Указать совокупность действий, которые составляют одну итерацию (переход от $\bar{x}^{[k-1]}$ к $\bar{x}^{[k]}$). Достаточно рассмотреть два алгоритма вычисления корней уравнений системы.

1. Метод простой итерации записывается в виде:

Первая итерация выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} x_1^{[1]} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{[0]} - \dots - a_{1n}x_n^{[0]}) \\ x_2^{[1]} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{[0]} - a_{23}x_3^{[0]} - \dots - a_{2n}x_n^{[0]}), \\ \dots \\ x_n^{[1]} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{[0]} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{[0]}) \end{cases}$$

Затем, на каждом следующем шаге значение верхних индексов увеличивается на единицу. В итоге, на последнем шаге система имеет вид:

$$\begin{cases} x_1^{[k]} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{[k-1]} - \dots - a_{1n}x_n^{[k-1]}) \\ x_2^{[k]} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{[k-1]} - a_{23}x_3^{[k-1]} - \dots - a_{2n}x_n^{[k-1]}) \\ \dots \\ x_n^{[k]} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{[k-1]} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{[k-1]}) \end{cases} \quad (3)$$

2. Метод Зейделя (обобщение метода простой итерации) заключается в следующем: уже полученные значения переменных используются при вычислении остальных искомых переменных на этой итерации. То есть имеет место:

$$\begin{cases} x_1^{[1]} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{[0]} - \dots - a_{1n}x_n^{[0]}) \\ x_2^{[1]} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{[1]} - a_{23}x_3^{[0]} - \dots - a_{2n}x_n^{[0]}), \\ \dots \\ x_n^{[1]} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{[1]} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{[1]}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{[k]} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{[k-1]} - \dots - a_{1n}x_n^{[k-1]}) \\ x_2^{[k]} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{[k]} - a_{23}x_3^{[k-1]} - \dots - a_{2n}x_n^{[k-1]}) \\ \dots \\ x_n^{[k]} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{[k]} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{[k]}) \end{cases} \quad (4)$$

Применяя каждый из методов, необходимо учитывать, что метод Зейделя сходится на порядок быстрее метода простой итерации.

IV. Выяснить условия сходимости итерационного процесса. При решении практических задач используется следующая теорема: Если матрица A исходной системы имеет диагональное преобладание, то методы простой итерации и Зейделя сходятся.

Определение. Матрица $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$ исходной системы

называется имеющей диагональное преобладание, если выполняются следующие условия:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11} > a_{12} + a_{13} + \dots + a_{1n} \\ a_{22} > a_{21} + a_{23} + \dots + a_{2n} \\ \dots \\ a_{nn} > a_{n1} + a_{n2} + \dots + a_{nn-1} \end{array} \right.$$

V. Указать условия окончания итерационного процесса. В этой роли обычно выступает оценка $|x_i^{[k]} - x_i^{[k-1]}| < \varepsilon$, $i = \overline{1, n}$, где ε - наперед заданная точность вычислений.

§26. Приближенные методы решения систем нелинейных уравнений.

Многие практические задачи при их математическом моделировании сводятся к решению системы нелинейных уравнений. Система n нелинейных уравнений с n неизвестными в общем случае имеет вид

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Решением системы уравнений (1) называется n чисел $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ которые при подстановке в (1) обращают все уравнения в нули.

Задача (1) тесно связана с другой очень часто встречающейся задачей - минимизации функции многих переменных

$$Z = \min u(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2)$$

Эта связь проявляется в том, что каждую из этих задач можно свести к решению другой. Пусть, например, вектор $\bar{x}^* (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ является решением системы (1). Построим функцию

$$Q(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_1^2(x_1, \dots, x_n) + f_2^2(x_1, \dots, x_n) + \dots + f_n^2(x_1, \dots, x_n) \quad (3)$$

Так как \bar{x}^* обращает в нуль все уравнения системы (1), то \bar{x}^* обращает функцию $Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в нуль. Поскольку $Q \geq 0$, то \bar{x}^* обращает функцию Q в минимум, и этот минимум равен нулю. Справедливо и обратное утверждение. Пусть совокупность чисел $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ обращает функцию $Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в минимум, равный нулю. Тогда каждый член суммы, входящий в (3), обращается в нуль и, следовательно, совокупность $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ является решением системы (1). Таким образом, задача (1) сводится к нахождению минимума (3).

В свою очередь, для задачи минимизации (2) точка минимума является решением системы нелинейных уравнений.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial u(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} = 0 \end{array} \right.$$

Возможность сведения одной задачи к другой не означает, что можно ограничиться рассмотрением только одной из них. Каждая из них является весьма сложной и имеет многочисленные подводные камни, которые проявляются при практической реализации существующих методов их решения. По-видимому, не существует никаких универсальных методов решения этих задач. Установление связи между задачами (1) и (2) удобно тем, что в каждом конкретном случае мы можем использовать ту из них, которая быстрее приводит к цели при располагаемых ресурсах вычислительной техники и математического обеспечения. Трудности при решении систем нелинейных уравнений проявляются в следующем:

- 1) Определение количества корней системы и их отделение проводить достаточно сложно в силу невозможности при больших n использовать простые геометрические соображения.
- 2) Многие надёжные методы нахождения корня одного нелинейного уравнения, имеющие гарантированную сходимость, такие как метод половинного деления или метод хорд и т. д., не допускают обобщения на случай n неизвестных.
- 3) Решение системы (1) ищут, как правило, методом итераций или эффективным по скорости методом Ньютона, сходимость которых возможна только при наличии хорошего начального приближения.
- 4) нахождение хорошего начального приближения для сложной системы (1) является весьма непростым делом и требует, помимо математического анализа системы, привлечение других соображений (физических, инженерных, экономических и др.), связанных с постановкой решаемых задач.

Замечание 1. Никаких универсальных методов преодоления отмеченных трудностей и решения этих задач не существует. Каждый раз приходится, наряду с теоретическими исследованиями системы (1), использовать эвристические соображения и проводить экспериментальные численные исследования. Рассмотрим названные в пункте 3 методы.

Метод простой итерации.

Запишем систему (1) в виде, удобном для итераций:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \varphi_1(x_2, \dots, x_n) \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_3, \dots, x_n) \\ \dots \\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \end{array} \right. \quad (4)$$

Зададим начальное приближенное решение $\bar{x}^{[0]} = (x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]})$ (индекс в скобках указывает номер итерации), которое будет уточняться в процессе итераций. При этом надо учитывать, что, если метод сходится, то он сходится при любом начальном приближении. Первое приближение вычисляется по формулам:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_n} \right| \leq q \\ \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_n} \right| \leq q \\ \dots \\ \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_n} \right| \leq q \end{array} \right. \quad (10)$$

где q - некоторое положительное число, меньшее единицы, т.е. $0 < q < 1$. Неравенства (10) должны выполняться в точке \bar{x}^* и в некоторой её окрестности.

Возможно естественное обобщение метода простой итерации (5), аналогичное методу Зейделя для систем линейных уравнений. Оно заключается в том, что переменные x_i , уже полученные на данном итерационном шаге, используются для получения других величин на этом шаге. Соответствующие формулы имеют вид

$$\begin{cases} x_1^{[k]} = \varphi_1(x_2^{[k-1]}, \dots, x_{n-1}^{[k-1]}, x_n^{[k-1]}) \\ x_2^{[k]} = \varphi_2(x_1^{[k]}, x_3^{[k-1]}, \dots, x_{n-1}^{[k-1]}, x_n^{[k-1]}) \\ \dots \\ x_n^{[k]} = \varphi_n(x_1^{[k]}, x_2^{[k]}, \dots, x_{n-1}^{[k]}) \end{cases} \quad (11)$$

Если бы оба метода (5) и (11) сходились, то метод (11) сходится, вообще говоря, быстрее, так как получаемые на каждом шаге итерации новые значения переменных сразу используются в дальнейших вычислениях на этом шаге.

Метод Ньютона и его модификации.

Метод Ньютона - метод, который сводит решение системы нелинейных уравнений к последовательному решению систем линейных уравнений для нахождения поправок к предыдущим приближениям.

Рассмотрим общий вид нелинейной системы (1). Зададим начальное приближение $\bar{x}^{[0]} = (x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]})$. Будем искать решение системы (1) в виде

$$x_1^* = x_1^{[0]} + \Delta x_1^{[0]}, \quad x_2^* = x_2^{[0]} + \Delta x_2^{[0]}, \quad \dots, \quad x_n^* = x_n^{[0]} + \Delta x_n^{[0]}. \quad (12)$$

Разложим левые части системы (1) в ряд Тейлора в точке $\bar{x}^{[0]}$, считая величины $\Delta x_i^{[0]}$ малыми и в силу этого ограничиваясь только линейными членами в ряде Тейлора. Для функции $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ получим

$$f_i(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) = f_i(x_1^{[0]} + \Delta x_1^{[0]}, x_2^{[0]} + \Delta x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]} + \Delta x_n^{[0]}) = \\ = f_i(x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}) + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right) \Delta x_1^{[0]} + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_2} \right) \Delta x_2^{[0]} + \dots + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right) \Delta x_n^{[0]}, \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (13)$$

Обозначение $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right)$ указывает, что соответствующая частная производная вычисляется в базовой точке $x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}$, для которой записывается разложение в ряд Тейлора. Поскольку \bar{x}^* является точным решением системы (1), левые части в уравнениях (13) равны нулю. В результате для неизвестных приращений $\Delta x_i^{[0]}$ получим систему линейных уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)_0 \Delta x_1^{[0]} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)_0 \Delta x_2^{[0]} + \dots + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right)_0 \Delta x_n^{[0]} = -f_1(x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}) \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)_0 \Delta x_1^{[0]} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)_0 \Delta x_2^{[0]} + \dots + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_n} \right)_0 \Delta x_n^{[0]} = -f_2(x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}) \\ \dots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right)_0 \Delta x_1^{[0]} + \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_2} \right)_0 \Delta x_2^{[0]} + \dots + \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right)_0 \Delta x_n^{[0]} = -f_n(x_1^{[0]}, x_2^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}) \end{array} \right. \quad (14)$$

Матрицей этой системы является якобиан.

$$J(x_1^{[0]}, \dots, x_n^{[0]}) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)_0 & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)_0 & \dots & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right)_0 \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)_0 & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)_0 & \dots & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_n} \right)_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right)_0 & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_2} \right)_0 & \dots & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right)_0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Если определитель этой матрицы не равен нулю, то из системы уравнений (14) можно найти неизвестные приращения $\Delta x_i^{[0]}$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Поскольку в разложении Тейлора мы отбросили все члены, кроме линейных, соотношения (12) определяют не точное решение \bar{x}^* , а уточнение к нулевому приближению $\bar{x}^{[1]} = \bar{x}^{[0]} + \Delta \bar{x}^{[0]}$,

или в координатном виде:

$$x_1^{[1]} = x_1^{[0]} + \Delta x_1^{[0]}, \quad x_2^{[1]} = x_2^{[0]} + \Delta x_2^{[0]}, \quad \dots, \quad x_n^{[1]} = x_n^{[0]} + \Delta x_n^{[0]} \quad (16).$$

Один шаг метода Ньютона заключается в решении системы линейных уравнений (14), все коэффициенты которой и правые части зависят от начального приближения $\bar{x}^{[0]}$, и в получении уточнённого решения $\bar{x}^{[1]}$ по формулам (16). Приняв теперь полученное первое приближение за начальное и проделав те же операции, которые были сделаны на первом шаге, можно получить следующее приближение к решению $\bar{x}^{[2]}$. Этот итерационный процесс продолжается до тех пор, пока все получаемые приращения становятся малыми по абсолютной величине

$$\max_i |\Delta x_i^{[k]}| < \varepsilon \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (17)$$

Систему линейных уравнений, которую необходимо решать на каждом шаге метода Ньютона, в общем виде можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)_k \Delta x_1^{[k]} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)_k \Delta x_2^{[k]} + \dots + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right)_k \Delta x_n^{[k]} = -f_1(x_1^{[k]}, x_2^{[k]}, \dots, x_n^{[k]}) \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)_k \Delta x_1^{[k]} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)_k \Delta x_2^{[k]} + \dots + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_n} \right)_k \Delta x_n^{[k]} = -f_2(x_1^{[k]}, x_2^{[k]}, \dots, x_n^{[k]}) \\ \dots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right)_k \Delta x_1^{[k]} + \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_2} \right)_k \Delta x_2^{[k]} + \dots + \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right)_k \Delta x_n^{[k]} = -f_n(x_1^{[k]}, x_2^{[k]}, \dots, x_n^{[k]}) \end{cases} \quad (18)$$

Индекс k у частных производных указывает, что соответствующая частная производная вычисляется при $x_1^{[k]}, x_2^{[k]}, \dots, x_n^{[k]}$ (для значений искомых переменных на k -ой итерации). Решив эту линейную систему и определив из неё величины поправок $\Delta x_i^{[k]}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), находим следующее приближение

$$x_i^{[k]} = x_i^{[k-1]} + \Delta x_i^{[k-1]} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (19)$$

Выражения (18) и (19) полностью определяют один шаг метода Ньютона. Таким образом, метод Ньютона сводит решение систем нелинейных уравнений к многократному решению систем линейных уравнений (18).

Замечание 3. Если метод Ньютона сходится, то сходимость имеет второй порядок, как и в случае уравнения с одной неизвестной.

Для сходимости метода требуется, чтобы начальное приближение было близко к точному решению, а функции $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ и их первые и вторые производные удовлетворяли некоторым ограничениям. Несмотря на быструю сходимость, метод Ньютона имеет существенный недостаток: на каждом его шаге требуется вычислять n^2 частных производных $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$, определяющих коэффициенты при неизвестных в линейной системе (18), то есть якобиан. В то же время в методе простой итерации (5) требуется вычислять всего n функций $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Чтобы компенсировать этот недостаток метода Ньютона, были предложены различные его упрощения. Идея большинства из этих упрощений заключается в том, чтобы матрицу коэффициентов линейной системы (18) вычислять не на каждом итерационном шаге, а лишь на некоторых из них, считая на остальных шагах все элементы якобиана постоянными, равными их последним вычисленным значениям на том шаге, на котором производится пересчёт всех членов. В простейшем случае якобиан вычисляется один раз, в начальной точке $\bar{x}^{[0]}$, а затем якобиан остаётся постоянным в течение всего итерационного процесса. Такой метод обычно называется упрощённым методом Ньютона. Матрица коэффициентов линейной системы (18) в этом случае остаётся постоянной, и в процессе итераций изменяются только правые части системы, которые пересчитываются на каждом шаге итераций и решения системы $\Delta x_i^{[k-1]}$, после нахождения которых происходит пересчёт $x_i^{[k]}$ по формулам (19). Конечно, этот метод сходится медленнее, чем метод Ньютона, но на каждом итерационном шаге требуется гораздо меньше арифметических операций.