МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Київський національний університет будівництва і архітектури

О.В. Горда

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

Конспект лекцій

для студентів спеціальностей 7.080401
"Інформаційні управляючі системи та технології",
7.080402 „Інформаційні технології проектування”

Київ 2009

ББК 32.965
Г68

Рецензент *В.М. Михайленко,* д-р техн. наук, професор

Затверджено на засіданні вченої ради факультету автоматизації та інформаційних технологій, протокол № 1 від 24 вересня 2008 року.

Горда О.В.
Г68 Чисельні методи: конспект лекцій / О.В. Горда. – К.: КНУБА, 2009. – 76 с.

Розглянуто поняття похибки та методи її оцінки при обчисленні математичних виразів різного типу складності, детально проаналізовано джерела виникнення похибок та методи їх усунення. Наведено методи побудови залежностей між параметрами системи за експериментальними та табличними даними, які в подальшому є базовими в теорії моделювання. Теоретичний матеріал проілюстровано детально опрацьованими прикладами.

Призначений для студентів спеціальностей 7.080401 "Інформаційні управляючі системи та технології", 7.080402 „Інформаційні технології проектування”.

ББК 29.965
Г68

Зміст

Вступ …………………………………………………………….. 4
1. Поняття похибки …………………………………………… 5
Лекція 1 ………………..………………………………………... 5
Джерела виникнення похибки ………………………............. 5
Підготовка даних до обробки ………………………………… 6
Наближені числа ………………………………………………. 8
Похибка суми і різниці ……………………………………….. 11
Похибка добутку ……………………………………………… 13
Похибка ділення ………………………………………………. 13
Похибка функцій ……………………………………………… 14
Абсолютна похибка диференційованої функції ……….......... 15
Лекція 2. ……………………………………………………… 15
Похибка усікання ……………………………………….......... 15
Похибка округлення …………………………………………... 17
Використання наближених і еквівалентних формул ………….. 18
Лекція 3.. 20
Багаточлен Тейлора …………………………………………… 20
Ряд Фур’є ……………………………………………………… 25
Поняття коректності математичної задачі ……….................. 28
Запитання для самоконтролю ……………………………......... 29
2. Елементи теорії апроксимації ……………………….......... 30
Лекція 4 ……………………………………………………… 30
Інтерполяція та наближення поліномами ……....................... 30
Інтерполяційний багаточлен Лагранжа ……………………… 31
Інтерполяція з постійним кроком ……………………………. 34
Лекція 5 ……………………………………………………… 36
Процес Ейткена (розділені різниці) ……………………........ 36
Розв’язок рівняння за таблично заданою функцією …………… 39
Інтерполяційний поліном Ньютона (скінченні різниці) ………. 40
Лекція 6 45
Інтерполяційний поліном Чебишова. Визначення вузлів інтерполяції ……………………………………………………. 45
Раціональне наближення функції (наближення Паде) ………… 50
Поліном Ерміта ………………………………………………... 51
Лекція 7 ……………………………………………………… 52
Сплайн апроксимація …………………………………............
Кусково-поліноміальна лінійна інтерполяція ………….......... 53
Кубічні сплайни ………………………………………….......... 55
Лекція 8 ……………………………………………………… 64
Методи згладжування функцій. Метод найменших квадратів ... 64
Запитання для самоконтролю ……………………………......... 74
Список літератури …………………………………………......... 75

ВСТУП

Сучасний науково-технічний прогрес тісно пов'язаний з дослідженням складних об'єктів, що потребує аналізу результатів натурних або модельних експериментів, а також дослідження складних математичних моделей.

Як правило, моделі складних систем описуються нелінійними, у тому числі, диференційними та інтегральними рівняннями чи системами рівнянь. На практиці такі математичні задачі мають аналітичний розв'язок тільки в окремих випадках і основним інструментом розв'язання широкого кола математичних задач є чисельні методи.

Застосування обчислювальних машин дозволяє більш ефективно розв'язувати складні математичні задачі та зменшувати похибки результатів, тому для сучасного інженера є необхідним володіння ефективними чисельними методами та вміння складати алгоритми для їхньої комп'ютерної реалізації.

У процесі проведення експериментів отримані дані містять похибки, кожний чисельний метод також характеризується своєю похибкою, отже вміння оцінювати точність результатів є однією з першочергових задач для сучасного спеціаліста з комп'ютерних наук. Курс „Чисельні методи" саме призначений для ознайомлення майбутніх спеціалістів з методами обробки й аналізу експериментальних даних, підбором емпіричних формул та оцінки їхніх параметрів, а також з методами розв'язання математичних задач.

Для успішного оволодіння матеріалом студент повинен знати основи вищої математики в повному обсязі. Для більш широкого розуміння матеріалу й оволодіння прийомами його практичного застосування бажано мати знання з теорії ймовірностей та мати хороші навички програмування на мовах високого рівня.

Доповненням курсу в напряму розширення використання комп'ютерної техніки є використання спеціалізованих програмних середовищ для інженерних розрахунків і задач моделювання, таких як MathCad і MatLab.

1. ПОНЯТТЯ ПОХИБКИ

Лекція 1

Джерела виникнення похибок

Основними джерелами виникнення похибок обробки даних, отриманих різними шляхами (з експериментів чи у результаті розрахунків) є:

1) наближеність початкових даних;
2) похибка чисельних методів;
3) похибка обчислень, комп‘ютерна похибка.

Якщо чисельні методи застосовують для обробки даних, отриманих у результаті експериментів, то першим джерелом виникнення похибок будуть умови проведення іспитів, які певною мірою спотворюють дані.

Так, похибки поділяють на систематичні та випадкові. Систематичні похибки можуть виникати за рахунок неправильно відкаліброваних приладів або систематичних перешкод при проведенні експерименту та знятті показників. Систематичні похибки будуть призводити до систематичних невірних результатів, а, отже, і невірних висновків на їхній основі. Тому необхідно дотримуватись умов проведення „чистих експериментів” і уникати виникнення систематичних похибок.

Випадкові похибки обумовлені випадковими факторами, наприклад, впливом зовнішнього середовища, неточністю зняття показників приладів, неуважністю дослідника. Випадкові похибки можуть спотворювати точне значення як з надлишком, так і з недостачею, тому загалом вони будуть компенсуватись і прямувати до точного значення. Очевидно, що негативні наслідки від випадкових похибок значно менші, ніж від систематичних.

У випадку, коли проводиться чисельний експеримент над математичною моделлю, отримані дані містять похибку, обумовлену наближеністю самої моделі до реального явища, яке вона описує.

На основі отриманих даних формалізується задача, яку необхідно розв‘язати. Практичні задачі часто мають досить складний вираз і їх неможна розв‘язати аналітично. Тоді до задач застосовують чисельні методі. Більшість чисельних методів базується на спрощенні початкових складних функцій, що також призводить до виникнення похибки методу.

Для спрощення реалізації методів, вони виражаються рекурентними формулами. На кожному кроці обчислень виконується операція округлення і в процесі багаторазового повторення рекурентної формули накопичується похибка обчислень.

Необхідно пам‘ятати, що всі розрахунки за допомогою комп‘ютера виконуються над наближеними числами, які в процесі виконання дій округляються до порядку, що визначається точністю вибраного типу даних. Наприклад, у мові С/С++ тип float визначає дійсні числа, для представлення яких виділяється чотири байти, і точність представлення числа не перевищує шостого знака. Тип double – виділяє для запису дійсного числа вісім байтів і дає змогу зберігати більшу кількість значущих цифр дійсного числа (10-12 цифр). Щоб отримати результат із заданою точністю необхідно правильно вибирати тип даних (тип, який має точність на декілька порядків більшу, ніж задана) і враховувати, що чим більше число операцій над числами виконується, тим більшою буде накопичена похибка.

Підготовка даних до обробки

Перед виконанням математичної обробки даних, їх необхідно підготувати. Перевіряти та переглядати дані зручніше, якщо вони впорядковані. Тому, першим кроком у підготовці даних є їхнє сортування. Якщо на основі експериментальних даних буде будуватись математична модель у вигляді деяких функцій вигляду $y = f(x)$, або буде проводитись дослідження моделі, яка описується функцією, то дані мають бути відсортовані в порядку зростання значень аргументу цих функцій x_i, $i = 1,2,...,n$, де n – кількість даних або це число ще називають об‘ємом вибірки.

Наступним кроком у підготовці є перевірка їх на коректність. Для перевірки правильності даних існують спеціально розроблені методи, в основі яких лежить теорія математичної статистики. Але, навіть без застосування спеціальних теорій, дані можна перевірити на правильність просто їх візуальним переглядом.

Якщо деякі значення сильно відрізняються від інших („вискакуючі”, рис. 1.), можна зробити припущення , що вони є помилковими. Такі помилки називаються грубими і вони можуть виникати в результаті невірно проведених вимірювань, погано підготовленого експерименту (недотримання „чистоти” експерименту) або в процесі запису даних на бланк або у файл. Щоб уникнути спотворення результатів і хибних висновків на їхній основі, такі дані краще з розгляду вилучати.

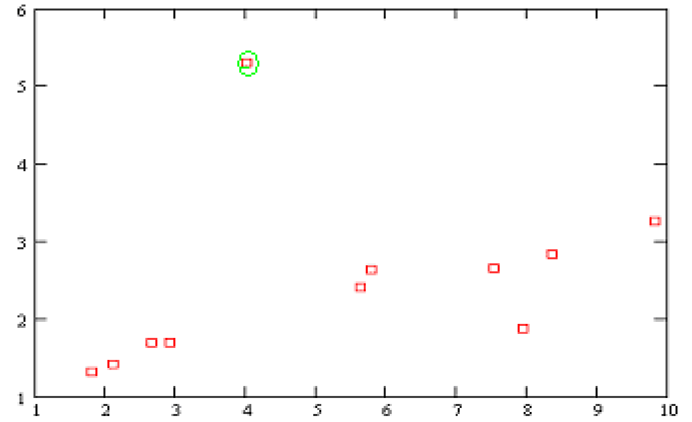


Рис. 1. Приклад наявності „вискакуючого” даного у вибірці

Якщо дані відсортовані, то на кінцях інтервалу, на якому вони розташовані, ймовірність збільшення їхньої похибки зростає, тому на практиці часто виконують обробку спочатку всіх даних, а потім відсікають по 5% на кінцях інтервалу та виконують ті ж дослідження над вкороченою вибіркою, результати порівнюють. Якщо вони суттєво відрізняються, то це може означати таке:

1) дані містять помилки і необхідно виконати повторну серію іспитів;

2) гіпотези про залежність між даними є невірними і необхідно виконати повторний їхній аналіз.

Наближені числа

Визначення. Наближеним числом a називається число, яке мало відрізняється від точного числа A і заміщує його в розрахунках.

Різниця точного та наближеного чисел $A-a$ називається похибкою наближеного числа a.

Якщо відома оцінка похибки наближеного числа, то його часто записують у такому вигляді: $a = \text{наближене значення} \pm \text{похибка}$.

Приклад. $a = 2{,}719 \pm 0.0013$. Запис означає, що точне значення числа лежить у межах: $2.7177 \le a \le 2.7203$.

Абсолютною похибкою називається величина $\Delta = |A-a|$.

Гранична абсолютна похибка – це оцінка різниці точного та наближеного числа $\Delta_a = |A-a|$.

$$a - \Delta_a < A < a + \Delta_a \text{ або } A = a \pm \Delta_a.$$

Відносна похибка наближеного числа визначається як відношення абсолютної похибки до значення самого числа: $\delta = \dfrac{\Delta}{|A|}$.

Будь-яке додатне число $\delta_a > \delta$ називається граничною відносною похибкою. Тоді абсолютну похибку можна визначити як $\Delta = \delta \cdot |A|$. $\Delta_a = \delta_a \cdot |A|$

Приклади. Знайдемо похибки чисел.

1. Точне значення $A = 3{,}141592$, і наближене $a = 3.14$.

Абсолютна похибка $\Delta = |A-a| = |3.141592 - 3.14| = 0.001592$.

Відносна похибка $\delta = \dfrac{\Delta}{|A|} = \dfrac{0.001592}{3.141592} = 0.00507$.

2. $A = 1000000$, $a = 999996$;

$$\Delta = |1000000 - 999996| = 4, \quad \delta = \frac{4}{1000000} = 0.000004.$$

3. $A = 0.000012,\ a = 0.000009$.

$$\Delta = |0.000012 - 0.000009| = 0.000003, \quad \delta = \frac{0.000003}{0.000012} = 0.25.$$

З наведених прикладів можна зробити висновок, що якщо числа середні за значеннями, то різниці між абсолютною та відносною похибками майже немає, а чим далі числа віддаляються від одиниці в бік збільшення чи зменшення, тим кращим індикатором стає відносна похибка

Значущою цифрою наближеного числа називається будь-яка цифра в його десятковому записі, відмінна від нуля, або нуль, що стоїть між значущими цифрами, якщо він є представником збереженого десяткового розряду. Якщо абсолютна похибка наближеного числа не перевищує половини одиниць розряду, що виражений n-ю значущою цифрою, то n перших значущих цифр вважаються вірними. У математичних таблицях всі значущі цифри є вірними.

Говорять, що число a є наближенням числа A з n значущими цифрами, якщо n є найбільшим додатнім числом, для якого $\frac{|A-a|}{|A|} < \frac{10^{-n}}{2}$.

Приклади.

1. $A = 3{,}141592,\ a = 3{,}14$, $|A-a|/|A| = 0.0050 \le 10^{-2}/2$, отже a наближає число з двома значущими цифрами.

2. $A = 1000000,\ a = 999996$, $|A-a|/|A| = 0.000004 < 10^{-5}/2$, отже a наближає число з п'ятьма значущими цифрами.

3. $A = 0.000012,\ a = 0.000009$, $|A-a|/|A| = 0.25 < 10^{-0}/2$ a наближає число без значущих цифр.

Точність наближеного обчислення залежить не від кількості значущих цифр, а від кількості вірних значущих цифр. Якщо число містить надлишкову кількість невірних значущих цифр, то його округлюють. При виконанні допоміжних обчислень кількість значущих цифр має братись на 1-2 розряди більше ніж задана точність.

Якщо наближене число $a > 0$ має n вірних десяткових знаків, то відносна похибка обчислюється як $\delta \le \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{10}\right)^{n-1}$, де α – перша значуща цифра числа a.

Приклади.

1. Скільки десяткових знаків треба взяти для обчислення $\sqrt{22}$, щоб похибка не перевищувала 0,1%?

$$\alpha = 4,\ \delta = 0{,}001 \Rightarrow \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{1}{10}\right)^{n-1} < 0{,}001 \Rightarrow 10^{n-1} \ge \frac{4}{1000} = 250^{-1} \Rightarrow n \ge 4.$$

2. Скільки десяткових знаків треба взяти для обчислення $\lg 20$, щоб похибка не перевищувала 0,01%?

$$\alpha = 1,\ \delta = 0{,}0001 \Rightarrow \frac{1}{1} \cdot \left(\frac{1}{10}\right)^{n-1} < 0{,}0001 \Rightarrow 10^{n-1} \ge 10^{4} \Rightarrow n \ge 5.$$

Завдання 1. Вимірюємо товщину двох пластинок за допомогою гвинтового мікрометра з точністю до 0,001 мм. Товщина першої пластини біля 1 см, другої – приблизно 1 мм. Чому дорівнюють абсолютна та відносна похибки в обох випадках?

Розв'язок. Абсолютна похибка для першої та другої пластини дорівнює точності вимірювального приладу і становить $\Delta = 0{,}001$ мм. Відносна похибка для першої пластини дорівнює $\delta_1 = \frac{\Delta}{10} = 0{,}0001$ мм, що складає 0,001%, а другої – $\delta_2 = \frac{\Delta}{1} = 0{,}001\,\text{мм} = 0{,}1\%$.

Завдання 2. Маса атома водню дорівнює $1{,}673 \cdot 10^{-24}$ г. Абсолютна похибка вимірювання становить 10^{-27} г; маса електрона – $9{,}11 \cdot 10^{-28} \pm 10^{-30}$ г. Чому дорівнюють відносні похибки цих величин?

Розв'язок. Відносна похибка маси атома водню: $\delta_H = \dfrac{10^{-27}}{1{,}673 \cdot 10^{-24}} = 5{,}9772863 \cdot 10^{-4}$ г.

Відносна похибка маси електрона: $\delta_e = \dfrac{10^{-30}}{9{,}11 \cdot 10^{-28}} = 1{,}09767 \cdot 10^{-3}$ г.

Завдання 3. Вимірювання швидкості світла у вакуумі дає значення рівне $2{,}99796 \cdot 10^{8}$ м/с, швидкості звуку – 331,63 м/с. Абсолютні похибки складають відповідно 4000 і 0,04 м/с. Чому дорівнюють відносні похибки?

Розв'язок. Відносна похибка швидкості світла становить: $\delta_c = \dfrac{4000}{2{,}99796 \cdot 10^{8}} = 1{,}33424 \cdot 10^{-5}$ м/с.

Відносна похибка швидкості звуку: $\delta_c = \dfrac{0{,}04}{331{,}63} = 1{,}20616 \cdot 10^{-4}$м/с.

Похибка суми і різниці

Абсолютна похибка алгебраїчної суми декількох наближених чисел не перевищує суми абсолютних похибок цих чисел.

Нехай $x_1, x_2, \ldots x_n$ наближені числа, і $u = x_1 \pm x_2 \pm \ldots \pm x_n$ – їхня сума, то абсолютна похибка суми $\Delta u = \Delta x_1 \pm \Delta x_2 \pm \ldots \pm \Delta x_n$ і сума абсолютних похибок $|\Delta u| = |\Delta x_1| + |\Delta x_2| + \ldots + |\Delta x_n|$. В якості граничної абсолютної похибки суми можна взяти суму граничних похибок доданків.

Приклад. $a = 2{,}719 \pm 0{,}0013$, $b = 3.145 \pm 0{,}0002$. Абсолютна похибка суми чисел $a + b$ буде не перевищувати суми абсолютних похибок цих чисел $0{,}0013 + 0.0002$ ($a + b = 5{,}864 \pm 0{,}0015$).

Правило додавання наближених чисел:

1) виділяють число з найкоротшим десятковим записом;
2) інші числа округляють, лишаючи один або два знаки відносно довжини найкоротшого числа;
3) виконують додавання зі збереженням усіх цифр;
4) отриманий результат округляють на один знак.

При додаванні великої кількості чисел похибки з надлишком можуть компенсуватись похибками з недостачею і при додаванні результатів вимірів можна вважати, що $\Delta u = \sqrt{\Delta^2{}_{x_1} + \Delta^2{}_{x_2} + ...\Delta^2{}_{x_n}}$.

При додаванні округлених чисел до m-го розряду застосовується правило Чеботарьова: $\Delta u = \sqrt{3n} \cdot 0{,}5 \cdot 10^{-m}$, де $n > 10$ – кількість доданків.

Якщо серед доданків одне число має абсолютну похибку, що значно перевищує абсолютні похибки інших чисел, то можна в якості оцінки похибки суми взяти найбільшу абсолютну похибку цього числа.

Відносна похибка суми лежить між найменшою та найбільшою з відносних похибок доданків: $\min \delta_{xi} \le \delta_u \le \max \delta_{xj}$.

Якщо $a = 2{,}719 \pm 0{,}0013$, $b = 3.145 \pm 0{,}0002$, то відповідні відносні похибки цих чисел становлять: $\delta_a = \dfrac{0.0013}{2{,}7203} = 0.000477885$,

$\delta_b = \dfrac{0{,}0002}{3.1452} = 0.00006358896$. Відносна похибка суми буде лежати між значеннями відносних похибок доданків $\delta_b \le \delta_{a+b} \le \delta_a$.

Похибка різниці визначається і як похибка суми, і віднімання виконується за тим самим правилом, але необхідно уникати операції віднімання двох майже рівних і особливо малих чисел, бо виникає помилка втрати порядку.

Приклад. $a = 28{,}35$, $\Delta a = 0.01$; $b = 28{,}11$, $\Delta b = 0.01$, $\delta_a = \delta_b = 0{,}036\%$.

$a-b=0{,}24$, $\delta_{a-b}=\dfrac{0{,}2}{0{,}24}100\%=8{,}4\%$. Відносна похибка різниці у 233 рази більша, ніж відносна похибка кожного з чисел.

Похибка добутку

Відносна похибка добутку наближених чисел не перевищує суми відносних похибок співмножників. Нехай $x_1, x_2, ... x_n$ наближені числа і $u = x_1 \cdot x_2 \cdot ... \cdot x_n$ їхній добуток, то $\ln u = \ln x_1 + \ln x_2 + ... + \ln x_n$, абсолютна відносна похибка $\left|\dfrac{\Delta u}{u}\right| \le \left|\dfrac{\Delta x_1}{x_1}\right| + \left|\dfrac{\Delta x_2}{x_2}\right| + ... + \left|\dfrac{\Delta x_n}{x_n}\right|$ або $\delta \le \delta_1 + \delta_2 + ... + \delta_n$.

Якщо співмножники мають різну точність, то під числом m – кількість вірних десяткових знаків, розуміють число вірних десяткових знаків найменшого точного числа добутку.

Гранична похибка добутку обчислюється як $\delta_a = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{1}{\alpha_1} + \dfrac{1}{\alpha_2} + ... + \dfrac{1}{\alpha_n}\right)\left(\dfrac{1}{10}\right)^{m-1}$, де α_i – перші значущі цифри множників.

Приклад. Нехай $a = 15{,}36$ і $b = 12{,}582$. Коротшим числом є число a і кількість вірних десяткових знаків становить $m = 4$. Добуток чисел $u = 15.36 \cdot 12.582$, де їх перші цифри $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 1,$ тоді $\delta = \dfrac{1}{2}(1+1)\left(\dfrac{1}{10}\right)^{4-1} = 10^{-3}$.

Похибка операції ділення

Відносна похибка від ділення $u = x/y$ не перевищує суми відносних похибок чисельника і знаменника $\delta_u = \delta_x + \delta_y$, а гранична похибка дорівнює: $\delta = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{\beta}\right)\left(\frac{1}{10}\right)^{m-1}$, де α,β – перші значущі цифри чисельника і знаменника.

Якщо $\alpha,\beta > 2$, то результат ділення має не менше ніж $m-1$ вірних значущих цифр. Якщо $\alpha,\beta = 1$, то – $m-2$ вірних значущих цифр.

Похибка функцій

Абсолютну похибку неперервної функції $y = f(x)$, що обумовлена достатньо малою похибкою аргументу Δ_x можна оцінити величиною: $\Delta_y = |f(x)|\Delta_x$. Така оцінка є прийнятною, якщо максимальне значення другої похідної $f''(x)$ на інтервалі $(x-\Delta_x, x+\Delta_x)$ становить не більше 10% від величини відношення $|f'(x)| / \Delta_x$.

Похибка логарифмічних функцій

Абсолютна похибка натурального логарифма будь-якої величини дорівнює відносній похибці цієї величини: $\Delta_{\ln x} = \Delta_x / x = \delta_x$.

Абсолютна похибка десяткового логарифма приблизно складає 43% від відносної похибки самої величини: $\Delta_{\ln x} = 0.4343\delta_x$. Отже, при обчисленні логарифмів доцільно користуватись такими значеннями, в яких кількість десяткових знаків на одиницю більша, ніж задана точність.

Похибка степеневих і показникових функцій

Відносна похибка степеневої функції $y = x^n$ пропорційна відносній похибці аргументу: $\delta_y = |n|\delta_x$.

Відносна похибка показникової функції $y = a^x$ пропорційна абсолютній похибці аргументу: $\delta_y = \ln a \Delta_x$.

Похибка тригонометричних функцій

Абсолютна та відносна похибки тригонометричних функцій $\sin x$, $\cos x$ і $\mathrm{tg} x$ оцінюються за такими формулами:

$$\Delta_{\sin x} = |\cos x|\Delta_x \le \Delta_x; \qquad \delta_{\sin x} = |\mathrm{ctg} x|\Delta_x;$$

$$\Delta_{\cos x} = |\sin x|\Delta_x \le \Delta_x; \qquad \delta_{\cos x} = |\mathrm{tg} x|\Delta_x;$$

$$\Delta_{tgx} = \left(1+\mathrm{tg}^2 x\right)\Delta_x \ge \Delta_x; \qquad \delta_{tgx} = \left(|\mathrm{tg} x| + |\mathrm{ctg} x|\right)\Delta_x,$$

можна зауважити, що абсолютна похибка $\sin x$ і $\cos x$ не перевищує абсолютної похибки аргументу.

Абсолютна похибка диференційованої функції декількох аргументів

Абсолютна похибка функції $y = f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$ обумовлена похибками своїх аргументів: $\Delta_y = \left|\frac{\partial y}{\partial x_1}\right|\Delta x_1 + \left|\frac{\partial y}{\partial x_2}\right|\Delta x_2 + ... + \left|\frac{\partial y}{\partial x_n}\right|\Delta x_n$.

Лекція 2

Похибка усікання

Похибка усікання виникає тоді, коли складний математичний вираз заміщується більш простою формулою. Термін виник з техніки заміни складних функцій вкороченим рядом Тейлора. Елементарні функції можна розкласти у нескінченний ряд, але при обчисленні ми можемо брати лише перші члени ряду.

Приклад.

$$e^{x^2} = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} + .. + \frac{x^{2n}}{n!} + ...$$

Для обчислення ми можемо взяти п‘ять перших членів. Так

$$\int_0^{1/2} e^{x^2} dx = \int_0^{1/2} 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} dx = \left(x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5\cdot 2!} + \frac{x^7}{7\cdot 3!} + \frac{x^9}{9\cdot 4!}\right)_0^{1/2} =$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{24} + \frac{1}{320} + \frac{1}{5376} + \frac{1}{110592} \approx 0.544986720817.$$

Функція може наближатись за допомогою різних рядів і залежно від самого ряду та кількості його членів похибки будуть відрізнятись, причому швидкість збіжності наближення до точного значення також може бути різною.

Функція $f(x)$ має порядок збіжності $O(x)$ відносно функції $g(x)$, якщо існують такі константи C і $c>0$, що

$$|f(x)| \le C|g(c)| \text{ для } \forall x \le c.$$

І це позначають $f(x)=O(g(x))$. Наприклад, для $\forall x>1$ функція $g(x)=x^3$ приймає більше значення, ніж функція $f(x)=x^2+1$. Отже, можна сказати, що функція $f(x)$ має порядок збіжності $O(x)$ відносно функції $g(x)$ ($f(x)=O(g(x))$).

Якщо функція $f(x)$ наближається функцією $g(x)$ та існує константа $M \in R, M>0$ і $n \in Z, n>0$, що $\dfrac{|f(x)-g(x)|}{|x^n|}$, де x – достатньо мале, то говорять, що $g(x)$ наближає функцію $f(x)$ з порядком наближення $O(x^n)$ і можна записати: $f(x)=g(x)+O(x^n)$, де $O(x^n)$ є граничною похибкою:

$$O(x^{n+1}) \approx Mx^{n+1} \approx \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}h^{n+1}.$$

Теорема. Нехай $f(x)=g(x)+O(x^n)$ і $w(x)=u(x)+O(x^m)$, $r=\min\{n,m\}$, тоді:

1) $f(x)+w(x)=g(x)+u(x)+O(x^r)$;

2) $f(x)\cdot w(x)=g(x)\cdot u(x)+O(x^r)$;

3) $\dfrac{f(x)}{w(x)}=\dfrac{g(x)}{w(x)}+O(x^r)$, $w(x)\neq 0$ і $u(x)\neq 0$.

Якщо задано дві послідовності $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ і $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$, то говорять, що послідовність $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ має порядок збіжності $O(x)$ відносно послідовності $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ (позначається як $x_n = O(y_n)$), якщо існують такі константи $C \in R$ і $N \in N$, що виконується нерівність:

$$|x_n| \leq C|y_n|,\ \forall n \geq N.$$

Приклад. Нехай задано дві послідовності $\left\{\frac{1}{n}\right\}_{n=1}^{\infty}$ і $\left\{\frac{n-1}{n^2}\right\}_{n=1}^{\infty}$. Так як $\forall n \geq 1$ $\frac{n-1}{n^2} \leq \frac{1}{n}$, то можна говорити, що $\frac{n-1}{n^2} = O\left(\frac{1}{n}\right)$.

Похибка округлення

Помилка округлення пов'язана з обмеженим представленням мантиси десяткового числа. При комп'ютерних обчисленнях результати арифметичних операцій округляються і похибка поширюється на такі обчислення, тому необхідно вибирати тип даних для збереження значень, який на декілька розрядів довший, ніж задана точність.

Приклад. Обчислити значення виразу $y = 0{,}0000006673\frac{2{,}479163 \cdot 57{,}94312}{45{,}3^2}$ з точністю до шостого знаку.

Щоб обчислити цей вираз з найменшими втратами точності, краще спочатку обчислити значення дробу (спочатку чисельника, а потім його розділити на знаменник), результат помножити на 6,673 і потім отримане число помножити на 10^{-7}. Для досягнення заданої точності найменший придатний тип даних – double (дійсне подвійної точності (8 байт)).

Використання наближених і еквівалентних формул

При комп‘ютерних обчисленнях необхідно бути дуже уважними до представлення формул у тому чи іншому вигляді. Це пов‘язано з такими помилками, як зникнення порядку та ділення на нуль. Також треба пам‘ятати, що в пам’яті комп‘ютера всі дійсні числа представлені наближено та їх не можна безпосередньо порівнювати $x = y;\ x, y \in R$, а лише перевіряти на рівність з певним ступенем точності: $|y - x| < \varepsilon$.

Для уникнення фатальних помилок при виконані комп‘ютерних обчислень іноді доцільно математичні вирази заміщувати еквівалентними чи наближеними формулами, багато з яких беруться із розкладання функцій в ряд, але, при цьому, ні в якому разі не можна нехтувати оцінкою похибки.

Для степеневих функцій застосовують наближену формулу: $(a+b)^n \approx a^n + na^{n-1}b,\ a > 0, |b| << a$ з похибкою $n(n-1)a^{n-2}b^2 / 2$.

Для вилучення кореня степеня $m > 1$ маємо $\sqrt[m]{c^m + b} \approx c + b / mc^{m-1}$ з похибкою порядку $\frac{m-1}{2c}\left(\frac{1}{m}\frac{b}{c^{m-1}}\right)^2$. При діленні – $\frac{1}{a+b} \approx \frac{1}{a} - \frac{b}{a^2}$ з похибкою $\frac{b^2}{a^2} \approx a\left(\frac{b}{a^2}\right)^2$.

Така проста задача, як обчислення коренів квадратного рівняння $ax^2 + bx + c = 0$ при малих значеннях добутку $4ac$ може призводити до помилки зникнення порядку. Тому у таких випадках формулу коренів

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1}$$

можна замінити еквівалентною формулою помноживши формулу (1) на спряжене:

$$x_{1,2} = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}. \tag{2}$$

Зрозуміло, що для випадку $b > 0$, x_1 краще обчислювати за формулою (2), а x_2 – за формулою (1). При $b < 0$, навпаки – x_1 за формулою(1), а x_2 за формулою (2).

Виконуючи обчислення необхідно вибирати такі формули й алгоритми, які реалізують меншу кількість операцій і дають меншу похибку.

Обчислення значень багаточлена. Схема Горнера

Розглянемо алгебраїчний багаточлен

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n,$$

де $a_i, i = \overline{1,n}$ – числові коефіцієнти n – степінь багаточлена. Обчислити значення багаточлена при фіксованому значенні x можна декількома способами:

1) за допомогою багатократного множення знайти степені a, $a, a^2, a^3, ... a^n$, потім виконати ще n множень степенів на коефіцієнти і n додавань. Цей, на перший погляд найпростіший спосіб, вимагає виконання $3n-1$ арифметичних дій.

2) більш економічно можна обчислити значення багаточлена в заданій точці, якщо його переписати у такому вигляді: $P_n(x) = a_0 + x(a_a + .x(a_2 + .. + x(a_{n-2} + x(a_{n-1} + xa_n))...))$.

Тоді обчислення значення полінома зведеться до послідовного обчислення таких значень:

$$b_n = a_n;$$
$$b_{n-1} = a_{n-1} + xb_n;$$
$$b_{n-2} = a_{n-2} + xb_{n-1};$$
$$...$$
$$b_1 = a_1 + xb_2;$$
$$b_0 = a_0 + xb_1 = P_n(x).$$

Такий спосіб обчислення значення полінома називається схемою Горнера. За цією схемою для обчислення значення необхідно виконати лише n множень і n додавань ($2n$ операції). Вручну обчислити значення багаточлена за схемою Горнера можна за допомогою таблиці так:

	a_n	a_{n-1}	a_{n-2}	...	a_0
+		xb_n	xb_{n-1}	...	xb_1
	$b_n = a_n$	b_{n-1}	b_{n-2}	...	$b_0 = P_n(x)$

Приклад. Обчислити $P_5(x) = 1 - 4x + 3x^2 - x^3 + 2x^4 - x^5$ при $x = -1{,}5$.

	-1	2	-1	3	-4	1
+		-1,5	0,75	-0,375	3,9375	-0,09575
	-1	0,5	-0,25	2,625	-0,0625	0,90635= $P_5(-1{,}5)$

Якщо багаточлен є парною функцією, то його зручно представляти як:

$$P_{2k}(x) = a_0 + x^2\left(a_2 + x^2\left(a_4 + \ldots + x^2\left(a_{2k-4} + x^2\left(a_{2k-2} + x^2 a_{2k}\right)\right)\ldots\right)\right),$$

якщо непарною, то:

$$P_{2k+1}(x) = a_0 + x^2\left(a_1 + x^2\left(a_3 + \ldots + x^2\left(a_{2k-3} + x^2\left(a_{2k-1} + x^2 a_{2k+1}\right)\right)\ldots\right)\right).$$

Необхідно зауважити, що при обчисленні значень багаточленів з великими значеннями коефіцієнтів за допомогою комп‘ютера може виникнути значна втрата точності. Цього можна уникнути за рахунок використання рекурентних формул.

Лекція 3

Багаточлени Тейлора

Нехай задана функція $f(x) \in C_{n-1}[a,b]$. Багаточленом Тейлора n-го степеня функції f в точці $x_0 \in [a,b]$ називається багаточлен вигляду:

$$T_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k .$$

Багаточлен Тейлора має ту властивість, що в точці $x = x_0$ всі його похідні до n-го порядку включно співпадають з відповідними похідними функції f:

$$T_n^{(k)}(x_0) = f^{(k)}(x_0),\ k = 0,1,\ldots n.$$

Похибка, що виникає при заміні функції f на багаточлен Тейлора, виражається залишковим членом формули Тейлора $f(x) - T_n(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$, $x \in [a,b]$, ξ – деяка точка, що строго лежить між значеннями x і x_0 при $x \neq x_0$. Даний залишковий член записаний у формі Лагранжа, яка є зручною для обчислення оцінки похибки. Так як похідна $f^{(n+1)}$ неперервна на відрізку $x \in [a,b]$, то вона на цьому відрізку обмежена і

$$M_{n+1} = \max_{[a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right| < +\infty .$$

Тоді

$$\left| f(x) - T_n(x) \right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \left| x - x_0 \right|^{n+1}, \quad \max_{[a,b]} \left| f(x) - T_n(x) \right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} l^{n+1},$$

$l = \max\{|x_0 - a, b - x_0|\}$ або $\left| f(x) - T_n(x) \right| \le O(x^{n+1})$.

Для похибки апроксимації функції багаточленом Тейлора, характерно те, що вона достатньо швидко зменшується при наближенні $x \to x_0$ і різко зростає на кінці відрізку $[a,b]$, який віддалений від точки x_0. Нерівномірна апроксимація функції $f(x)$ на відрізку $[a,b]$ є недоліком багаточлена Тейлора. Другий недолік пов‘язаний з необхідністю обчислення похідних високих порядків. Не дивлячись на зазначені недоліки, ряд Тейлора має широке застосування для практичного знаходження значень елементарних функцій.

Приклад 1. Розкладемо в ряд Тейлора функцію $f(x) = 2^x$ в точці $x_0 = 1$ до п‘ятого члена ($n = 5$). Складемо таблицю:

k	$f^{(k)}(x_0)$	$n!$	$t_k(x_0)$
0	$2^x = 2^1 = 2$	0!=1	$\frac{f^{(0)}(x_0)}{0!}(x-1)^0 = 2$
1	$2^x \ln 2 = 1{,}386294$	1!=1	$\frac{f^{(1)}(x_0)}{1!}(x-1)^1 = 1{,}386294 \cdot (x-1)$
2	$2^x \ln^2 2 = 0{,}960906$	2!=2	$\frac{f^{(2)}(x_0)}{2!}(x-1)^2 = 0{,}480453 \cdot (x-1)^2$
3	$2^x \ln^3 2 = 0{,}666049$	3!=6	$\frac{f^{(3)}(x_0)}{3!}(x-1)^3 = 0{,}111008 \cdot (x-1)^3$
4	$2^x \ln^4 2 = 0{,}46167$	4!=24	$\frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}(x-1)^4 = 0{,}019236 \cdot (x-1)^4$
5	$2^x \ln^5 2 = 0{,}30005$	5!=120	$\frac{f^{(5)}(x_0)}{5!}(x-1)^5 = 0{,}002667 \cdot (x-1)^5$

Представлення функції $f(x) = 2^x$ в точці $x_0 = 1$ у вигляді ряду буде мати вигляд:

$$2^x = 2 + 1{,}386294(x-1) + 0{,}480453(x-1)^2 + 0{,}111008(x-1)^3 +$$
$$+ 0{,}019236(x-1)^4 + 0{,}002667(x-1)^5 + \ldots$$

Оцінимо максимальну похибку наближення на відрізку $[1;2]$:

$$\max_{[a,b]} |f(x) - T_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} l^{n+1} = \frac{2^2 \ln^6 2}{6!} 1^6 \approx 0.0006161.$$

Обчислимо точне значення функції для різних значень x та наближене, скориставшись формулою розкладу в ряд:

x	Точне значення	Наближене рядом
1,1	2,143547	2,071775
1,5	2,828427	2,414211
5	32	15,996073

Із таблиці видно як збільшується похибка значень функції при віддаленні від точки розкладу.

Ряд Тейлора в точці $x_0 = 0$ називається рядом Маклорена. Виходячи з наведених недоліків, зрозуміло, що рядом Маклорена треба користуватись обережно (використовувати для малих значень x).

Приклад 2. Розкласти в ряд Маклорена функцію $f(x) = \sin(x)$.

Розв'язок. Ряд Маклорена – це ряд Тейлора в точці $x = 0$. Складемо таблицю похідних і відповідних значень члена ряду:

k	$f^{(k)}(x)$	$t_k(x)$		k	$f^{(k)}(x)$	$t_k(x)$
0	$\sin(x) = 0$	0		4	$\sin(x) = 0$	0
1	$\cos(x) = 1$	$\frac{1}{1!}x^1 = x$		5	$\cos(x) = 1$	$\frac{1}{5!}x^5 = \frac{x^5}{120}$
2	$-\sin(x) = 0$	0		6	$-\sin(x) = 0$	0
3	$-\cos(x) = -1$	$\frac{-1}{3!}x^3 = -\frac{x^3}{6}$		7	$-\cos(x) = -1$	$\frac{-1}{7!}x^7 = -\frac{x^7}{5040}$

З отриманих членів розкладу можна помітити закономірність значень членів ряду. Видно, що ряд буде складатись лише з непарних членів і буде знакозмінним. Розклад функції $f(x) = \sin(x)$ у ряд Маклорена до 8-го члена буде мати такий вигляд (рис. 2):

$$\sin(x) \approx x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} - \frac{x^7}{5040} \ldots$$

$$f(x) := \sin(x) \qquad g(x) := 1 \cdot x - \frac{1}{6} \cdot x^3 + \frac{1}{120} \cdot x^5 - \frac{1}{5040} \cdot x^7$$

$$x := \frac{-\pi}{2}, \frac{-\pi}{2} + 0.1 \,..\, \pi \cdot \frac{3}{2}$$

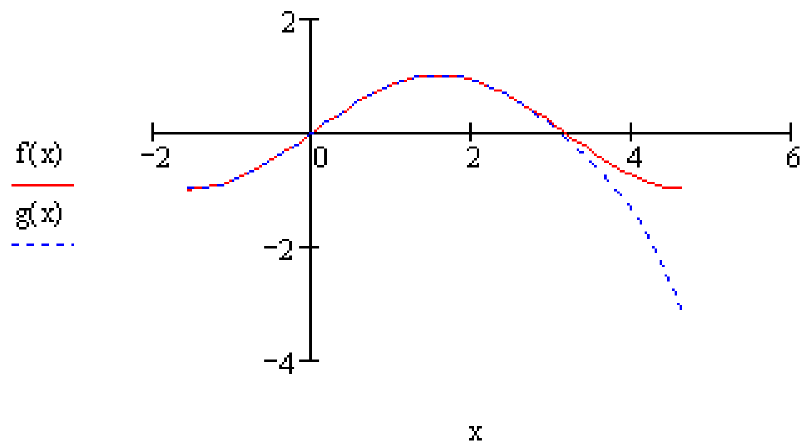


Рис. 2. Графік наближення функції $f(x) = \sin x$ рядом Маклорена

Похибку наближення рядом Маклорена можна побачити на графіку (див. рис. 2) побудованому за допомогою засобів MathCad. З рис. 2 видно, що при віддаленні від точки $x = 0$ (особливо це видно для $x > \pi$) графік наближеної функції $g(x)$ починає сильно відхилятись від графіка безпосередньої функції $f(x) = \sin x$.

Приклад 3. Наблизити многочленом Тейлора функцію $f(x) = e^x$ на відрізку $[0,1]$ з абсолютною похибкою, що не перевищує $\varepsilon \geq 10^{-5}$.

Розв'язок. Нехай $x = 0,5$ – середина відрізка, щоб мінімізувати похибку, похідні від функції: $f^{(k)}(x) = e^x$.

$$f^{(k)}(x) = e^{0,5},\ M_{n+1} = e,\ l = 0,5,\ \ T_n(x) = e^{0,5}\sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}(x-0,5)^k\ ,$$

$$\max_{[0,1]}\left|e^x - T_n(x)\right| \leq \frac{e}{(n+1)!2^{n+1}}\,.$$

Для оцінки залишкового члена складемо таблицю:

n	2	3	4	5	6
r_n	5,7*0,01	7,1*0,001	7,1*0,0001	5,9*0,00001	4,3*10^{-6}

Отже, для наближення із заданою точністю необхідно взяти 6 членів ряду.

Приклад 4. Розглянемо приклад суми і добутку функцій:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + ... + O\left(x^n\right)\ \ \cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + O\left(x^6\right).$$

Сума функцій та її оцінка буде мати такий вигляд:

$$e^x + \cos(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + O\left(x^4\right) + 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + O\left(x^6\right) =$$

$$= 2 + x + \frac{x^3}{3!} + O\left(x^4\right) + \frac{x^4}{4!} + O\left(x^6\right) = 2 + x + \frac{x^3}{3!} + O\left(x^4\right),\quad O\left(x^4\right) + \frac{x^4}{4!} =$$

$$= O\left(x^4\right), O\left(x^4\right) + O\left(x^6\right) = O\left(x^4\right).$$

Аналогічно можна знайти і оцінити добуток цих функцій:

$$e^x \cdot \cos(x) = (1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + O(x^4)) \cdot (1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + O(x^6)) =$$

$$= \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}\right)\left(1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!}\right) + \left(\left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}\right)\right)O(x^6) +$$

$$+ \left(1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!}\right)O(x^4) + O(x^6)O(x^4) = 1 + x - \frac{x^3}{3} - \frac{5x^5}{24} - \frac{x^5}{24} + \frac{x^6}{48} + \frac{x^7}{144} +$$

$$+ O(x^6) + O(x^4) + O(x^6)O(x^4) = 1 + x - \frac{x^3}{3} + O(x^4).$$

Ряд Фур‘є

З прикладів наближення функцій за допомогою ряду Тейлора, видно, що для періодичних функцій, які описують коливальні процеси цей ряд може не давати хорошого результату в околі деякої точки. Тому, в багатьох задачах, пов‘язаних з диференційними рівняннями чи коливальними процесами для наближення функції $f(x)$ з періодом T наближають тригонометричною сумою:

$$S_n(x) = \frac{a_0}{2} + a_1 \cos \omega x + a_2 \cos 2\omega x + ... + a_n \cos n\omega x +$$
$$+ b_1 \sin \omega x + b_2 \sin 2\omega x + ... + b_n \sin n\omega x,$$

де $\omega = 2\pi / T$ (якщо $T = 2\pi$, то $\omega = 1$). Таке наближення буде найкращим, якщо коефіцієнти $a_i, b_i, i = 0,1,2,...$ є коефіцієнтами Фур‘є для даної функції:

$$a_i = \frac{2}{T}\int_0^T f(x)\cos i\omega x dx = \frac{2}{T}\int_{x_0}^{x_0+T} f(x)\cos i\omega x dx = \frac{2}{T}\int_0^{T/2}(f(x) - f(-x))\cos i\omega x dx;$$

$$b_i = \frac{2}{T}\int_0^T f(x)\sin i\omega x dx = \frac{2}{T}\int_{x_0}^{x_0+T} f(x)\sin i\omega x dx = \frac{2}{T}\int_0^{T/2}(f(x) - f(-x))\sin i\omega x dx$$

(формули Ейлера).

Якщо для заданого x, $S_n(x)$ при $n \to \infty$ має границю, то ряд Фур‘є буде збіжним і $f(x) = S(x)$. Ряд Фур‘є можна записати в іншому вигляді:

$S(x) = a_0 / 2 + A_1 \sin(\omega x + \varphi_1) + A_2 \sin(2\omega x + \varphi_2) + \ldots + A_n \sin(n\omega x + \varphi_n) + \ldots,$
де $A_i = \sqrt{a_i^2 + b_i^2}$ і $tg\varphi_i = a_i / b_i$.

У комплексному вигляді ряд Фур‘є можна записати таким чином:

$$S(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\omega x}, \text{ де } c_n = \frac{1}{T}\int_0^T f(x) e^{-in\omega x} dx = \begin{cases} 1/2\,(a_n - ib_n), & n > 0 \\ 1/2\,(a_{-n} + ib_{-n}), & n < 0 \end{cases}.$$

Знаходження ряду Фур‘є є задачею гармонічного аналізу.

Основні властивості ряду Фур‘є:

1) при наближенні функції $f(x)$ тригонометричною сумою

$$S_n(x) = a_0 / 2 + \sum_{i=1}^{n} a_i \cos i\omega x + \sum_{i=1}^{n} b_i \sin i\omega x$$

середньоквадратична похибка $E^2 = \frac{1}{T}\int_0^T (f(x) - S_n(x))^2 dx$ буде найменшою, якщо в якості коефіцієнтів $a_i, b_i, i = 0,1,2,\ldots$ взяти коефіцієнти Фур‘є даної функції;

2) для будь-якої обмеженої і кусково-неперервної функції $f(x)$ на інтервалі $0 < x < T$ ряд Фур‘є збігається в середньому до даної функції: $\int_0^T (f(x) - S_n(x))^2 dx \to 0, \quad n \to \infty$. Зі збіжності ряду випливає, що

$\frac{2}{T}\int_0^T f^2(x) dx = \frac{a_0^2}{2} + \sum_{i=1}^{\infty}\left(a_i^2 + b_i^2\right)$ (рівність Паскаля);

3) якщо функція $f(x)$ задовольняє умову Діріхлє, а саме: а) інтервал, на якому вона визначена можна розбити на скінченне число підінтервалів, на кожному з яких функція $f(x)$ неперервна і монотонна; б) в кожній точці розриву існує $f(x+0)$ і $f(x-0)$, то ряд Фур‘є збігається і його сума дорівнює $f(x)$ в точках неперервності та $\frac{f(x-0) + f(x+0)}{2}$ в точках розриву;

4) якщо функція $f(x)$ періодична та неперервна зі своїми похідними до k-го порядку включно, то $a_n n^k \to 0$ і $b_n n^k \to 0$ при $n \to \infty$.

Якщо функція $f(x)$:

1) парна ($f(x)= f(-x)$), то маємо симетрію I-го роду і

$$a_i = \frac{4}{T}\int_0^{T/2} f(x)\cos i\frac{2\pi x}{T}dx,\ b_i = 0,\ i = 0,1,2,...;$$

2) непарна ($-f(x)= f(-x)$), то маємо симетрію II-го роду і

$$a_i = 0,\ b_i = \frac{4}{T}\int_0^{T/2} f(x)\sin i\frac{2\pi x}{T}dx,\ i = 0,1,2,...;$$

3) $f(x+T/2) = -f(x)$, то маємо симетрію III-го роду і

$$a_{2i+1} = \frac{4}{T}\int_0^{T/2} f(x)\cos(2i+1)\frac{2\pi x}{T}dx,\ a_{2i} = 0;$$

$$b_{2i+1} = \frac{4}{T}\int_0^{T/2} f(x)\sin(2i+1)\frac{2\pi x}{T}dx,\ b_{2i} = 0,\ i = 0,1,2,....$$

Якщо функція $f(x)$ має симетрію III-го роду і

- непарна, то $a_i = b_{2i} = 0$, $b_{2i+1} = \frac{8}{T}\int_0^{T/4} f(x)\sin(2i+1)\frac{2\pi x}{T}dx$, $i = 0,1,2,...;$
- парна, то $a_{2i} = b_i = 0$, $a_{2i+1} = \frac{8}{T}\int_0^{T/4} f(x)\cos(2i+1)\frac{2\pi x}{T}dx$, $i = 0,1,2,....$

Для розкладу в ряд Фур‘є неперіодичних функцій, які задовольняють умову Діріхлє на проміжку $0 \le x \le l$ користуються такими формулами:

1)
$$f_1(x) = \frac{a_0}{2} + a_1\cos\frac{2\pi x}{l} + a_2\cos 2\frac{2\pi x}{l} + ... + a_n\cos n\frac{2\pi x}{l} + ...$$
$$+ b_1\sin\frac{2\pi x}{l} + b_2\sin 2\frac{2\pi x}{l} + ... + b_n\sin n\frac{2\pi x}{l};$$

2) $$f_2(x) = \frac{a_0}{2} + a_1\cos\frac{\pi x}{l} + a_2\cos 2\frac{2\pi x}{l} + ... + a_n\cos n\frac{\pi x}{l} + ...;$$

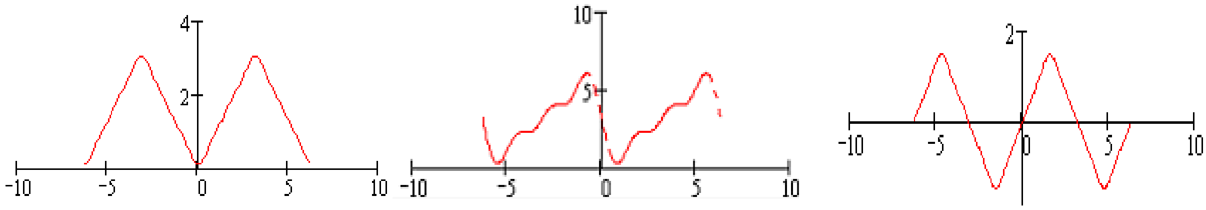
3) $$f_3(x) = b_1\sin\frac{\pi x}{l} + b_2\sin 2\frac{2\pi x}{l} + ... + b_n\sin n\frac{\pi x}{l} + ...,$$

де функція $f_1(x)$ періодична з періодом $T = l$ і на проміжку $0 \le x \le l$ співпадає з функцією $f(x)$ (коефіцієнти розкладу знаходяться за формулами Ейлера при $\omega = 2\pi/l$). Функція $f_2(x)$ має період $T = 2l$ і симетрію I-го роду (коефіцієнти розкладу знаходяться для випадку симетрії I-го роду при $T = 2l$). Функція $f_3(x)$ має період $T = 2l$ і симетрію II-го роду (коефіцієнти розкладу знаходяться для випадку симетрії II-го роду при $T = 2l$).

Приклад. Функція $f(x) = \sin x$ для $0 \le x \le \pi$ має таке розкладення у ряд Фур‘є: $f(x) = \frac{2}{\pi} - \frac{4}{\pi}\left(\frac{\cos 2x}{1\cdot 3} + \frac{\cos 4x}{3\cdot 5} + \frac{\cos 6x}{5\cdot 7} + \ldots\right)$.

Приклад. Представимо розклад у ряд Фур‘є функції $f(x) = x$ (рис.3):

- для $0 \le x \le \pi$ $f(x) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi}\left(\cos x + \frac{\cos 3x}{3^2} + \frac{\cos 5x}{5^2} + \ldots\right)$;
- для $0 \le x \le 2\pi$ $f(x) = \pi - 2\left(\sin x + \frac{\sin 2x}{2} + \frac{\sin 3x}{3} + \ldots\right)$;
- для $-\pi/2 \le x \le \pi/2$ $f(x) = \frac{4}{\pi}\left(\sin x - \frac{\sin 3x}{3^2} + \frac{\sin 5x}{5^2} - \ldots\right)$.



а *б* *с*

Рис. 3 Наближення функції $f(x) = x$ рядом Фур‘є:

$a - 0 \le x \le \pi$; $б - 0 \le x \le 2\pi$; $c - -\pi/2 \le x \le \pi/2$

Поняття коректності математичної задачі

Більшість математичних задач пов‘язана з дослідженням функцій або розв‘язанням рівнянь, які цими функціями описуються.

Для того, щоб отримати прийнятний розв‘язок математичної задачі, яка у загальному вигляді може бути представлена як $y = A(x)$, де A – деякий оператор, необхідно, що б вона була коректною. Задача вважається коректною, якщо для будь-яких вхідних даних вона задовольняє три основні вимоги:

1) розв‘язок задачі – y існує;
2) цей розв‘язок є єдиним;
3) розв‘язок є стійким до значень аргументу.

Щоб чисельно розв‘язувати задачу необхідно бути певним, що вона коректна, а, отже, розв‘язок задачі існує й алгоритм, за допомогою якого він відшукується, дає однозначний результат.

Розв‘язок практичних задач спирається на вхідні дані $\{x_i\}_{i=1}^{n}$, які містять похибки різного походження, а, отже, і результат $\{y_i\}_{i=1}^{n}$ також буде мати похибку. Якщо розв‘язок неперервно залежить від значень аргументу (норма похибки прямує до нуля), то розв‘язок називається стійким, у протилежному випадку – нестійким. Іншими словами, умова стійкості вимагає, щоб незначні зміни значень вхідних даних призводили до незначних змін результату (в протилежному випадку наявність похибки може призвести до суттєвого спотворення розв‘язку задачі).

Запитання для самоконтролю

1. Яке число називається наближеним? Чи можна вважати, що дані, отримані в результаті експериментів шляхом вимірювань, є точними числами?
2. Що таке вірна значуща цифра числового значення? Як оцінити похибку табличного значення?
3. Яким терміном називають невизначеність або похибку у даних?
4. Як оцінюється абсолютна (відносна) похибка? Яка похибка є кращим індикатором точності малих за абсолютним значення чисел?
5. За яким правилом виконується додавання наближених чисел? Як оцінюється похибка суми чи різниці наближених чисел?
6. Як оцінюється похибка добутку двох наближених чисел?

7. Що треба брати до уваги при виконанні ділення двох наближених чисел і як можна уникати виникнення „фатальних” помилок?

8. Перерахуйте джерела виникненню похибки усікання.

9. Що таке похибка округлення та джерела її виникнення?

10. Які числові ряди найчастіше застосовують для наближеного обчислення функції в точці?

11. За допомогою яких прийомів можна обчислити значення визначеного інтеграла, якщо він не береться аналітично?

12. За допомогою яких числових рядів краще наближати періодичні функції?

13. Які вимоги коректності має задовольняти математична задача?

14. Яким чином необхідно організовувати процес обчислення для зменшення похибки результату?

2. ЕЛЕМЕНТИ ТЕОРІЇ АПРОКСИМАЦІЇ

Лекція 4

Інтерполяція та наближення поліномами

Інтерполяція – це відтворення (наближення) виду деякої функції $f(x)$ в точках $(x_i.y_i)$, $x_i \in [a,b]$, $i=\overline{0,n}$ за допомогою функції наближення $\varphi(x)$ так, щоб виконувалась умова $f(x_i)=\varphi(x_i)$ $\forall x_i$, $i=\overline{0,n}$.

Найчастіше застосовується інтерполяція у вигляді полінома $P_n(x)$ на проміжку $[a,b]$ так, щоб значення цього полінома при заданих значеннях x_i, які називаються вузлами інтерполяції, точно дорівнювало б заданим значенням функції $f(x_i)=y_i$ або цю умову можна записати так: $\sum\limits_{j=0}^{n} a_j x_i^j = f(x_i) = P_n(x) = \sum\limits_{j=0}^{n} a_j x_i^j$; $i=1,2,...,n$.

Процес побудови полінома $P_n(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+...+a_nx^n$ полягає у відшуковуванні його коефіцієнтів a_i, $i=\overline{1,n}$, які є елементами вектора розв‘язку системи лінійних рівнянь $X \cdot \vec{a} = \vec{f}$, де вектор $\vec{f}$ – значення $y_i = f(x_i)$, а матриця X має такий вигляд:

$$X = \begin{bmatrix} x_0^0 & x_0^1 & x_0^2 & \cdot & \cdot & x_0^n \\ x_1^0 & x_1^1 & x_1^2 & \cdot & \cdot & x_1^n \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_n^0 & x_{1n}^1 & x_n^2 & \cdot & \cdot & x_n^n \end{bmatrix}$$

і називається матрицею Вандермонда, її визначник $\det X = \prod_{i,j=0,i \neq j}^{n} (x_i - x_j)$ відмінний від нуля, коли $x_i \neq x_j$. Отже розв‘язок задачі поліноміальної інтерполяції існує і він єдиний.

Зрозуміло, що для побудови полінома n-го степеня необхідно мати значення в $n+1$ точці (кількість коефіцієнтів полінома на одиницю більша ніж його степінь). Наближення функції поліномом називається параболічною інтерполяцією.

Інтерполяційний багаточлен однозначно визначається вузлами інтерполяції та значеннями функції в них. Так, якщо вони отримані шляхом експериментальних вимірювань, то вони мають похибку приладів, похибку методу експерименту, похибку випадкових впливів зовнішнього середовища.

Оскільки багаточлен зберігає значення функції у вузлах інтерполяції, то йому притаманні і всі похибки значень точок інтерполяції, більш того, він може навіть посилювати так званий „шум” експерименту. Тому інтерполяція практично застосовується у тих випадках, де цими похибками можна знехтувати, наприклад, при роботі з таблицями та графіками (їхнє заміщення у розрахунках інтерполяційним поліномом).

Інтерполяційний багаточлен Лагранжа

Інтерполяційний поліном Лагранжа $P_n(x)$ записують у вигляді:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) y_i \,,$$

де y_i – значення функції у вузлах інтерполяції, а $L_i(x)$ визначаються як:

$$L_i(x)=\frac{(x-x_o)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} \text{ при } i=\overline{1,n}$$

визначаються тільки вузлами інтерполяції і набувають в них значення:

$$L_i(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}.$$

Формула Лагранжа дає простий вираз інтерполяційного багаточлена через задані значення функції y_i і при фіксованих вузлах інтерполяції легко програмується. Для підбору степеня інтерполяційного полінома всі вузли можна зберігати у файлі та за необхідності вибирати потрібну їх кількість.

Оскільки інтерполяційний багаточлен Лагранжа лінійно залежить від значень функції, то інтерполяційний багаточлен від суми $f(x)+g(x)$ буде дорівнювати сумі інтерполяційних багаточленів $P_n(x)+Q_n(x)$, де $f(x)=P_n(x)$ і $g(x)=Q_n(x)$.

Для часткового випадку лінійної інтерполяції (наближення функції багаточленом 1-го степеня) за двома вузлами, формула Лагранжа буде мати вигляд:

$$P(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_1}{x_1-x_0}y_1$$

або якщо її записати за допомогою визначника, то

$$P(x)=\frac{1}{x_1-x_0}\begin{vmatrix}x-x_0 & y_0\\ x-x_1 & y_1\end{vmatrix}.$$

Похибку параболічної інтерполяції можна оцінити за допомогою залишкового члена ряду, який можна записати таким чином:

$$f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+`)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

де точка ξ належить інтервалу, на якому розміщені вузли інтерполяції. Якщо на цьому інтервалі відоме найбільше значення

$\left|f^{(n+1)}(x)\right|$, яке будемо позначати M_{n+1}, то оцінити похибку можна за такою формулою:

$$|f(x)-P_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|.$$

Похибку лінійної інтерполяції можна оцінити величиною:

$$|f(x)-P(x)| \le \frac{M_2}{2}|(x-x_0)(x-x_1)|,$$

де $M_2 = \max|f''(\xi)|, \quad \xi \in [a,b]$ – інтервалу інтерполяції.

Для табличних функцій, аналітична форма яких невідома, застосувати такі оцінки досить важко і це обмежує практичне використання формули Лагранжа. Також до недоліків цієї формули можна віднести той факт, що результуючий степінь полінома буде відомим лише при розкритті всіх дужок і зведенні подібних, а, отже, формула не пристосована до нарощування вузлів інтерполяції (для збільшення степеня полінома необхідно виконати повний перерахунок усіх коефіцієнтів).

Приклад. Нехай у результаті серії проведених експериментів дослідження роботи деякої системи була отримана така таблиця даних:

№ іспиту	x_i	y_i
1	0,1	0,5
2	0,17	0,1
3	0,3	0,9
4	0,37	1,7
5	0,4	2,9

де x_i – значення на вході системи; y_i – значення на виході. Нанесемо табличні дані на графік (рис. 4).

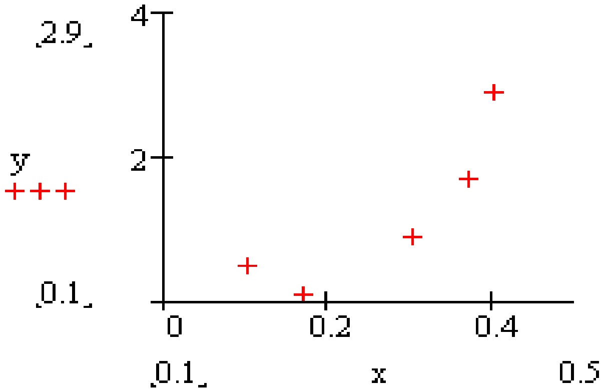


Рис. 4. Розташування табличних точок на графіку

З розташування точок на графіку можна зробити припущення, що функція, яка описує роботу системи є поліномом другого степеня. Для побудови такого полінома достатньо три точки. Виберемо точки, на основі яких буде будуватись наближення і які з точки зору системи є найбільш важливими. Нехай опорними будуть точки 1, 2, 4. Тоді інтерполяційний поліном Лагранжа буде мати вигляд:

$$L_2(x) = 0{,}5\frac{(x-0{,}17)(x-0{,}37)}{(0{,}1-0{,}17)(0{,}1-0{,}37)} + 0{,}1\frac{(x-0{,}1)(x-0{,}37)}{(0{,}17-0{,}1)(0{,}17-0{,}37)} +$$
$$+1{,}7\frac{(x-0{,}1)(x-0{,}17)}{(0{,}37-0{,}1)(0{,}37-0{,}17)} = 59{,}793651x^2 - 19{,}42871x + 1{,}934921.$$

Побудувавши інтерполяційний поліном, можна за його допомогою визначити значення функції, яка описує роботу системи, для будь-якого значення $x \in [0{,}1;0{,}4]$, наприклад, $f(0{,}25) = 0.25238$.

Інтерполяція з постійним кроком

Якщо розглядати задачу інтерполяції з вузлами, які рівновіддалені (крок інтерполяції h const), то вигляд інтерполяційного полінома можна спростити.

Нехай $x_i = x_0 + ih$, $i = \overline{0,n}$ – вузли інтерполяції, $h > 0$ – заданий крок і $y_i = f(x_i)$. Введемо такі позначення:

$$q = \frac{x - x_0}{h}, \; (x = x_0 + qh).$$

Тоді для i-го вузла можна записати:

$$q = q_i = \frac{x_i - x_0}{h} = \frac{x_0 + ih - x_0}{h} = i \text{ і } x - x_j = h(q - j),\ x_i - x_j = h(i - j),$$

інтерполяційний багаточлен Лагранжа при $n = 1$ буде мати вигляд:

$$f(x) \approx L_1(x) = L_1(x_0 + qh) = (1 - q)y_0 + qy_1.$$

при $n = 2$:

$$f(x) \approx L_2(x) = L_2(x_0 + qh) = \frac{(q-1)(q-2)}{2} y_0 - q(q-2)y_1 + \frac{q(q-1)}{2} y_2.$$

У загальному випадку інтерполяційний багаточлен з рівновіддаленими вузлами можна представити рекурентними формулами:

$$L_n(x) = L_n(x_0 + qh) = \sum_{i=0}^{n} p_{ni}(q) y_i\ ,$$

де $p_{ni}(q) = (-1)^{n-i} \dfrac{q(q-1)\ldots(q-i+1)(q-i-1)\ldots(q-n)}{i!\cdot(n-i)!}$.

Якщо ввести позначення:

$$\varpi_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) = h^{n+1}\overline{\varpi}_n(q),$$

де $\overline{\varpi}_n(q) = q(q-1)\ldots(q-n)$, то залишковий член інтерполяційного багаточлена можна представити так:

$$R_n(x) = R_n(x_0 + qh) = h^{n+1}\overline{\varpi}_n(q)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

де $f^{(n+1)}(\xi)$ – похідна в точці, що належить проміжку інтерполяції.

Оцінку максимальної похибки можна задати таким співвідношенням:

$$\max_{[x_0, x_n]} \left| f(x) - L_n(x) \right| \le h^{n+1} \frac{M_{n+1}^h}{(n+1)!} \Omega_n, \tag{1}$$

де $\Omega_n = \max\limits_{[0,n]} \left| \overline{\varpi}(q) \right|$, $M_{n+1}^h = \max\limits_{[x_0, x_n]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$.

Величина Ω_n не залежить від h, тому її можна зразу оцінити. Якщо $[x_0, x_n] \subset [a, b]$, то $M_{n+1}^h \le M_{n+1} = \max\limits_{[a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$.

Користуючись посиленою оцінкою похибки з формули (1) можна вибирати крок інтерполяції для забезпечення заданої точності. При цьому можна варіювати степенем полінома n. Якщо функція досить гладка, то збільшення степеня спочатку веде до збільшення кроку інтерполювання, але з другого боку ускладнює інтерполяцію і підсилює можливі похибки (збільшення степеня будує багаточлен, більш чутливий до коливань). Тому на практиці дуже рідко застосовуються інтепроляційні многочлени степеня $n \ge 5$.

Приклад. Нехай функція задана своїми табличними значеннями, які мають постійний крок $h = 0{,}5$:

№	x_i	y_i
1	0,5	1,125
2	1,0	2.5
3	1,5	5,125
4	2,0	9,0

Визначимо $q = \dfrac{x - 0{,}5}{0{,}5}$, тоді

$$f(x) \approx L_3(x) = L_3(x_0 + qh) =$$

$$= -\frac{(q-1)(q-2)(q-3)}{6} y_0 + \frac{q(q-2)(q-3)}{2} y_1 - \frac{q(q-1)(q-3)}{2} y_2 + \frac{q(q-1)(q-2)}{6} y_3.$$

Щоб визначити значення полінома в точці $x = 1{,}7$, обчислимо $q = \dfrac{1{,}7 - 0{,}5}{0{,}5} = 2{,}4$ і підставимо у формулу інтерполяційного полінома, отримаємо $f(x) \approx 6{,}525$.

Лекція 5

Процес Ейткена (розділені різниці)

Інтерполяційний процес Ейткена застосовують у тих випадках, коли необхідно лише обчислити значення функції в заданій точці (найпростіша задача інтерполяції). Постановку такої задачі можна представити так: нехай задана таблиця функції $y = f(x)$ у певних точках і необхідно обчислити її наближене значення із заданою точністю у точці, яка не представлена у таблиці. При цьому, табличні значення використовуються як вузли інтерполяції. Основна ідея розв‘язку задачі полягає у поступовому нарощуванні вузлів інтерполяції, а, отже, і степені полінома, для досягнення необхідної точності обчислень.

Метод Ейткена задає простий алгоритм, який можна легко реалізувати, для побудови інтерполяційного багаточлена з поступовим нарощуванням вузлів. Для запису інтерполяційного багаточлена застосовують індекси, які визначають номера вузлів інтерполяції, так на першому кроці:

$$P_{i,j}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0}\begin{vmatrix} x - x_i & y_i \\ x - x_j & y_j \end{vmatrix}.$$

Багаточлен у вузлах x_0 і x_1 буде записується таким чином:

$$P_{0,1}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0}\begin{vmatrix} x - x_0 & y_0 \\ x - x_1 & y_1 \end{vmatrix}.$$

Аналогічно для вузлів інтерполяції x_0 і x_2 він буде мати вигляд:

$$P_{0,2}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0}\begin{vmatrix} x - x_0 & y_0 \\ x - x_2 & y_2 \end{vmatrix}.$$

Після побудови багаточленів $P_{0,1}$ і $P_{0,2}$, будується інтерполяційний багаточлен другого степеня для вузлів x_0, x_1 і x_2 за формулою:

$$P_{0,1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1}\begin{vmatrix} x - x_1 & P_{0,1}(x) \\ x - x_1 & P_{0,2}(x) \end{vmatrix}.$$

Продовження цього процесу приводить до формули загального алгоритму Ейткена:

$$P_{0,1,\ldots,k,k+1}(x) = \frac{1}{x_{k+1} - x_k}\begin{vmatrix} x - x_k & P_{0,1,\ldots,k-1,k}(x) \\ x - x_{k+1} & P_{0,1,\ldots,k-1,k+1}(x) \end{vmatrix}.$$

Багаточлени $P_{0,1,2,\ldots,k}(x)$ ще називають розділеними різницями.

Як видно з рекурентної формули, на відміну від інтерполяційної формули Лагранжа, багаточлен Ейткена дозволяє нарощувати степінь полінома. Результати обчислень записують у таблицю:

i	x_i	$x-x_i$	y_i	$P_{0,i}(x)$	$P_{0,1,i}(x)$	$P_{0,1,2,i}(x)$	…
0	x_0	$x-x_0$	y_0	–	–	–	…
1	x_1	$x-x_1$	y_1	$P_{0,1}(x)$	–	–	…
2	x_2	$x-x_2$	y_2	$P_{0,2}(x)$	$P_{0,1,2}(x)$	–	…
3	x_3	$x-x_3$	y_3	$P_{0,3}(x)$	$P_{0,1,3}(x)$	$P_{0,1,2,3}(x)$	…
4	…	…	…	…	…	…	…

Для прискорення збіжності обчислень, вузли краще рівномірно нарощувати по обидві частини від заданої точки (так щоб шукане значення було розташоване у середині таблиці).

Приклад. Обчислити $\lg 4{,}5$ за заданою таблицею з кроком 0,2 з точністю до 4-го знака ($\varepsilon = 0{,}0001$):

x	$y = \lg x$
4,0	0,60206
4,2	0,62325
4,4	0,64345
4,6	0,66276
4,8	0,68124
5,0	0,69879

Розв‘язок. Побудуємо розрахункову таблицю розділених різниць:

i	x_i	$x-x_i$	y_i	$P_{0,i}(x)$	$P_{0,1,i}(x)$	$P_{0,1,2,i}(x)$
0	4,0	0,5	0,60206	–	–	–
1	4,2	0,3	0,62325	0,655035	–	–
2	4,4	0,1	0,64345	0,653797	0,653178	–
3	4,6	-0,1	0,66276	0,652643	0,653241	0,653210
4	4,8	-0,3	0,68124	0,651547	0,653291	0,653206

Розділена різниця третього порядку вже дає необхідну точність і можна вважати, що $\lg 4{,}5 = 0{,}65321$. Для досягнення точності розрахунки у таблиці беруть з надлишковим знаком.

Розв‘язок рівняння за таблично заданою функцією

Нехай необхідно розв‘язати нелінійне рівняння, задане функцією $y = f(x)$, яка має лише свої значення в околі точки кореня і є на проміжку її задання монотонною, що забезпечує існування єдиного кореня.

Рівняння, яке необхідно розв‘язати, має вигляд $f(x)=0$, звідси можна записати, що $x = g(0)$. Отже задача відшуковування кореня зводиться до обчислення значень оберненої функції $x = g(y)$ в точці $y = 0$. Відшукувати значення функції можна, застосовуючи інтерполяційні ітерації Ейткена.

Розташування кореня рівняння можна визначити за зміною знака значення y. Нехай функція змінює знак при переході від x_0 до x_1, тоді для процесу Ейткена за початкові значення приймають y_0 і y_1. Точність кореня визначається за співпаданням знаків у послідовних ітераціях.

Приклад. Розв‘язати рівняння $e^{-x} - x = 0$, використовуючи таблицю функції e^{-x} з кроком $h = 0{,}05$:

x	e^{-x}	$e^{-x} - x = y$
0,50	0,60653	0,10653
0,55	0,57695	0,02695
0,60	0,54881	-0,05119
0,65	0,52205	-0,12795

Розв‘язок. З таблиці видно, що функція змінює знак при переході від другого до третього значень рядків таблиці, отже, корінь рівняння лежить між значеннями $x_1 = 0{,}55$ і $x_2 = 0{,}60$. Для знаходження кореня побудуємо розрахункову таблицю:

i	$e^{-x_i} - x_i = y_i$	$0 - y_i$	x_i	$P_{0,i}(x)$	$P_{0,1,i}(x)$
0	0,02695	0,02695	0,55	–	–
1	0,05119	0,05119	0,60	0,567245	–
2	0,10653	0,10653	0,50	0,566933	0,567144
3	0,12795	0,12795	0,65	0,567398	0,567142

Як видно з таблиці, можна вважати, що корінь рівняння з точністю до $\varepsilon = 10^{-5}$ дорівнює $x = 0{,}56714$.

Інтерполяційний поліном Ньютона. Скінченні різниці

Скінченні різниці. Нехай $x_k = x_0 + kh$, де k – ціле число, $h > 0$ і $f_k = f(x_k)$. Тоді величина:

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

називається скінченною різницею першого порядку функції $f(x)$ в точці x_k, вираз:

$$\Delta^2 f_k = \Delta(\Delta f_k) = \Delta f_{k+1} \Delta f_k = (f_{k+2} - f_{k+1}) - (f_{k+1} - f_k) = f_k - 2f_{k+1} + f_{k+2}$$

буде представляти скінченну різницю другого порядку. Скінченну різницю n-го порядку можна обчислювати за рекурентною формулою:

$$\Delta^n f_k = \Delta\left(\Delta^{n-1} f_k\right) = \Delta^{n-1} f_{k-1} - \Delta^{n-1} f_k,$$

де $n \geq 1$, $\Delta^0 f_k = f_k$.

При обчисленні скінченних різниць, зручно записувати їх у таку таблицю:

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$	...
x_0	f_1	...	...	...	...
x_1	f_1	Δf_0	...	...	...
x_2	f_2	Δf_1	$\Delta^2 f_0$	...	...
x_3	f_3	Δf_2	$\Delta^2 f_1$	$\Delta^3 f_0$	...
x_4	f_4	Δf_3	$\Delta^2 f_2$	$\Delta^3 f_1$	...
...	...	...	...	...	

Для скінченних різниць справедливою є наступна лема.

Лема. Якщо $f \in [x_k, x_{k+1}]$, то існує така точка $\xi \in (x_k, x_{k+1})$, що $\Delta^n f_k = h^n f^{(n)}(\xi)$.

Наслідок. Скінченна різниця n-го порядку алгебраїчного багаточлена n-го степеня є постійною величиною (не залежить від k), а скінченні різниці вищих порядків дорівнюють нулю.

Часто у практичних задачах заздалегідь невідомий степінь полінома для отримання кращого наближення. Якщо в таких випадках застосовувати поліном Лагранжа, то це призведе до великої кількості обчислень. Краще застосувати такі поліноми, які дозволяють нарощувати степінь без виконання повного перерахунку. Таку властивість має інтерполяційний поліном Ньютона:

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

який отримується за допомогою рекурентного співвідношення:

$$P_n(x) = P_{n-1}(x) + a_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}).$$

Інтерполяційний багаточлен Ньютона для будь-яких точок можна записати через розділені різниці:

$$P_x(x) = f_0 + (x - x_0) f(x_0; x_1) + (x - x_0)(x - x_1) f(x_0; x_1; x_2) + \ldots$$
$$\ldots + (x - x_0)\ldots(x - x_n) f(x_0; x_1; \ldots x_n).$$

У випадку рівновіддалених вузлів ($x_k = x_0 + kh,\ h > 0$) його можна записати через скінченні різниці:

$$P_n(x) = f_0 + q\frac{\Delta f_0}{1!} + q(q-1)\frac{\Delta^2 f_0}{2!} + .. + q(q-1)\ldots(q-n+1)\frac{\Delta^n f_0}{n!},$$

де $q = \dfrac{x - x_0}{h}$.

У цьому багаточлені нарощування таблиці виконується вперед і його зручно застосовувати для інтерполяції на початку таблиці. Інтерполяція з використанням такого полінома називається інтерполяцією вперед.

Якщо необхідно обчислити значення функції у кінці таблиці, то застосовують інтерполяційну формулу:

$$P_n(x) = f_0 + q\frac{\Delta f_{-1}}{1!} + q(q+1)\frac{\Delta^2 f_{-2}}{2!} + \ldots + q(q+1)\ldots(q+n-1)\frac{\Delta^n f_{-n}}{n!},$$

яка називається інтерполяцією назад. Для інтерполяції назад таблиця скінченних різниць має такий вигляд:

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$	...
x_{-4} x_{-3} x_{-2} x_{-1} x_0 ...	f_{-4} f_{-3} f_{-2} f_{-1} f_0 ...	... Δf_{-4} Δf_{-3} Δf_{-2} Δf_{-1} ...	... ... $\Delta^2 f_{-4}$ $\Delta^2 f_{-3}$ $\Delta^2 f_{-2}$ ...	... ... $\Delta^3 f_{-4}$ $\Delta^3 f_{-3}$ ...	... ...

Приклад. Визначити порядок полінома, який описує залежність щільності води від температури. Початкові дані вимірювань залежності задані у таблиці:

Температура, ^{o}C	20	21	22	23	24	25
Щільність, г/см^3	0.998230	0.998019	0.997797	0.997565	0.997323	0.997071

Розв'язок. Всі виміри виконані з постійним кроком, то складемо таблицю скінченних різниць:

Температура, ^{0}C	Щільність, г/см^3	Δ	Δ^2	Δ^3
20	0.998230			
21	8019	-0,000211		
22	7797	222	-0,000011	
23	7565	232	10	-0,000001
24	7323	242	10	0
25^{o}	7071	252	10	0

Як видно з таблиці, різниці другого порядку мають практично однакові значення, отже для побудови математичної залежності між заданими фізичними величинами треба взяти багаточлен другого порядку.

Приклад. У результаті спостережень за випаровуванням рапи з поверхні озера Ельтон були отримані такі (усереднені) дані:

Солоність рапи, %	20	24	26	28	30	33	36
Швидкість випаровування % від прісної води	71	62	54	42	35	22	9

Необхідно встановити залежність між заданими величинами.

Розв'язок. Нанесемо отримані дані на графік (рис. 5):

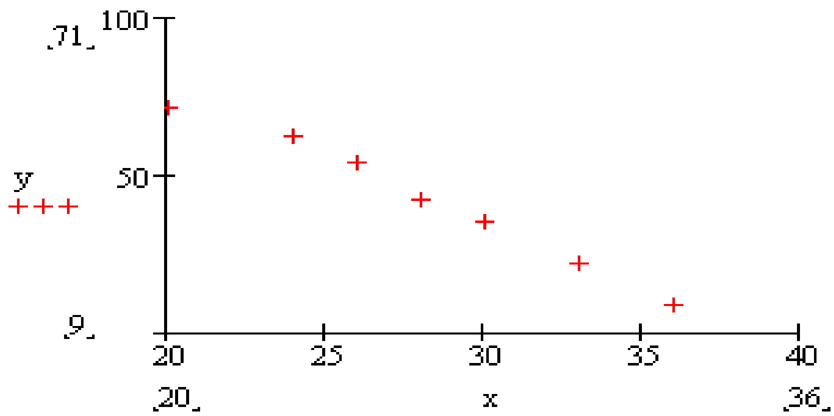


Рис. 5 Емпіричні дані залежності солоності води від швидкості випаровування

Видно, що експериментальні точки на графіку розташовані майже на прямій лінії, отже, залежність між солоністю та випаровуванням можна побудувати у вигляді прямої або полінома другого степеня. Щоб остаточно визначити степінь залежності, складемо таблицю скінченних різниць:

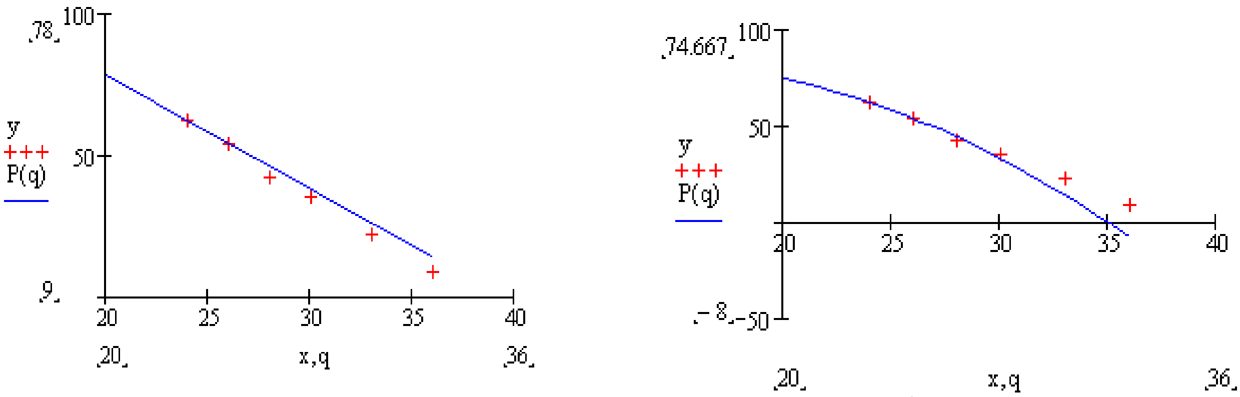
Солоність, %	Швидкість випаровування, %	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
20	71,0	–			
24	62,0	-9,0			
26	54,0	-8,0	1,0		
28	42,0	-12,0	-4,0	-5,0	
30	35,0	-7,0	5,0	9,0	-20
33	22,0	-13,0	-6,0	-11	-20
36	9,0	-13,0	0,0	6,0	17

З таблиці видно, що значення другої скінченної різниці були вже майже прийнятними і збільшення порядку лише їх погіршує. Причому, в кінці таблиці вхідні дані змінюють крок. У такому випадку краще не нарощувати порядок полінома, бо він стає чутливішим до шкідливих коливань, які обумовлені похибками початкових даних, а, отже, і результати, отримані на основі побудованого полінома будуть спотворені. Виходячи з того, що експериментальні дані містять певну похибку, і щоб згладити її обмежимось багаточленами першого та другого степеня і побудуємо інтерполяційні поліноми за даними початку таблиці, починаючи зі значення $x_0 = 24$ (там, де вони рівномірні), визначивши $q = \dfrac{x - x_0}{h}$, де $h = 0{,}2$:

$P_2(x) = y_0 + q\Delta y_0 + = 62{,}0 - 8{,}0q$ – лінійне наближення;

$P_2(x) = y_0 + q\Delta y_0 + q(q-1)\dfrac{\Delta^2 y_0}{2} = 62{,}0 - 8{,}0q + 2q(q-1)$ – квадратичне наближення.

Складемо таблицю значень (x, y), використовуючи інтерполяційний багаточлен і нанесемо його на графік (рис.6).



а *б*

Рис. 6. Наближення за двома точками: *а* – лінійне наближення; *б* – наближення поліномом другого степеня

З рисунків видно, що лінійне наближення дає кращий результат, ніж квадратична парабола. Тому остаточно приймаємо залежність у вигляді лінійної функції.

Якщо побудувати за табличними даними багаточлен шостого степеня, то він точно пройде через всі вузли (рис. 7), але використовувати його на практиці не дуже зручно (громіздкі обчислення) і коефіцієнти мають велику розбіжність:

$$P_6(x) = 4{,}6346 \cdot 10^{-6} x^6 + 7{,}4363 \cdot 10^{-4} x^5 + 0{,}0469 x^4 -$$
$$-1{,}4441 x^3 + 21{,}4119 x^2 - 116{,}6046 x - 26{,}1792.$$

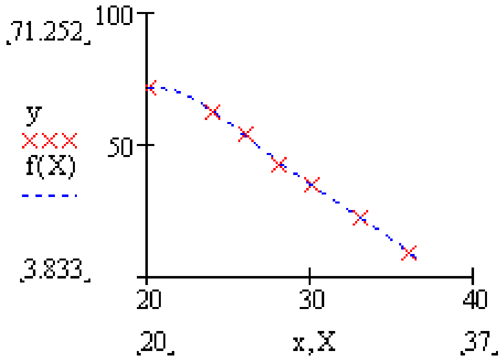


Рис. 7. Графік полінома шостого степеня

Обчислення значень у певній точці за допомогою цього багаточлена буде давати не набагато точніші значення, ніж лінійне наближення за рахунок накопичення похибки обчислень (округлення на кожній операції).

Лекція 6

Інтерполяційний поліном Чебишова. Визначення вузлів інтерполяції

Наближення функції інтерполяційними поліномами задовольняє умову:

$$f(x) = P_n(x) + E_n(x),$$

де $E_n(x) = Q(x)\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$,

$$Q(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = \sum_{j=0}^{n+1} a_j x^j, \quad a_{n+1} = 1$$ –

залишковий член формули інтерполяції, який є поліномом степеня $n+1$.

Необхідно відзначити, що корені полінома нерівномірно розташовані на відрізку інтерполювання (скупчені на кінцях), а, отже, наближення поліномом дає нерівномірне наближення функції.

Якщо вибрати коефіцієнти інтерполяційного полінома, щоб виконувалась умова:

$$\max_{x \in [a,b]} |Q(x)| \to \min,$$

то можна сподіватись, що і похибка $|E_n(x)| \to \min$.

Ідея Чебишова полягала в тому, щоб вибрати множину вузлів інтерполяції $\{x_i\}$ таким чином, щоб максимальна похибка інтерполяційного багаточлена була найменшою:

$$|E_n(x)| \le |Q(x)| \frac{\max\limits_{a<x<b} \left| f^{(n+1)}(x) \right|}{(n+1)!}.$$

Це приводить до введення поліному Чебишова, де багаточлени перших степенів мають вигляд:

$T_0(x) = 1$

$T_1(x) = x$

$T_2(x) = 2x^2 - 1$

$T_3(x) = 4x^3 - 3x$

$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$

$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$

$T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$

$T_7(x) = 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x$

У загальному випадку поліноми Чебишова обчислюються за такою рекурентною формулою:

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \; k = 2,3,\ldots$$

Властивості полінома Чебишова:

1) старший коефіцієнт при x^n в поліномі T_n дорівнює 2^{n-1}, $n \ge 1$;

2) для парних $n = 2k$ поліном $T_{2k}(-x) = T_{2k}(x)$ є парною функцією, для непарних $n = 2k+1$ – $T_{2k+1}(-x) = -T_{2k+1}(x)$ є непарною функцією;
3) тригонометричне представлення на відрізку $[-1,1]$: $T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x))$;
4) поліном $T_n(x)$ має n різних нулів на відрізку $[-1,1]$, $x_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\right), k = 0,1,\ldots,n-1,$ які є абсцисами чи вузлами Чебишова;
5) екстремальні значення поліному Чебишова $|T_n(x)| \le 1, -1 \le x \le 1$.

Теорема. Якщо n фіксоване, то серед усіх можливих варіантів вибору для різних вузлів $\{x_k\}$, $k = \overline{0,n}$ на інтервалі $[-1,1]$ поліном $T(x) = T_{n+1}(x)/2^n$ є єдиним, який має властивість: $\max\limits_{-1\le x\le 1}\{|T(x)|\} \le \max\limits_{-1\le x\le 1}\{|Q(x)|\}$, більш того $\max\limits_{-1\le x\le 1}\{|T(x)|\} = 1/2^n$.

Якщо для побудови полінома використовувати вузли Чебишова, то похибка наближення буде мінімальною

$$\max_{-1\le x\le 1}|f(x) - L_n(x)| \le \frac{\max\limits_{-1\le x\le 1}\left|f^{(n+1)}(x)\right|}{(n+1)!\,2^n}.$$

У випадку інтерполювання на довільному відрізку $[a,b]$ лінійна заміна $x = \frac{1}{2}((b-a)t + b + a)$, $t = \frac{1}{b-a}(2x - b - a)$ переводить його в $[-1,1]$. Тоді корені багаточлена Чебишова можна обчислити за такою формулою:

$$x_k = \frac{1}{2}\left((b-a)\cos\frac{(2k+1)\pi}{2n+2} + b + a\right), k = \overline{0,n}.$$

Оцінка похибки інтерполяції буде дорівнювати:

$$\max_{a\le x\le b}|f(x) - L_n(x)| \le \frac{\max\limits_{a\le x\le b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|}{(n+1)!}\,\frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}.$$

Якщо порівняти оцінки наближення функції рядом Тейлора та багаточленом Лагранжа, побудованого за вузлами Чебишова, то оцінка похибки багаточлена Тейлора буде у 2^n рази більшою, ніж оцінка похибки багаточлена Лагранжа, побудованого за оптимальними вузлами.

Приклад. Побудуємо наближення функції $y = e^{-x}$ за рівновіддаленими вузлами та вузлами полінома Чебишова на відрізку $[-1;1]$ скориставшись інтерполяційною формулою Лагранжа 3-го степеня, а також обчислимо значення функцій за допомогою ряду Тейлора до 4-го порядку. Порівняємо отримані результати.

Початкові дані для побудови наближень запишемо у таблицю:

x – рівновіддалені вузли	€ – вузли Чебишова	e^{-x}	$e^{-€}$
-1	$\cos\left(\frac{7\pi}{8}\right) = -0{,}92388$	2,71828	2,51905
-0,5	$\cos\left(\frac{5\pi}{8}\right) = -0{,}38268$	1,64872	1,46668
0,5	$\cos\left(\frac{3\pi}{8}\right) = 0{,}38268$	0,60653	0,68181
1	$\cos\left(\frac{\pi}{8}\right) = 0{,}92388$	0,36788	0,39693

Поліном Лагранжа за рівновіддаленими вузлами:

$L_3(x) = 0{,}126887x^3 + 0{,}589239x^2 - 1{,}379172x + 1{,}041190$,

$L_3(0{,}4) = 0{,}59159)$.

Поліном Лагранжа за вузлами Чебишова:

$L_3(€) = 0{,}176402€^3 + 0{,}543133€^2 - 0{,}99785€ + 0{,}994448$.

Розклад функції в ряд Маклорена:

$$T_4(x) = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24}.$$

Обчислимо значення поліномів у точці $x = 0{,}4$ і порівняємо з точним значенням:

	e^x	$L_3(x)$	$L_3(\tilde{x})$	$T_4(x)$
$x = 0{,}4$	0,67032	0,59159	0,67092	0,6704
Δ	—	0,0784	$0{,}5969 \cdot 10^{-3}$	0,8214

З таблиці видно, що абсолютна похибка полінома, побудованого за вузлами Чебишова, – найменша.

Теорема. Інтерполяційний поліном Чебишова $P_n(x)$ для функції $f(x)$ на інтервалі $[-1{,}1]$ можна записати як суму поліномів $\{T_i(x)\}$:

$$f(x) \approx P_n(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i T_i(x).$$

Коефіцієнти $\{c_i\}$ обчислюються за формулами:

$$c_0 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) T_0(x_i) = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f(x_i);$$

$$c_j = \frac{2}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) T_0(x_i) = \frac{2}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cos\left(\frac{(2i+1)\pi j}{2n+2} \right), \ j = 1,2,\dots,n.$$

Приклад. Побудувати поліном Чебишова для функції $f(x) = e^x$ на інтервалі $[-1{,}1]$. В якості вузлів візьмемо точки $x_k = \cos((2k+1)\pi/8)$, $k = 0,1,2,3$

$$c_0 = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} T_o(x_k) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} = 1{,}2660657;$$

$$c_1 = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} T_1(x_k) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} x_k = 1{,}1303150;$$

$$c_2 = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} T_2(x_k) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} \cos\left(2\pi \frac{2k+1}{8} \right) = 0{,}2714504;$$

$$c_3 = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} T_3(x_k) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{3} e^{x_k} \cos\left(3\pi \frac{2k+1}{8} \right) = 0{,}0437939.$$

Отже

$e^x \approx 1{,}2660657 T_0 + 1{,}1303150 T_1 + 0{,}2714504 T_2 + 0{,}0437939 T_3$. Якщо розкласти багаточлен Чебишова за степенями, то отримаємо:

$$e^x \approx 0{,}9946153 + 0{,}9989332x + 0{,}5429007x^2 + 0{,}1751757x^3.$$

Раціональне наближення функції (наближення Паде)

Розглянемо поняття раціонального наближення функції на малих проміжках області. Наприклад, функцію $f(x)=\cos(x)$ достатньо наблизити на інтервалі $[0,\pi/2]$.

Раціональне наближення функції на заданому інтервалі $[a,b]$ являє собою відношення двох поліномів $P_n(x)$ і $Q_m(x)$, відповідно, степеня n і m $f(x)\approx R_{n,m}(x)=\dfrac{P_n(x)}{Q_m(x)}$. Основна задача, яка ставиться при побудові такого представлення функції – зробити максимальну похибку настільки малою, наскільки це можливо. Для її розв‘язання застосовують наближення Паде (Pade). Для методу Паде необхідно, щоб функція та її похідні були неперервні в точці $x=0$. Якщо $f(x)=a_0+a_1x+...+a_nx^n$ – розклад функції у ряд Маклорена, то утворимо різниці:

$$f(x)Q_m(x)-P_n(x)=Z(x)\Rightarrow\left(\sum_{j=0}^{\infty}a_jx^j\right)\left(\sum_{j=0}^{m}q_jx^j\right)-\left(\sum_{j=0}^{n}p_jx^j\right)=\sum_{j=n+m+1}^{\infty}c_jx^j.$$

Якщо коефіцієнти лівої частини перемножити і прирівняти до нуля, отримаємо систему з $n+m+1$ рівняння:

$$a_0-p_0=0;$$
$$q_1a_0+a_1-p_1=0;$$
$$q_2a_0+q_1a_1+a_2-p_2=0;$$
$$q_3a_0+q_2a_1+q_1a_2+a_3-p_3=0;$$
$$q_ma_{n-m}+q_{m-1}a_{n-m-1}+...+a_n-p_n=0;$$
$$q_ma_{n-m+1}+q_{m-1}a_{n-m+2}+...+q_1a_n+a_{n+1}=0;$$
$$q_ma_{n-m+2}+q_{m-1}a_{n-m+3}+...+q_1a_{n+1}+a_{n+2}=0;$$
$$q_ma_n+q_{m-1}a_{n+1}+...+q_1a_{n+m}+a_{n+m}=0.$$

Як видно з системи, останні рівняння містять лише невідомі q_i і тому розв‘язуються першими.

Приклад. Знайти наближення Паде функції $y = \cos(x)$.

Запишемо розклад функції у ряд Маклорена, причому для спрощення обчислень візьмемо функцію $y = (\cos(x))^{1/2}$:

$$y = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{24}x^2 - \frac{1}{720}x^3 + \frac{1}{40320}x^4 - \ldots$$

Складемо систему рівнянь:

$1 - p_0 = 0$;

$-\frac{1}{2} + q_1 - p_1 = 0$;

$\frac{1}{24} - \frac{1}{2}q_1 + q_2 - p_2 = 0$;

$-\frac{1}{720} + \frac{1}{24}q_1 - \frac{1}{2}q_2 = 0$;

$\frac{1}{40320} - \frac{1}{720}q_1 + \frac{1}{24}q_2 = 0 \Rightarrow$

$q_2 = \frac{13}{15120}, \quad q_1 = \frac{11}{252}, \quad p_1 = -\frac{115}{252}, \quad p_2 = \frac{313}{15120}$.

Наближення Паде для функції $y = \cos(x)$ буде мати вигляд:

$$y \approx \frac{1 - 115x/252 + 313x^2/15120}{1 + 11x/252 + 13x^2/15120}.$$

Проліном Ерміта

Нехай функція задана таблично не лише своїми значеннями у точках, а і значеннями її похідних. Якщо висунути вимогу, щоб інтерполяційний багаточлен не тільки співпадав у вузлах інтерполяції зі значеннями функції, а і співпадали б значення похідних, тоді такий інтерполяційний багаточлен називається багаточленом Ерміта, а інтерполяція – ермітовою.

Загальний вигляд полінома Ерміта n-го степеня з m похідними досить складний і не має практичного застосування:

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{p} \sum_{m-0}^{\alpha_k - 1} \sum_{q=0}^{\alpha_k - 1 - m} \frac{y^{(m)}(x_k)}{m!q!} \left[(x - x_k)^{m+q} \prod_{i \neq k} (x - x_i)^{\alpha_i} \right] \left[\frac{d^q}{dx^q} \prod_{j \neq k} (x - x_j)^{-\alpha_j} \right].$$

Якщо $\alpha_i = 1$, то $m = q = 0$ і обидві внутрішні суми представляються одним доданком і багаточлен Ерміта переходить у багаточлен Ньютона у формі Лагранжа.

На практиці використовують часткові випадки інтерполяції поліномом Еерміта. Так, наприклад, інтерполяційний поліном, який співпадає з функцією в одному вузлі x_0 і всіма її похідними є рядом Тейлора:

$$H_n(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \ldots.$$

Поліном Ерміта, що задається значеннями функції в двох вузлах і першою похідною:

$$H_n(x) = y(x_0) + (x - x_0)(y'(x_0) + (x - x_0)(y(x_0, x_0, x_1) + (x - x_1)y(x_0, x_0, x_1, x_1))),$$

де: $y(x_0, x_0, x_1) = \dfrac{1}{x_0 - x_1}(y'(x_0) - y(x_0, x_1))$;

$y(x_0, x_0, x_1, x_1) = \dfrac{1}{x_0 - x_1}(y'(x_0) - 2y(x_0, x_1) + y'(x_1))$– розділені різниці.

Лекція 7

Сплайн апроксимація

Часто, побудова інтерполяційного полінома n-го степеня за сукупністю всіх точок дає незадовільний результат. Тоді весь відрізок інтерполювання можна розбити на часткові відрізки і на кожному частковому відрізку побудувати свій інтерполяційний багаточлен, наклавши умову, щоб у точках „зшивання” значення цих поліномів співпадали. Така інтерполяція називається кусково-поліноміальною і, зрозуміло, що вона використовується для побудови часткових поліномів невеликих степенів.

У випадках, коли в результаті наближення необхідно отримати диференційовану функцію, умова співпадання значень часткових поліномів на окремих відрізках є недостатньою. Тоді висувають ще вимогу співпадання значень похідних у точках „зшивання” для кожного часткового багаточлена.

Нехай відрізок $[a,b]$ розбитий на часткові відрізки $[x_i x_{i+1}]$ так, що $x_0 = a, \quad x_m = b$, $x_i = a + ih$, $h = (b-a)/n$.

Визначення. Сплайном називається функція, яка разом з декількома похідними неперервна на всьому заданому відрізку $[a,b]$ і на кожному частковому відрізку $[x_i x_{i+1}]$ окремо є деяким алгебраїчним багаточленом.

Максимальний за всіма частковими відрізками степінь багаточленів називається степінню сплайна, а різниця між степінню сплайна і порядком найвищої неперервної на $[a,b]$ похідної – дефектом сплайна.

Кусково-поліноміальна лінійна інтерполяція

Нехай задані значення x_i на відрізку $[a.b]$ ($x_0 = a, \quad x_m = b$). Побудуємо для кожних двох крайніх точок свій поліном Лагранжа:

$$L^{(i)}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} y_{i+1} + \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} y_i \text{, де } x \in [x_i, x_{i+1}].$$

Якщо для побудови першого полінома ми візьмемо точки (x, y_0) і (x_1, y_1), для другого – (x_1, y_1) і (x_2, y_2) і так далі, то значення поліномів у суміжних точках будуть співпадати. При збільшенні кількості точок таке наближення буде збіжним і краще наближати функцію ніж поліном, побудований за всіма точками. Недоліком такого наближення є те, що ми отримаємо недиференційовану функцію (у вузлах „зшивання” поліномів похідна не існує).

Побудована нами кусково-лінійна функція (ламана) є сплайном першого степеня з дефектом рівним одиниці, оскільки неперервною є лише сама функція, а перша похідна вже розривна.

Приклад. Розглянемо задачу про випаровування рапи з поверхні озера Ельтон:

Солоність рапи, % $\{x_i\}$	20	24	26	28	30	33	36
Швидкість випаровування % від прісної води $\{y_i\}$	71	62	54	42	35	22	9

Розіб’ємо весь відрізок інтерполяції на три підінтервали: $[20;26]$, $[26;30]$, $[30;36]$ і побудуємо на кожному частковому відрізку свій поліном другого степеня скориставшись інтерполяційною формулою Лагранжа:

1)
$$L_2(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+$$
$$+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=-\frac{7}{24}x^2+\frac{127}{12}x-24,$$

де $x\in[20;26]$;

2)
$$L_2(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+$$
$$+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{5}{8}x^2-\frac{159}{4}x+665,$$

де $x\in[26;30]$;

3)
$$L_2(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+$$
$$+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=-\frac{13}{3}x+165,$$

де $x\in[30;36]$.

З отриманих результатів видно, що на кінці інтерполяційного інтервалу ми отримали лінійну залежність. Побудуємо графік наближення за результатами кусково-поліноміальної інтерполяції (рис. 8).

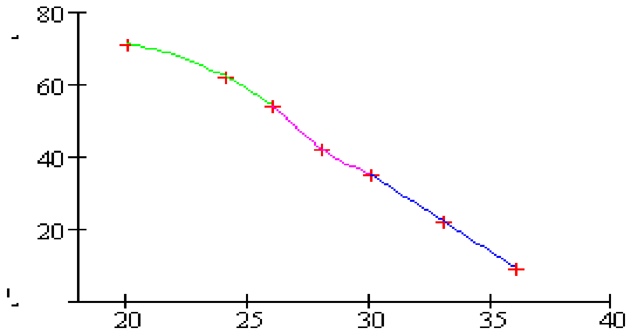


Рис. 8. Графік кусково-поліноміальної апроксимації

Використання на кожному частковому відрізку свого власного багаточлена дає досить точний результат і не пов‘язане з громіздкими обчисленнями поліному високого степеня.

Кубічні сплайни

На практиці найчастіше застосовують кубічні сплайни, які мають на відрізку $[a,b]$ хоча б першу похідну.

Визначення. Нехай задана $n+1$ точка (x_i, y_i), така що $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Функція $S_3(x)$ називається кубічним сплайном, якщо існують кубічні поліноми $S_{3,k}$ з коефіцієнтами $s_{i,k}$, $i = \overline{0,3}$, що задовольняють такі умови:

1) $S_3(x) = S_{3,k}(x) = s_{0,k} + s_{1,k}(x - x_i) + s_{2,k}(x - x_i)^2 + s_{3,k}(x - x_i)^3$ для $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $k = \overline{0, n-1}$ ($S_3(x)$ – складається з кубічних поліномів);

2) $S(x_i) = y_i$, $k = \overline{0,n}$ (кусково-кубічна інтерполяція задається за сукупністю точок);

3) $S_k(x_{i+1}) = y_{i+1}$, $k = \overline{0, n-2}$ (значення сплайну в точках наближення дорівнюють заданим значенням функції);

4) $S'_k(x_{i+1}) = S'_{k+1}(x_{k+1})$, $k = \overline{0, n-2}$ (криві інтерполяції є гладкими неперервними функціями, що означає, що в точках „зшивання” співпадають не тільки значення поліномів, але і їхні похідні);

5) $S_k''(x_{i+1}) = S_{k+1}''(x_{k+1})$, $k = \overline{0, n-2}$ (друга похідна також неперервна).

Кожний кубічний поліном задається чотирма коефіцієнтами, які необхідно знайти. Початковими даними є $n+1$ точка (задає умови 1, 2) і властивості 3, 4 забезпечують ще $n-1$ умову. Отже, для побудови сплайна задається $n+1+3(n-1) = 4n-2$ умови. Число –2 визначає, що існує два степеня вільності, їх називають обмеженнями у крайніх точках (вони включають або $S'(x)$ або $S''(x)$ в точках x_0, x_n).

Оскільки $S(x)$ – кусково-кубічний поліном, то його друга похідна є кусково-лінійною на інтервалі $[x_0, x_n]$. Застосувавши інтерполяційну формулу Лагранжа для $S(x)$, отримаємо:

$$S''(x) = S''(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + S''(x_{i+1})\frac{x - x_{i1}}{x_i - x_{i1}}.$$

Введемо позначення: $m_i = S''(x_i)$, $m_{i+1} = S''(x_{i+1})$ і $h_i = x_{i+1} - x_i$, отримаємо такий вираз:

$$S''(x) = \frac{m_i}{h_i}(x_{i+1} - x) + \frac{m_{i+1}}{h_i}(x - x_i) \text{ для } x_i \le x \le x_{i+1}, \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Якщо останнє рівняння двічі проінтегрувати і при цьому ввести дві постійні інтегрування, то отримаємо такий результат:

$$S_i(x) = \frac{m_i}{6h_i}(x_{i+1} - x)^3 + \frac{m_{i+1}}{6h_i}(x - x_i)^3 + p_i(x_{i+1} - x) + q_i(x - x_i).$$

Підставляючи у рівняння x_i, x_{i+1} і $y_i = S_i(x)$, $y_{i+1} = S_{i+1}(x)$, отримаємо:

$$y_i = \frac{m_i}{6}h_i^2 + p_i h_i \text{ і } y_{i+1} = \frac{m_{i+1}}{6}h_i^2 + q_i h_i.$$

Якщо два останні рівняння розв‘язати відносно невідомих p_i і q_i та підставити їх у рівняння сплайну, то отримаємо:

$$S_i(x) = -\frac{m_i}{6h_i}(x_{i+1} - x)^3 + \frac{m_{i+1}}{6h_i}(x - x_i)^3 +$$
$$+\left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{m_i h_i}{6}\right)(x_{i+1} - x) + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{m_{i+1} h_i}{6}\right)(x - x_i).$$

Останній вираз сплайну включає лише невідомі m_i. Щоб знайти їхні значення, застосуємо першу похідну:

$$S'(x) = -\frac{m_i}{2h_i}(x_{i+1} - x)^2 + \frac{m_{i+1}}{2h_i}(x - x_i)^2 + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{m_i h_i}{6}\right) + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{m_{i+1} h_i}{6}\right).$$

Ввівши таке позначення:

$$d_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i},$$

обчислимо першу похідну в точках x_i і x_{i-1}:

$$S_i'(x) = -\frac{m_i}{3}h_i - \frac{m_{i+1}}{6}h_i + d_i \text{ і } S_{i-1}'(x) = \frac{m_i}{3}h_{i-1} + \frac{m_{i-1}}{6}h_{i-1} + d_{i-1}.$$

Застосувавши властивість сплайну 4 до останніх рівнянь, отримаємо співвідношення, що виключає m_{i-1} та m_i:

$$h_{i-1}m_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)m_i + h_i m_{i+1} = 6(d_i - d_{i-1}), \quad i = \overline{1, n-1}. \qquad (3)$$

В останньому рівнянні невідомими є m_i, а інші члени – константи, обчислені за значеннями у заданих точках. Система рівнянь, яка задається останнім рівнянням буде невизначеною, так як вона складається з $n-1$ рівняння з $n+1$ невідомим. Отже для її розв‘язку необхідно задати ще два додаткових рівняння. Їх задають так, щоб виключити m_0 з першого рівняння і m_n з $n-1$-го рівняння.

Існує декілька способів задання крайніх значень. Стратегія задання обмежень у крайніх точках наведена у таблиці:

№	Опис стратегії	Рівняння для m_0, m_n
1	Замикаючий кубічний сплайн: задаємо $S'(x_0)$ і $S'(x_n)$ („кращий” вибір, якщо похідні відомі)	$m_0 = \frac{3}{h_0}(d_0 - S'(x_0)) - \frac{m_1}{2}$ $m_n = \frac{3}{h_{n-1}}(S'(x_n) - d_{n-1}) - \frac{m_{n-1}}{2}$
2	Природний кубічний сплайн („релаксована крива”)	$m_0 = 0$, $m_n = 0$
3	Екстраполювання $S'(x)$ в крайніх обмежуючих точках	$m_0 = m_1 - \frac{h_0(m_2 - m_1)}{h_1}$ $m_n = m_{n-1} + \frac{h_{n-1}(m_{n-1} - m_{n-2})}{h_{n-2}}$
4	$S'(x)$ постійна біля крайніх точок	$m_0 = m_1$, $m_n = m_{n-1}$
5	Задання $S'(x)$ в кожній крайній точці	$m_0 = S''(x_0)$, $m_n = S''(x_n)$

Розглянемо побудову кубічного сплайну із застосуванням стратегії 5. Якщо задано m_0, то можна обчислити $m_0 h_0$ і записати перше рівняння ($i = 1$):

$$2(h_0 + h_1)m_1 + h_1 m_2 = 6(d_1 - d_0) - h_0 m_0 .$$

Знаючи m_n аналогічно можна записати останнє рівняння:

$$h_{n-2} m_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}) - h_{n-1} m_n .$$

Інші $n-1$ рівняння задамо, застосовуючи формулу (3) отримаємо систему лінійних рівнянь $Hm = v$, яка буде задаватись тридіагональною матрицею виду:

$$\begin{array}{ccccccc} b_1 & c_1 & & & & m_1 & & v_1 \\ a_1 & b_2 & c_2 & & & m_2 & & v_2 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & & \ldots & = & \\ & & & a_{n-3} & b_{n-2} \quad c_{n-2} & m_{n-2} & & v_{n-2} \\ & & & & a_{n-2} \quad b_{n-1} & v_{n-1} & & v_{n-1} \end{array}$$

Після розв‘язання системи і визначення m_i обчислюються коефіцієнти кубічного сплайну за такими формулами:

$s_{k,0} = y_k$; $\qquad s_{k,1} = m_{k/2}$;

$s_{k,2} = d_k - \frac{h_k(2m_k + m_{k+1})}{6}$; $\qquad s_{k,3} = \frac{m_{k+1} - m_k}{6h_k}$.

Кожний кубічний поліном можна записати у формі вкладених добутків:

$$S_k(x) = ((s_{k,3}w + s_{k,2})w + s_{k,1})w + y_k, \text{ де } w = x - x_k.$$

Розглянемо форми тридіагональних матриць для кожної стратегії вибору крайових умов.

Замикаючий сплайн

Лема 1. Існує єдиний кубічний сплайн, який має першу похідну з граничними умовами $S'(a) = d_0$ і $S'(b) = d_n$.

Для відшукання сплайну необхідно розв‘язати систему рівнянь:

$$\left(\tfrac{3}{2}h_0 + 2h_1\right)m_1 + h_1 m_2 = 6(d_1 - d_0) - 3(d_0 - S'(x_0));$$

$$h_{k-1}m_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)m_k + h_k m_{k+1} = 6(d_k - d_{k-1}), \quad k = \overline{2, n-2};$$

$$h_{n-2}m_{n-2} + \left(2h_{n-2} + \tfrac{3}{2}h_{n-1}\right)m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}) - 3(S'(x_n) - d_{n-1}).$$

Замикаючий сплайн має певний нахил у крайніх точках. Його можна представити як криву, що отримується, коли гнучка еластична лінія має пройти через задані точки і примкнути до країв із заданим нахилом. Цей тип сплайну використовують у кресленнях, для вимальовування гладкої кривої, що проходить через декілька точок.

Природний сплайн

Лема 2. Існує єдиний кубічний сплайн з довільними граничними умовами $S''(a) = 0$, $S''(b) = 0$. Для його побудови складається система рівнянь:

$$2(h_0 + h_1)m_1 + h_1 m_2 = 6(d_1 - d_0);$$

$$h_{k-1}m_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)m_k + h_k m_{k+1} = 6(d_k - d_{k-1}), \quad k = \overline{2, n-2};$$

$$h_{n-2}m_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}).$$

Природній сплайн – це гнучка еластична крива, що проходить через задані точки, але на кінцях відрізку має довільні нахили, які мінімізують осциляцію кривої. Цей сплайн корисний для отримання кривої за експериментальними даними, які мають декілька значущих цифр.

Лема 3. Існує єдиний кубічний сплайн, який застосовується для екстраполяції у внутрішніх вузлах x_1, x_2, для відшуковування $S''(a)$ і екстраполяції у вузлах x_{n-1}, x_{n-2} – для $S''(b)$. Для такого сплайну будується система рівнянь:

$$\left(3h_0 + 2h_1 + {h_0^2}/{h_1}\right)m_1 + \left(h_1 - {h_0^2}/{h_1}\right)m_2 = 6(d_1 - d_0);$$

$$h_{k-1}m_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)m_k + h_k m_{k+1} = 6(d_k - d_{k-1}), \quad k = \overline{2, n-2};$$

$$\left(h_{n-2} - {h_{n-1}^2}/{h_{n-2}}\right)m_{n-2} + \left(2h_{n-2} + 3h_{n-1} + {h_{n-1}^2}/{h_{n-2}}\right)m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}).$$

Екстраполяційний сплайн передбачає, що його кінці є продовженнями суміжних кубічних сплайнів.

Сплайн, що закінчується параболою

Лема 4. Існує єдиний кубічний сплайн, що $S''(x) = 0$, для $x \in [x_0, x_1] \cup [x_{n-1}, x_{n-2}]$ і який задовольняє систему рівнянь:

$$(3h_0 + 2h_1)m_1 + h_1 m_2 = 6(d_1 - d_0);$$

$$h_{k-1}m_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)m_k + h_k m_{k+1} = 6(d_k - d_{k-1}), \quad k = \overline{2, n-2};$$

$$h_{n-2}m_{n-2} + (2h_{n-2} + 3h_{n-1})m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}).$$

На відрізках $[x_0, x_1]$, $[x_{n-1}, x_{n-2}]$ кубічний поліном вироджується у параболу.

Сплайн із заданою кривизною в крайніх точках

Лема 5. Існує єдиний кубічний сплайн із заданими значеннями другої похідної у крайніх точках $S''(a)$ і $S''(b)$.

$$2(h_0 + h_1)m_1 + h_1 m_2 = 6(d_1 - d_0) - h_0 S''(x_0);$$

$$h_{k-1}m_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)m_k + h_k m_{k+1} = 6(d_k - d_{k-1}), \quad k = \overline{2, n-2};$$

$$h_{n-2}m_{n-2} + 2(h_{n-2} + h_{n-1})m_{n-1} = 6(d_{n-1} - d_{n-2}) - h_{n-1}S''(x_n).$$

Задаючи значення другої похідної, можна отримувати необхідну кривизну в кожній точці.

Приклад 1. Нехай задані точки $(0,0)$, $(1,0.5)$, $(2,2.0)$, $(3,1.5)$. Перша похідна задовольняє умови (1): $S'(0) = 0.2$, $S'(3) = -1$.

Обчислимо значення:

$h_0 = h_1 = h_2 = 1;$

$d_0 = (y_1 - y_0)/h_0 = (0.5 - 0)/1 = 0.5;$

$d_1 = (y_2 - y_1)/h_1 = (2 - 0.5)/1 = 1.5;$

$d_2 = (y_3 - y_2)/h_2 = (1.5 - 2)/1 = -0.5;$

$u_1 = 6(d_1 - d_0) = 6$, $u_2 = 6(d_2 - d_1) = -12$.

Замикаючий кубічний сплайн (випадок 1)

Скористаємось лемою 1 і отримаємо систему рівнянь:

$\left(3/2 + 2\right)m_1 + m_2 = 6 - 3(0.5 - 0.2) = 5.1;$

$m_1 + \left(2 + 3/2\right)m_2 = -12 - 3(-1 - (-0.5)) = -10.5.$

Знайдемо $m_1 = 2.25$ і $m_2 = -3.72$ і, застосувавши рівняння в таблиці для випадку 1, обчислимо:

$m_0 = 3(0.5 - 0.2) - 2.52/2 = -0.36$, $m_3 = 3(-1 + 0.5) - (-3.72)/2 = 0.36$.

За знайденими значеннями m_i відшукаємо коефіцієнти сплайна й отримаємо (графік наближення наведений на рис. 9):

$S_0(x) = 0.48x^3 - 0.18x^2 + 0.2x, \quad x \in [0,1];$

$S_1(x) = -1.04(x-1)^3 + 1.26(x-1)^2 + 1.28(x-1) + 0.5, \quad x \in [1,2];$

$S_2(x) = 0.68(x-2)^3 + 1.86(x-2)^2 + 0.68(x-2) + 2, \quad x \in [2,3].$

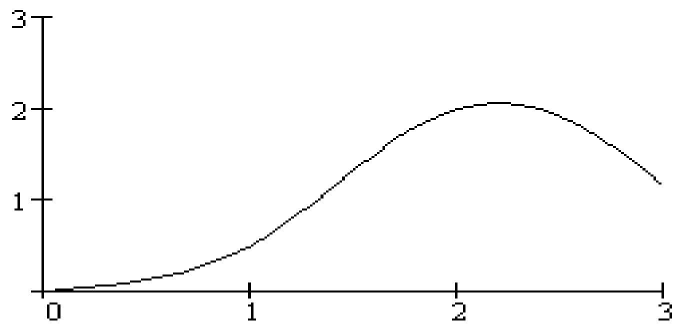


Рис. 9. Замикаючий кубічний сплайн

Природний кубічний сплайн (випадок 2)

Нехай $m_0 = m_3 = 0$. Згідно з лемою 2 складемо систему рівнянь:

$4m_1 + m = 6;$

$m_1 + 4m_2 = -12$

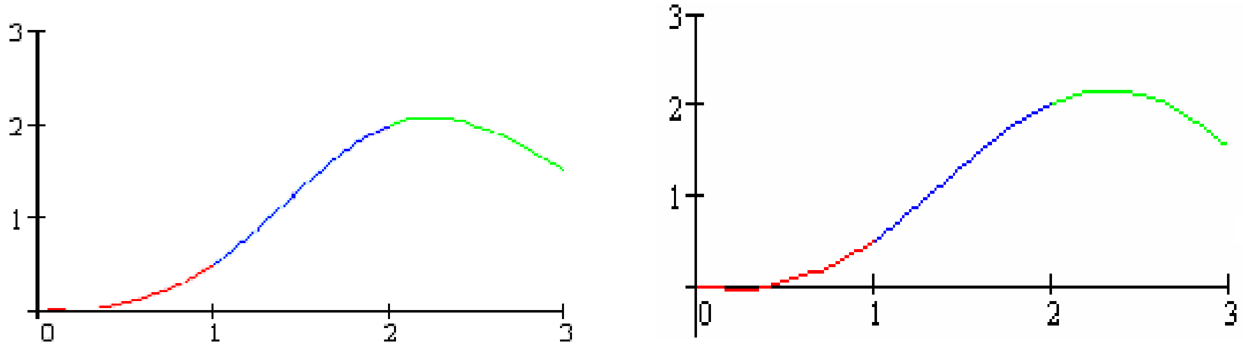
і, розв‘язавши її, отримаємо значення: $m_1 = 2{,}4$, $m_2 = -3{,}6$. За знайденими значеннями m_i побудуємо сплайн:

$S_0(x) = 0{,}4x^3 + 0.1x, \quad x \in [0{,}1];$

$S_1(x) = -x^3 + 4{,}2x^2 - 4{,}1x + 1{,}4, \quad x \in [1{,}2];$

$S_2(x) = 0{,}6x^3 - 5{,}4x^2 + 15{,}1x + 11{,}4, \quad x \in [2{,}3].$

Отримані результати подамо у вигляді графіка (рис. 10)



а *б*

Рис. 10 Графіки сплайнів:
а – природний сплайн; *б* – параболічний сплайн

Параболічний сплайн

Згідно з лемою 4 складемо систему рівнянь:

$5m_1 + m_2 = 6$;

$m_1 + 5m_2 = -12$,

з якої отримаємо: $m_0 = m_1 = 7/4$, $m_3 = m_2 = -11/4$.

Побудуємо сплайни:

$S_0(x) = 0{,}875x^2 - 0{,}375x, \quad x \in [0{,}1];$

$S_1(x) = 0{,}75x^3 + 3{,}125x^2 - 2{,}625x + 0.75, \quad x \in [1{,}2];$

$S_3(x) = -1{,}375x^2 + 6{,}175x - 5{,}25, \quad x \in [2{,}3].$

Приклад. Побудуємо наближення кубічним сплайном функції $y = \sin(x)$ на відрізку $[0;\pi]$, використовуючи 5-ту стратегію ($S''(0) = S''(\pi) = 0$). Для наближення будемо використовувати такі точки $h = \pi/6 = 0{,}524$:

№	x	y	$d_i = (y_{i+1} - y_i)/h$
0	0	0	$d_0 = 0{,}955$
1	π/6=0,524	0,5	$d_1 = 0{,}699$
2	π/3=1,047	0,866	$d_2 = 0{,}256$
3	π/2=1,571	1	$d_3 = -0{,}256$
4	2π/3=2,094	0,866	$d_4 = -0{,}699$
5	5π/6=2,618	0,5	$d_5 = -0{,}955$
6	π=3,142	0	

Складемо систему рівнянь:

$4hm_1 + hm_2 = 6(d_1 - d_0) - hS''(0) \Rightarrow 2{,}094m_1 + 0{,}524m_2 = -1{,}536$;

$hm_1 + 4hm_2 + hm_3 = 6(d_2 - d_1) \Rightarrow 0{,}524m_1 + 2{,}094m_2 + 0{,}524m_3 = -2{,}659$;

$hm_2 + 4hm_3 + hm_4 = 6(d_3 - d_2) \Rightarrow 0{,}524m_2 + 2{,}094{,}536m_3 + 0{,}524m_4 = -3{,}071$;

$hm_3 + 4hm_4 + hm_5 = 6(d_4 - d_3) \Rightarrow 0{,}524m_3 + 2{,}094m_4 + 0{,}524m_5 = -2{,}659$;

$hm_4 + 4hm_5 = 6(d_5 - d_4) - hS''(\pi) \Rightarrow 0{,}524m_4 + 2{,}094m_5 = -1{,}536$.

Знайдемо розв‘язок системи: $m_1 = m_5 = -0{,}512$, $m_2 = m_4 = -0{,}886$, $m_3 = -1{,}023$.

Побудуємо сплайни на кожному частковому відрізку:

$S_0 = 0{,}163x^3 + 0{,}909x,\ x \in [0; \pi/6]$;

$S_1 = -0{,}101x^3 - 0{,}066x^2 + 0{,}908x + 0{,}0751,\ x \in [\pi/6; \pi/3]$;

$S_2 = -0{,}406x^3 - 0{,}301x^2 + 1{,}115x + 0{,}0942,\ x \in [\pi/3; \pi/2]$;

$S_3 = 0{,}0446x^3 - 0{,}726x^2 + 1{,}982x - 0{,}486,\ x \in [\pi/2; 2\pi/3]$;

$S_4 = 0{,}131x^3 - 1{,}210x^2 + 2{,}623x - 0{,}449,\ x \in [2\pi/3; 5\pi/6]$;

$S_5 = 0{,}164x^3 - 1{,}536x^2 + 3{,}824x - 1{,}913,\ x \in [5\pi/6; \pi]$.

Графічне представлення результату наближення наведено на рис 11.

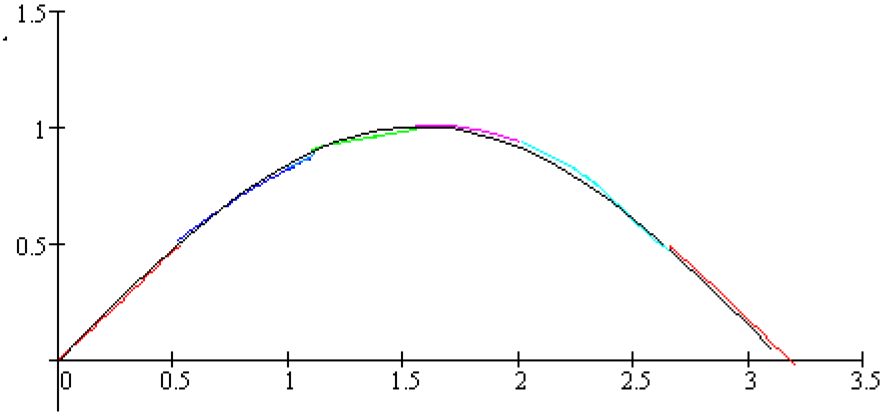


Рис. 11. Наближення функції $y = \sin(x)$ кубічними сплайнами

Зауваження. Сплайни мають дуже корисну властивість, яка полягає в тому, що серед всіх двічі диференційованих на відрізку $[a,b]$ функцій, що інтерполюють задану сукупність точок, кубічний сплайн має найменшу осциляцію.

Лекція 8

Методи згладжування функцій

Метод найменших квадратів

У практичних дослідженнях часто виникає задача побудови залежності у вигляді математичної функції $y = f(x)$ між параметрами системи за експериментальними даними. Треба пам‘ятати, що дані, отримані в результаті експериментів, містять похибки різного характеру і для такої задачі застосування методів інтерполяції призведе до отримання неточних залежностей, а отже і хибних висновків, які будуть отримані в результаті математичного дослідження за допомогою отриманих функцій.

Тому необхідно мати такі методи, які дозволяють зменшити вплив похибок. Для отримання правдоподібних залежностей проводять серії експериментів, у результаті яких отримують множину точок, за якими визначається тип залежності між змінними. Характер залежності можна наближено визначити за розташуванням точок, отриманих у результаті експериментів, якщо нанести їх на графік або виходячи з фізичних законів, яким підпорядковані процеси у системі, що досліджується, або з якихось інших міркувань.

При побудові математичних залежностей також постає питання: як використати результати всіх експериментів, щоб отримати найкраще наближення.

Для оцінки точності наближень застосовують декілька норм:

1) максимальна похибка $E_\infty(f) = \max\limits_{1 \le k \le n}\{|f(x_k) - y_k|\}4$;

2) середня похибка $E_1 f(f) = \frac{1}{n}\sum\limits_{k=1}^{n}|f(x_k) - y_k|$;

3) середньоквадратична похибка $E_2(f)=\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left|f(x_k)-y_k\right|^2\right)^{1/2}$.

Розглянемо побудову лінії найкращого наближення, застосовуючи в якості оцінки середньоквадратичну похибку, отже, будемо будувати таку залежність, що середній квадрат відхилень дослідних даних від графіка функції цієї залежності буде найменшим.

Розглянемо евклідовий простір неперервних на відрізку $[a;b]$ функцій E_C, в якому введено скалярний добуток:

$$(f(x),g(x))=\frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)g(x)dx,\ \ f(x,g(x)\in E_C),$$

і лінійний простір E_{n+1} дискретно заданих функцій на скінченній множині точок $D=\{x_i\}_{i=0}^{n}\in[a;b]$ зі скалярним добутком:

$$(f(x),g(x))=\frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}f(x_i)g(x_i),$$

де функції f та g можна вважати $(n+1)$-мірним вектором. Тоді середньоквадратичну норму $\|f\|=(f,f)^{1/2}$ можна записати через скалярний добуток, як відстань у метричному просторі $\rho(f,g)=\|f-g\|=(f-g,f-g)^{1/2}$.

Нехай в евклідовому просторі задана система функцій $\{\varphi_i\}_{i=0}^{n}$. Визначник, складений із скалярних добутків цих функцій:

$$\begin{matrix}(\varphi_0,\varphi_o) & (\varphi_1,\varphi_o) & \dots & (\varphi_n,\varphi_o)\\ (\varphi_0,\varphi_1) & (\varphi_1,\varphi_1) & \dots & (\varphi_n,\varphi_1)\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ (\varphi_0,\varphi_n) & (\varphi_1,\varphi_n) & \dots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{matrix}$$

називається визначником Грама, причому визначник Грама дорівнює нулю тоді і лише тоді, коли система функцій $\{\varphi_i\}_{i=0}^{n}$ лінійно залежна. Якщо матриця визначника Грама є діагональною ($(\varphi_i,\varphi_j)=0,\ i\neq j\ (\varphi_i,\varphi_i)>0$), то система функцій $\{\varphi_i\}_{i=0}^{n}$ називається ортогональною.

Функція $\Phi_n(x)=\sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i(x)$, c_i – числові коефіцієнти, називається узагальненим багаточленом за системою функцій $\{\varphi_i\}_{i=0}^{n}$.

Якщо функції φ_i – лінійно незалежні, то для будь-якої функції $f(x)\in E$ існує багаточлен найкращого середньоквадратичного наближення і тільки один:

$$\rho^2(f,\Phi_n)=\|f-\Phi_n\|^2=(f-\Phi_n, f-\Phi_n)=(f,f)+\sum_{i,j=0}^{n} c_i c_j(\varphi_i,\varphi_j)-2\sum_{i=0}^{n} c_i(f,\varphi_i).$$

Величина $\rho^2(f,\Phi_n)$ задає квадратичну форму для відшукання коефіцієнтів наближення c_i, $i=\overline{0,n}$. Так як функція квадратична, то необхідною і достатньою умовою мінімуму буде рівність першої похідної від $\rho^2(f,\Phi_n)$ нулю, що приведе до такої системи рівнянь відносно коефіцієнтів наближення, яка називається нормальною:

$$\begin{array}{ccccccccc}
c_0(\varphi_0,\varphi_0) & + & c_1(\varphi_1,\varphi_0) & + & \ldots & + & c_n(\varphi_n,\varphi_0) & = & (f,\varphi_0) \\
c_0(\varphi_0,\varphi_1) & + & c_1(\varphi_1,\varphi_1) & + & \ldots & + & c_n(\varphi_n,\varphi_1) & = & (f,\varphi_1) \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
c_0(\varphi_0,\varphi_n) & + & c_1(\varphi_1,\varphi_n) & + & \ldots & + & c_n(\varphi_n,\varphi_n) & = & (f,\varphi_n)
\end{array}.$$

Зауваження. Необхідно обережно користуватись методом найменших квадратів, особливо для функцій, які містять осциляції. Це пов‘язано з тим, що якщо мале значення середньоквадратичної відстані не гарантує допустимого значення $\max\limits_{[a;b]}|f(x)-g(x)|$.

Побудова лінії $y=ax+b$

Для початку розглянемо найпростіший варіант: побудову ліній методом найменших квадратів $y=ax+b$, де необхідно знайти коефіцієнти a і b. Лінія буде найкращою, якщо середній квадрат різниці між значеннями теоретично побудованої лінії та заданими буде найменшим: $E(a,b)=\sum_{i-1}^{n}(ax_i+b-y_i)^2 \to \min$. Користуючись середньоквадратичною похибкою, ми будемо отримувати функцію, що має квадратичну залежність від коефіцієнтів, причому вона буде направлена гілками догори, тому для відшукання мінімуму функції досить перевірити лише достатню умову існування екстремуму – рівність похідних нулю:

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial a}=\sum_{i=1}^{n}2x_i\left(ax_i+b-y_i\right)=2\sum_{i=1}^{n}\left(ax_i^2+bx_i-x_iy_i\right)=0;$$

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial b}=\sum_{i=1}^{n}2\left(ax_i+b-y_i\right)=2\sum_{i=1}^{n}\left(ax_i+b-y_i\right)=0.$$

Якщо розкрити дужки та скористатись адитивністю суми, то отримаємо систему лінійних рівнянь відносно a і b:

$$a\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)+b\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i;$$

$$a\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)+nb=\sum_{i=1}^{n}y_i.$$

Розв‘язавши цю систему і підставивши знайдені значення a і b у формулу, що задає пряму, отримаємо лінійну залежність між $\{x_i\}$ і $\{y_i\}$ найкращого середньоквадратичного наближення.

Приклад. Нехай задані початкові дані (стовпчик $\{x_i\}$ має бути відсортований в порядку зростання):

i	x_i	y_i		i	x_i	y_i
1	-1	10,0		5	3	4,0
2	0	9,0		6	4	3,0
3	1	7,0		7	5	0,0
4	2	5,0		8	6	-1,0

Знайдемо суми $\sum_{i=1}^{n}x_i=20$; $\sum_{i=1}^{n}x_i^2=92$; $\sum_{i=1}^{n}x_iy_i=25$; $\sum_{i=1}^{n}y_i=37$ і складемо систему рівнянь: $\begin{cases}92a+20b=25\\20a+8b=37\end{cases}$. Розв‘яжемо систему та знайдемо значення $a=-1{,}60714$ і $b=8{,}64286$. Отже лінія, побудована методом найменших квадратів, буде мати вигляд: $y=-1{,}60724x+8{,}64286$. Графік лінії за заданими початковими точками представлений на рис. 12.

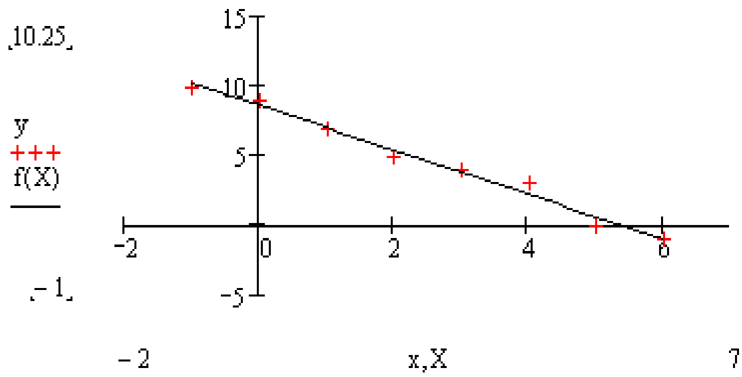


Рис. 12. Графік лінії, побудованої за методом найменших квадратів

Приклад. Розглянемо задачу про випаровування озера Ельтон. Як уже було зазначено раніше, оптимальна залежність між швидкістю випаровування та солоністю може бути представлена у вигляді лінійної функції. Побудуємо за заданою таблицею:

Солоність рапи, %	20	24	26	28	30	33	36
Швидкість випаровування % від прісної води	71	62	54	42	35	22	9

лінійну функцію $f(x) = ax + b$ за методом найменших квадратів.

Знайдемо суми: $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i = 197$; $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 = 5721$; $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i = 7588$; $\sum\limits_{i=1}^{n} y_i = 295$, $n = 7$ і складемо систему рівнянь

$$\begin{cases} 5721a + 197b = 7588 \\ 197a + 7b = 295 \end{cases},$$

розв‘язавши яку, отримаємо: $a = -4{,}038$, $b = 155{,}783$. Шукана функція буде мати вигляд $f(x) = -4{,}038x + 155{,}783$. Графік функції та розташування емпіричних точок відносно нього наведений на рис. 13.

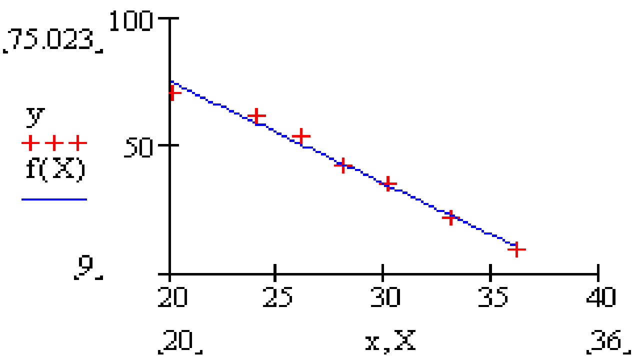


Рис. 13. Графік функції наближення відносно емпіричних точок

Степеневе наближення y=ax^m

Існує багато задач, в яких параметри мають степеневу залежність (наприклад, рух планет), отже існує необхідність побудови залежності у вигляді: $y = ax^m$. Відповідно до техніки методу найменших квадратів, мінімум похибки буде дорівнювати:

$$E(a) = \sum_{i=1}^{n} \left(ax_i^m - y_i\right)^2 .$$

Знайшовши першу похідну і прирівнявши її до нуля:

$$E'(a) = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^m \left(ax_i^m - y_i\right) = 2\sum_{i=1}^{n} \left(ax_i^{2m} - x_i^m y_i\right) = 0,$$

отримаємо рівняння для відшукання коефіцієнта a:

$$a = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i\right) / \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{2m}\right).$$

Побудова полінома

Розглянемо випадок, коли залежність між змінними має вигляд полінома: $y = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 + ... + a_{m+1} x^m$.

Для того, щоб вивести загальні формули побудови полінома степеня m, достатньо розглянути побудову квадратичної параболи. Розглянувши формули для лінії та квадратичної параболи, легко побачити закономірності для їхнього узагальнення на побудову багаточлена довільного степеня.

Отже, нехай задана таблиця початкових значень $\{x_i\}$ та $\{y_i\}$ і будемо будувати залежність між ними у вигляді: $y = ax^2 + bx + c$. Для відшукання коефіцієнтів a, b, c запишемо середньоквадратичну похибку і для відшукання її мінімуму прирівняємо перші часткові похідні до нуля:

$$E(a,b,c) = \sum_{i=1}^{n} \left(ax_i^2 + bx_i + c - y_i\right)^2 \to \min ; \qquad (*)$$

$$\frac{\partial E(a,b,c)}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \left(ax_i^2 + bx_i + c - y_i\right) = 0;$$

$$\frac{\partial E(a,b,c)}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i \left(ax_i^2 + bx_i + c - y_i\right) = 0;$$

$$\frac{\partial E(a,b,c)}{\partial c} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(ax_i^2 + bx_i + c - y_i\right) = 0.$$

Розкривши дужки, отримаємо систему лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів параболи:

$$a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^4\right) + b\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) + c\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i\ ;$$

$$a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) + b\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) + c\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i\ ; \qquad (**)$$

$$a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) + b\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) + cn = \sum_{i=1}^{n} y_i\ .$$

Щоб побудувати кубічну залежність виду $y = ax^3 + bx^2 + cx + d$, необхідно чотири рівняння, які отримуються знаходженням часткових похідних з умови $E(a,b,c) = \sum_{i=1}^{n}\left(ax_i^3 + bx^2{}_i + cx_i + d - y_i\right)^2 \to \min$, що приводить до системи лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів розмірності 4x4. Якщо порівняти систему рівнянь для лінії та квадратичної параболи, то можна помітити закономірність нарощування системи рівнянь відносно коефіцієнтів. Так, щоб отримати систему для кубічної параболи, до кожного рівняння необхідно додати ще один доданок за таким принципом: до останнього рівняння доданок із сумою $a\sum_{i=1}^{n} x_i^m$, де $m = 3-$ степінь полінома і до кожного наступного рівняння – $a\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1}$ і дописати ще одне – перше рівняння $a\sum_{i=1}^{n} x_i^6 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^5 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^4 + d\sum_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^3 y_i$.

З отриманих формул видно, що застосування методу найменших квадратів вимагає значної кількості обчислень (обчислення сум у системі рівнянь відносно коефіцієнтів), тому на практиці застосовують поліноми не вище 5-го степеня.

Приклад. За заданими даними побудуємо розрахункову таблицю і знайдемо коефіцієнти системи рівнянь:

i	x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
1	-3	3	9	-27	81	-9	27
2	0	1	0	0	0	0	0
3	2	1	2	8	16	2	4
4	4	3	16	64	256	12	48
$\sum_i$	3	8	29	45	353	5	79

$$\begin{cases} 353a + 45b + 29c = 79 \\ 45a + 29b + 3c = 5 \\ 29a + 3b + 4c = 8 \end{cases}$$

Розв’язавши систему, отримаємо:

$$y = \frac{585}{3278}x^2 - \frac{631}{3278}x + \frac{1394}{1639} = 0{,}178462x^2 - 0{,}192495x + 0{,}850519.$$

Зауваження. Якщо залежність не є поліноміальною, то її представлення у вигляді багаточлена дасть у результаті криву, яка буде сильно осцилювати, особливо при збільшенні степеня. Таке явище називають поліноміальним розгойдуванням, що також обумовлює застосування поліномів не вище п‘ятого степеня.

Приклад. Нехай задана таблиця початкових даних:

x_i	y_i		x_i	y_i
0,25	23,1		2,0	0,84
1,0	1,68		2,4	0,826
1,5	1,0		5,0	1,26

Наближення поліномами різного степеня наведено на рис. 14 і рис. 15.

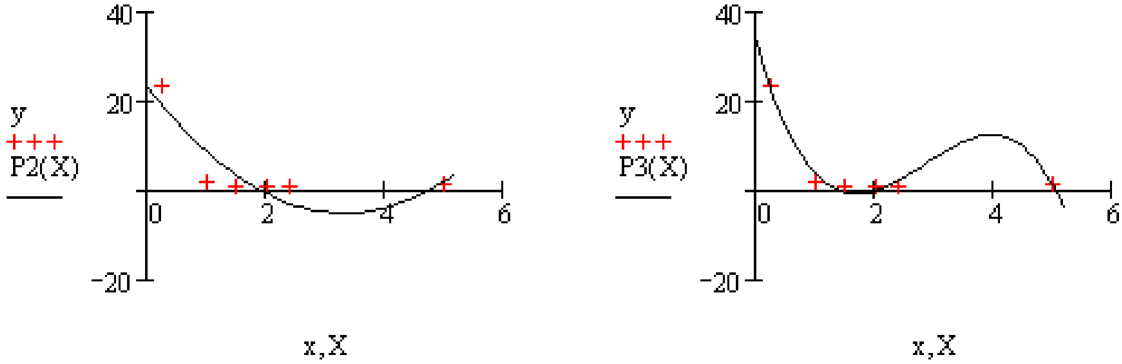


Рис. 14. Наближення поліномами 2-го і 3-го степеня:

$$y = 2{,}553x^2 - 16{,}962x + 22{,}931;$$

$$y = -2{,}295x^3 + 19{,}506x^2 - 46{,}507x + 33{,}037$$

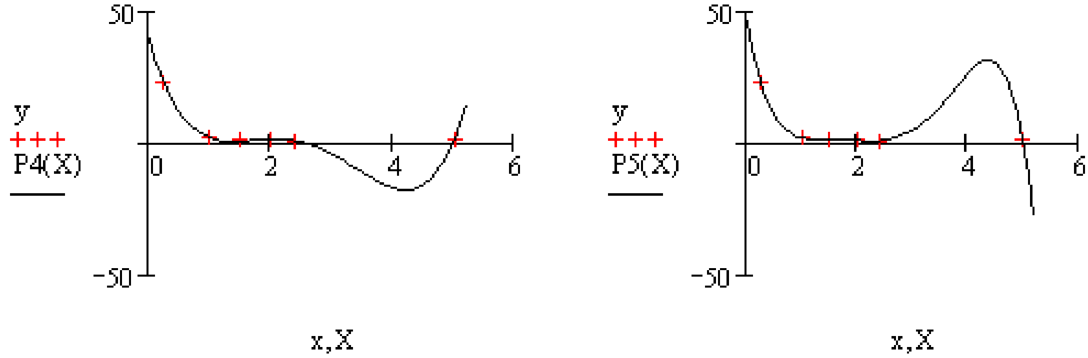


Рис. 15. Наближення поліномами 4-го і 5-го степеня:

$$y = 1{,}68x^4 - 17{,}15x^3 + 58{,}59x^2 - 80{,}593x + 39{,}92;$$

$$y = -1{,}1x^5 + 13x^4 - 54{,}5x^3 + 119{,}4x^2 - 118{,}1x + 46$$

З рис. 14, 15 видно, що найбільше розгойдування спостерігається на відрізку $[2,5]$ і поліном 5-го степеня дає найгірше наближення.

Для визначення оптимального степеня полінома користуються таким правилом: знаходять середньоквадратичне відхилення E і якщо $E \geq \varepsilon$, де ε – похибка експериментальних даних, то степінь полінома n можна збільшити, якщо $E \leq \varepsilon$, то старші степені апроксимації практично не достовірні і степінь можна знизити. Як правило, наближення починають з $n = 1$ і поступово нарощують поки $E \approx \varepsilon$.

Побудова експоненціальної залежності y=ce^ax

Нехай після нанесення заданих точок на графік очевидно, що між ними існує експоненціальна залежність і її будувати необхідно за законом: $y = ce^{ax}$, де a і c – коефіцієнти функції. Прологарифмуємо обидві частини рівняння:

$$\ln(y) = ax + \ln(c)$$

і введемо заміну: $Y = \ln(y)$, $b = \ln(c)$. Отримаємо систему рівнянь: $Y = ax + b$. Для знаходження коефіцієнтів a і b скористаємось системою, отриманою для прямої лінії. Після знаходження коефіцієнтів a, b, знайдемо шуканий коефіцієнт $c = e^b$.

Зауваження. Для вибору типу функції, щоб побудувати найкраще наближення, можна керуватись таким правилом: якщо значення аргументу утворюють геометричну прогресію і значення функції утворюють також геометричну прогресію, то для наближення застосовують степеневу функцію, а якщо значення аргументу утворюють арифметичну прогресію, а значення функції – геометричну, то використовують показникову функцію.

Лінійне згладжування за трьома точками в радіотехніці називають фільтрацією, оскільки воно слабко впливає на низькочастотні сигнали та послаблює високочастотні.

Всі методи згладжування необхідно застосовувати досить обережно, бо іноді надмірне його застосування призводить до спотворення поведінки функції.

Запитання для самоконтролю

1. Сформулюйте задачу інтерполяції.
2. В яких випадках застосовують інтерполяційні поліноми?
3. Дайте порівняльну характеристику інтерполяційним поліномам Лагранжа і Ньютона.
4. Який інтерполяційний поліном називають поліномом найкращого наближення і які властивості він має?
5. Яким чином можна визначити оптимальну степінь інтерполяційного полінома?
6. Сформулюйте визначення сплайну. В яких задачах сплайн-апроксимація є найкращою?
7. Який основний принцип методів згладжування?
8. Опишіть основний алгоритм згладжування за методом найменших квадратів.
9. Яке правило існує для вибору типу функції згладжування?

Список літератури

1. *Бахвалов Н.С.* Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.Н. Кобельков. – М: Бином. лаб. знаний, 2003. – 632 с.

2. *Вержбицкий В.М.* Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения / В.М. Вержбицкий. – М: Высш. шк., 2000. – 268 с.

3. *Вержбицкий В.М.* Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения / В.М. Вержбицкий. – М: Высш. шк., 2001. – 384 с.

4. *Волков А.С.* Численные методы / А.С. Волков. – М: Наука, 1984. – 286 с.

5. *Лоран П.Ж.* Аппроксимация и оптимизация / П.Ж. Лоран. – М: Мир, 1975. – 496 с.

6. *Метью Дж., Финк К.* Численные методы / Дж. Метью, К. Финк. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2001. – 714 с.

Навчальне видання

ГОРДА Олена Володимирівна

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

Конспект лекцій

Редагування та коректура *О.К. Чаплигіної*
Комп'ютерне верстання *Т.І.Кукарєвої*

Підписано до друку 2009. Формат 60×84 $_{1/16}$
Ум. друк. арк. 4,42. Обл.-вид. арк. 4,75.
Тираж 50 прим. Вид. № 34/І-08. Зам. №

КНУБА, Повітрофлотський проспект, 31, Київ, Україна, 03680

E-mail: red-isdat@knuba.edu.ua

Віддруковано в редакційно-видавничому відділі
Київського національного університету будівництва і архітектури

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру суб′єктів
Видавничої справи ДК № 808 від 13.02.2002 р.