

Чисельні методи в інформатиці

Навчальний посібник

Шумейко О.О.

Інститут підприємництва
"Стратегія"

Жовті Води

2010

Ш-96
ББК 32.97
УДК 683.1

Шумейко О.О. Чисельні методи в інформатиці. 2010. – 87 с.

У посібнику розглянуті обчислювальні методи розв'язку задач, які найбільш часто використовувалися в інженерних та науково-технічних розрахунках – це методи розв'язання систем рівнянь, методи наближення функцій, чисельне диференціювання та інтегрування, розв'язок диференціальних рівнянь. Особливістю викладеного матеріалу є побудова асимптотично оптимальних алгоритмів, які використовуються для побудови чисельних розв'язків.

Посібник комплектується збіркою завдань.

Для студентів та аспірантів вищих навчальних закладів.

Друкується за рішенням вченої ради обласного вищого навчального закладу "Інститут підприємництва "Стратегія "

Протокол № від

ISBN

©Шумейко О.О., 2010

Зміст

1	Базові поняття.	5
1.1	Поняття асимптотики.	5
1.2	δ -функція Дірака.	6
1.3	Зрізані функції. Залишковий член формули Тейлора у формі Пеано. . .	9
1.4	Функція Стеклова.	11
2	Розв'язок систем лінійних рівнянь.	16
2.1	Метод Гауса.	16
2.2	Метод Гауса-Жордана.	17
2.3	Схема Халецького.	17
2.4	Метод прогону.	20
2.5	Метод немонотонного прогону.	21
2.6	Розв'язок систем лінійних рівнянь методом простої ітерації.	22
2.6.1	Розв'язок функціональних рівнянь методом простої ітерації. . .	24
2.7	Метод Зейделя.	25
3	Обчислення різниць.	26
3.1	Різниці і факторіальні поліноми.	29
3.2	Числа Стірлінга	32
3.3	Обчислення сум.	33
4	Наближення функцій.	36
4.1	Інтерполяційний поліном Лагранжа.	36
4.2	Поповнення даних за межі даного проміжку.	40
4.3	Поповнення таблиць даних.	40
4.4	Тригонометричні інтерполяційні поліноми.	41
4.5	Метод найменших квадратів.	43
4.6	Лінеаризація при методі найменших квадратів.	44
5	Сплайни.	48
5.1	Інтерполяційні ламані. Гарантовані оцінки похибки.	49
5.2	Асимптотично оптимальний вибір вузлів при наближенні кривої ламаними.	52
5.3	Кусково-параболічна інтерполяція.	55
5.4	Кубічні сплайни.	59
5.5	В-сплайни.	62
5.6	Кубічні сплайни мінімального дефекту.	65
5.7	Опис кривих сплайнами.	67
6	Чисельне диференціювання і інтегрування.	68
6.1	Чисельне диференціювання.	69
6.2	Рішення задачі чисельного диференціювання на класі W_∞^r ($r = 2, 3$). . .	70
6.3	Уточнені формули обчислення похідних.	72
6.4	Чисельне інтегрування. Формула трапецій.	74
6.5	Чисельне інтегрування. Формула Сімпсона.	76

6.6	Інтегрування функцій, які швидко осцилюють.	77
7	Чисельні методи розв'язку диференціальних рівнянь.	78
7.1	Використання формули Тейлора для розв'язку задачі Коші.	79
7.2	Метод Ейлера	79
7.3	Метод Рунге-Кутта.	80
7.4	Розв'язок звичайних лінійних диференціальних рівнянь другого порядку методом різниць	81
7.5	Метод сіплайн-колокації.	83
7.6	Розв'язок рівняння Пуассона методом різниць.	85
	Список літератури	87

1 Базові поняття.

1.1 Поняття асимптотики.

Щоб описати поведінку функції $f(x)$ при $x \rightarrow \infty$ у термінах відомої нам функції $\varphi(x)$, часто використовують поняття, наведені Бахманом і Ландау. Надалі будемо вважати, що x — дійсна змінна.

1. Якщо $f(x)/\varphi(x) \rightarrow 0$, то пишемо

$$f(x) = o(\varphi(x)) (x \rightarrow \infty)$$

і говоримо, що порядок f менше, ніж порядок φ .

2. Якщо $|f(x)/\varphi(x)|$ обмежена, то пишемо

$$f(x) = O(\varphi(x)) (x \rightarrow \infty)$$

і говоримо, що f має порядок, що не переверщує порядок φ .

3. Якщо відношення $f(x)/\varphi(x)$ прагне до одиниці, то будемо писати

$$f(x) \sim \varphi(x) (x \rightarrow \infty)$$

і при цьому будемо говорити, що f еквівалентно φ .

Зокрема, співвідношення $f = o(1)(x \rightarrow \infty)$ означає що f прагне до нуля при $x \rightarrow \infty$, а співвідношення $f = O(1)(x \rightarrow \infty)$ означає, що при $x \rightarrow \infty$ величина $|f|$ обмежена.

Наприклад,

$$(x+1)^2 \sim x^2, \frac{1}{x^2} = o\left(\frac{1}{x}\right) (x \rightarrow \infty).$$

Символ O іноді зв'язують не із граничною точкою ∞ , а з інтервалом $[a, \infty)$, тоді співвідношення $f(x) = O(\varphi(x))$ при $x \in [a, \infty)$ означає, що величина $|f(x)/\varphi(x)|$ обмежена для $x \in [a, \infty)$. Однак символи o і \sim у такий спосіб використовувати не можна. Крім того, з $f(x) = O(\varphi(x))$ при $x \in [a, \infty)$ випливає існування такого числа K , що

$$|f(x)| \leq K |\varphi(x)| (x \geq a),$$

причому ніякої інформації про дійсну величину K це співвідношення не дає. Правда, для будь-якого числа, більшого ніж K це нерівність також буде виконуватися, таким чином, існує нескінченна множина таких чисел.

Нескладно показати, що мають місце наступні співвідношення

$$O(\varphi)O(\psi) = O(\varphi\psi); O(\varphi)o(\psi) = o(\varphi\psi); O(\varphi) + O(\psi) = O(|\varphi| + |\psi|).$$

Теорема 1 *Нехай $f(x)$ неперервно диференційована функція і $f(x) \sim x^\nu$ при $x \rightarrow \infty$, де $\nu(\geq 1)$ стала. Тоді, якщо $f'(x)$ неспадна функція при всіх досить великих x , то $f'(x) \sim \nu x^{\nu-1}$.*

Доказ. Маємо $f(x) = x^\nu(1 + \eta(x))$, де $|\eta(x)| < \varepsilon$, при $x > X > 0$, і ε довільне число з інтервалу $(0, 1)$. Якщо $h > 0$, то

$$hf'(x) \leq \int_x^{x+h} f'(t)dt = f(x+h) - f(x) =$$

$$\begin{aligned} \int_x^{x+h} \nu t^{\nu-1} dt + (x+h)^\nu \eta(x+h) - x^\nu \eta(x) &\leq \\ &\leq h\nu(x+h)^{\nu-1} + 2\varepsilon(x+h)^\nu. \end{aligned}$$

Покладемо $h = \varepsilon^{1/2}x$. Тоді

$$f'(x) \leq \nu x^{\nu-1} \left((1 + \sqrt{\varepsilon})^{\nu-1} + 2\nu^{-1}\sqrt{\varepsilon} (1 + \sqrt{\varepsilon})^\nu \right), (x > X).$$

Аналогічно

$$f'(x) \geq \nu x^{\nu-1} \left((1 - 1 - \sqrt{\varepsilon})^{\nu-1} - 2\nu^{-1}\sqrt{\varepsilon} \right), \left(x > \frac{X}{1 - 1 - \sqrt{\varepsilon}} \right).$$

Теорема доведена.

Зазначимо, що все вищезазначене має місце і для співвідношень, якщо $x \rightarrow a$, зокрема, для $x \rightarrow 0$.

1.2 δ -функція Дірака.

У цьому параграфі ми розглянемо одну чудову узагальнену функцію, яку будемо використовувати надалі при отриманні інтегральних уявлень.

Нехай

$$\delta_h(t) = \begin{cases} 1/h & (|t| \leq h/2), \\ 0 & (|t| > h/2). \end{cases}$$

Границю функції $\delta_h(t)$ при $h \rightarrow 0$ називають узагальненою δ — функцією Дірака або просто δ — функцією.

Наведемо найпростіші властивості δ — функції.

Твердження 1 *Якщо функція $f(t)$ неперервна в деякій околиці точки $c \in (a, b)$, то виконується рівність*

$$\int_a^b f(t)\delta(t-c) dt = f(c).$$

Дійсно, як відомо з теореми про середнє значення для інтегралів, для будь-якого досить малого $h > 0$ знайдеться точка $\xi \in [c - h/2, c + h/2]$ така, що

$$\int_a^b f(t)\delta_h(t-c)dt = \frac{1}{h} \int_{c-h/2}^{c+h/2} f(t) dt = f(\xi).$$

Отже,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t)\delta(t-c) dt &= \int_a^b f(t)\delta_h(t-c)dt = \\ &= \lim_{h \rightarrow 0, \xi \in [c-h/2, c+h/2]} f(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow c} f(\xi) = f(c), \end{aligned}$$

що і було потрібно довести.

Надалі будемо вважати, що якщо функція $f(t)$ має в точці x однібічні границі, то в самій точці x вона визначена рівністю

$$f(x) = \frac{1}{2}(f(x+0) + f(x-0)).$$

Майже не змінюючи доведення, можна показати, що якщо функція $f(t)$ має розрив першого роду в точці c , то має місце рівність

$$\int_a^b f(t)\delta(t-c) dt = \frac{1}{2}(f(c+0) + f(c-0)).$$

Так, для функцій, які мають скінченне число розривів першого роду (і, природно, що не має розривів інших видів) твердження 1 має місце для всіх $c \in (a, b)$.

Із твердження 1 негайно випливає наступне твердження

Твердження 2 Якщо функція $f(t)$ неперервна на відрізку $[a, b]$, то для будь-яких точок c_k ($k = 1, 2, \dots, n$) і будь-яких коефіцієнтів α_k ($k = 1, 2, \dots, n$) має місце рівність

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k f(c_k) = \int_a^b f(t)g(t) dt,$$

де

$$g(t) = \sum_{k=1}^n \alpha_k \delta(t - c_k).$$

Нехай, як завжди, $\operatorname{sgn}(x)$ — знак числа x , тобто

$$\operatorname{sgn} x = \begin{cases} 1 & (t > 0), \\ 0 & (t = 0), \\ -1 & (t < 0), \end{cases}$$

Зазначимо, що

$$|x| = x \operatorname{sgn}(x)$$

і

$$H(x) = \frac{1}{2}(1 + \operatorname{sgn}(x)). \quad (1)$$

Функцію $H(x)$ називають функцією Хевісайда.

δ -функція Дірака є похідною від функції Хевісайда. Дійсно, для неперервної на всій осі функції

$$H_h(t) = \begin{cases} 0, & (t < -h/2); \\ 1/2 + t/h, & (|t| \leq h/2); \\ 1, & (t > h/2) \end{cases} \quad (2)$$

у будь-якій точці t виконується рівність

$$\lim_{h \rightarrow 0} H_h(t) = H(t).$$

Крім того, для всіх $x = \pm h/2$

$$H'_h(t) = \delta_h(t).$$

Це твердження можна прийняти за визначення δ -функції.

Твердження 3 Нехай c_k ($k = 1, 2, \dots, n$) — набір довільних точок (для визначеності будемо вважати, що $c_1 < c_2 < \dots < c_n$) і α_k ($k = 1, 2, \dots, n$) — довільні числа такі, що

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 0. \quad (3)$$

Крім того, нехай $G(t) = g(\{c_k\}, \{\alpha_k\}, t)$ схи́дчаста функція, з вузлами в точках $\{c_k\}$ така, що $G(c_1 - 0) = 0$,

$$G(c_k + 0) - G(c_k - 0) = \alpha_k \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

і $G(c_n + 0) = 0$ (цими умовами функція $G(t)$ визначається єдиним чином).

Тоді для будь-якого проміжку $[a, b]$, що містить всі точки c_k і будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^1$ виконуються рівності

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k f(c_k) = \int_a^b f(t)g(t) dt = - \int_a^b f'(t)G(t) dt. \quad (4)$$

Доказ. Покладемо

$$G_1(t) = \sum_{k=1}^n \alpha_k (t - c_k).$$

Ясно, що $G_1(t)$ є кусково-сталою функцією з вузлами в точках c_k і тільки в них. Крім того $G_1(c_1 - 0) = 0$,

$$G_1(c_k + 0) - G_1(c_k - 0) = \alpha_k \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

і у силу (3)

$$G(c_n + 0) = \sum_{k=1}^n \alpha_k (c_k + 0) = \sum_{k=1}^n \alpha_k \cdot 1 = 0.$$

Отже, $G_1(t) = G(t)$ і

$$G'(t) = \sum_{k=1}^n \alpha_k \delta(t - c_k) = g(t).$$

Тепер, на підставі формули інтегрування частинами, маємо

$$\int_a^b f'(t)G(t) dt = f(t)G(t) \Big|_a^b - \int_a^b f(t)g(t) dt.$$

Остаточну рівність

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k f(c_k) = - \int_a^b f'(t)G(t) dt$$

можна одержати і без залучення поняття δ -функції. Дійсно

$$\begin{aligned} \int_a^b f'(t)G(t) dt &= \int_a^{c_1} f'(t)G(t) dt + \sum_{k=1}^{n-1} \int_{c_k}^{c_{k+1}} f'(t)G(t) dt + \int_{c_n}^b f'(t)G(t) dt = \\ &= f(t)g(t) \Big|_a^{c_1} + \sum_{k=1}^{n-1} f(t)G(t) \Big|_{c_k}^{c_{k+1}} + f(t)g(t) \Big|_{c_n}^b = \\ &= 0 + \sum_{k=1}^{n-1} f(c_{k+1})G(c_{k+1} - 0) - f(c_k)G(c_k + 0) = \\ &= - \sum_{k=1}^n f(c_k)(G(c_k + 0) - G(c_k - 0))f(c_k) + 0 = \end{aligned}$$

$$= - \sum_{k=1}^n \alpha_k f(c_k),$$

що і треба було показати.

Подібно цьому майже будь-яке інтегральне представлення похибок, які фігурують у наступних параграфах, можна одержати без залучення δ -функцій. Однак методи, засновані на понятті δ -функції більше наочні і швидше приводять нас до бажаного результату. Зрештою, ми їх можемо використати для того, щоб висунути гіпотезу про правильне написання інтегрального представлення похибки, а потім, довести цей результат формально, за допомогою інтегрування частинами.

1.3 Зрізані функції. Залишковий член формули Тейлора у формі Пеано.

Нехай $r \geq 0$ і

$$t_+^r = \begin{cases} t^r & (t > 0), \\ 0 & (t < 0). \end{cases}$$

Функції $(t - x)_+^r$ називають зрізаними поліномами, функціями зрізок або зрізаними функціями.

Зрозуміло, що

$$t_+^0 = \frac{1}{2}(1 + \operatorname{sgn} t).$$

Крім того,

$$t_+^1 = \frac{1}{2}(t + |t|)$$

та

$$t_+^r = \frac{1}{2}t^{r-1}(t + |t|) = \frac{1}{2}t^r(1 + \operatorname{sgn} t).$$

Доведемо, наприклад, останню рівність. Якщо $t > 0$, то $|t| = t$ і

$$\frac{1}{2}t^{r-1}(t + |t|) = \frac{1}{2}t^{r-1}(t + t) = t^r,$$

а, якщо $t < 0$, то $|t| = -t$ і

$$\frac{1}{2}t^{r-1}(t + |t|) = \frac{1}{2}t^{r-1}(t - t) = 0.$$

Відзначимо одне корисне співвідношення

$$(t_+^r)' = r t_+^{r-1}.$$

Нагадаємо, що запис $f \in C_D^r$ означає, що функція f неперервна на множині D разом зі своїми похідними до r -го порядку включно.

Крім того,

$$T_{r,a}(f, x) = \sum_{k=0}^r \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x - a)^k$$

це відрізок ряду Тейлора функції f в околі точки a .

Основне застосування функцій зрізок сформульовано в наступному твердженні

Теорема 2 Якщо $f \in C_{[a,b]}^r$, то для будь-якого $x \in [a, b]$ виконується рівність

$$f(x) - \sum_{k=0}^r \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k = \frac{1}{r!} \int_a^b (x-t)_+^r f^{(r+1)}(t) dt. \quad (5)$$

Рівність (5) дає інтегральне уявлення залишкового члена формули Тейлора. Іноді його називають залишковим членом формули Тейлора у формі Пеано. При цьому зрізаний поліном $(x-t)_+^r/r!$ називають ядром або функцією Пеано.

Зазначимо, що з рівності 5 і теореми про середнє значення для інтегралів (тому що функція $(x-t)_+^r/r!$ не змінює знак на проміжку $[a, b]$) витікає, що знайдеться точка $c \in [a, b]$ така, що

$$\begin{aligned} \frac{1}{r!} \int_a^b (x-t)_+^r f^{(r+1)}(t) dt &= f^{(r+1)}(c) \frac{1}{r!} \int_a^b (x-t)_+^r dt = \\ &= f^{(r+1)}(c) \frac{1}{r!} \int_a^x (x-t)^r dt = \frac{f^{(r+1)}(c)}{(r+1)!} (x-a)^{r+1}. \end{aligned}$$

Таким чином,

$$f(x) - \sum_{k=0}^r \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k = \frac{f^{(r+1)}(c)}{(r+1)!} (x-a)^{r+1}.$$

Тобто з теореми 2 отримуємо теорему Лагранжа про залишковий член формули Тейлора (у формі Лагранжу.)

Самостійно порівняйте також праву частину рівності (5) з залишковим членом формули Тейлора у формі Коші (переконайтеся, що це майже те саме).

Доведення теореми 2. Позначимо праву частину рівності (5) через $R_{r,a}(f, x)$. Тоді, за допомогою інтегрування частинами, одержуємо

$$\begin{aligned} R_{r,a}(f, x) &= \frac{1}{r!} \int_a^b (x-t)_+^r f^{(r+1)}(t) dt = \\ &= \frac{1}{r!} (x-t)_+^r f^{(r)}(t) \Big|_a^b - \int_a^b \left(\frac{1}{r!} (x-t)_+^r \right)'_t f^{(r)}(t) dt = \\ &= \frac{1}{r!} (x-b)_+^r f^{(r)}(b) - \frac{1}{r!} (x-a)_+^r f^{(r)}(a) + \\ &\quad + \frac{1}{(r-1)!} \int_a^b (x-t)_+^{r-1} f^{(r)}(t) dt = \\ &= \frac{1}{(r-1)!} \int_a^b (x-t)_+^{r-1} f^{(r)}(t) dt = -\frac{1}{r!} (x-a)^r f^{(r)}(a) + R_{r-1,a}(f, x). \end{aligned}$$

Тобто,

$$R_{r,a}(f, x) = R_{r-1,a}(f, x) - \frac{1}{r!} (x-a)^r f^{(r)}(a).$$

Звідси, за допомогою методу математичної індукції, одержуємо

$$\begin{aligned} R_{r,a}(f, x) &= R_{r-2,a}(f, x) - \frac{1}{r!} (x-a)^r f^{(r)}(a) - \frac{1}{(r-1)!} (x-a)^{r-1} f^{(r-1)}(a) = \dots \\ &= R_{0,a}(f, x) - \sum_{k=1}^r \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k. \end{aligned}$$

Для завершення доведення теореми 2 залишається зазначити, що

$$\begin{aligned} R_{0,a}(f, x) &= \frac{1}{0!} \int_a^b (x-t)_+^0 f'(t) dt = \int_a^x f(t) dt = \\ &= f(x) - f(a). \end{aligned}$$

Нехай задане довільне розбиття

$$\Delta_{n[a,b]} = \{a = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n = b\}$$

проміжку $[a, b]$.

Функції $s(t)$ вигляду

$$s(t, \Delta_{n[a,b]}) = \sum_{k=0}^{r-1} t^k + \sum_{\nu=1}^n c_\nu (t - t_\nu)_+^r$$

називають сплайн функціями порядку r мінімального дефекту з вузлами розбиття $\Delta_{n[a,b]}$ або просто сплайнами. Такі функції ми досить детально розглянемо пізніше.

1.4 Функція Стеклова.

Нехай задана функція $f(x)$, яка може бути проінтегрована по Риману (або по Лебегу).

Функцію

$$f_h(t) = \frac{1}{h} \int_{x-h/2}^{x+h/2} f(t) dt$$

називають функцією Стеклова від функції $f(x)$ із кроком h .

Зазначимо деякі властивості функції Стеклова. Насамперед, звернемо увагу на той факт, що

$$(\delta(\cdot))_h(t) = \delta_h(t).$$

Крім того, якщо $H(t)$ функція Хевісайда, яка задана рівністю (1), то функція Стеклова $H_h(t)$ задається співвідношеннями (2).

Звідси маємо, що якщо $f(t)$ є кусково-сталою функцією з вузлами (точками розриву) у точках

$$c_1 < c_2 < \dots < c_n,$$

то при досить малих значеннях h (при $h < \min_{2 \leq i \leq n} (c_i - c_{i-1})$) функція Стеклова від функції $f(t)$ є неперервною ламаною, яка співпадає з функцією $f(t)$ на відрізках $[c_{i-1} + h/2, c_i - h/2]$ ($i = 2, 3, \dots, n$) і лінійна на відрізках $[c_i - h/2, c_i + h/2]$.

З теореми про середнє значення для інтегралів маємо, що в будь-якій точці x у якій функція $f(t)$ має односторонні границі, виконується рівність

$$\lim_{h \rightarrow 0} f_h(x) = f(x). \tag{6}$$

Нагадаємо, що якщо функція $f(t)$ має односторонні границі в точці x , тоді

$$f(x) = \frac{1}{2} (f(x+0) + f(x-0)).$$

Функцію Стеклова іноді називають найпростішим оператором згладжування, демпфером або суматором, що згладжує. Такі назви виправдовують її властивості і застосування. На базі функції Стеклова будується багато відомих операторів згладжування.

Приведемо деякі властивості оператора Стеклова як оператора згладжування.

Нехай, як завжди,

$$\|f\|_{C[a,b]} = \max_{t \in [a,b]} |f(x)|$$

є Чебишевська (або рівномірна) норма функції $f \in C[a,b]$ (тобто функція $f(x)$ неперервна на проміжку $[a, b]$).

Теорема 3 *Оператор Стеклова не збільшує рівномірну норму функції, тобто*

$$\|f_h\|_{C[a-h/2, b+h/2]} \leq \|f\|_{C[a,b]}.$$

Дійсно, для всіх $x \in [a - h/2, b + h/2]$

$$f_h(x) = \frac{1}{h} \int_{x-h/2}^{x+h/2} f(t) dt \leq \max_{t \in [a,b]} |f(x)| \frac{1}{h} \int_{x-h/2}^{x+h/2} dt = \|f\|_{C[a,b]} \cdot 1 = \|f\|_{C[a,b]}.$$

Звідси отримуємо бажаний результат.

Якщо $A_h(f) = f_h$ — оператор Стеклова, то для норми оператора Стеклова має місце співвідношення $\|A_h\|_{C \rightarrow C} \leq 1$. Самостійно доведіть цей факт.

Наступне твердження уточнює співвідношення (6).

Теорема 4 *Для будь-якої функції $f \in C^1_{[a,b]}$ вірна нерівність*

$$\|f - f_h\|_{C[a-h/2, b+h/2]} \leq \frac{h}{4} \|f'\|_{C[a,b]}, \quad (7)$$

і для будь-якої функції $f \in C^2_{[a,b]}$ вірна нерівність

$$\|f - f_h\|_{C[a-h/2, b+h/2]} \leq \frac{h^2}{24} \|f''\|_{C[a,b]}. \quad (8)$$

Доведення. Відповідно до твердження 1 для будь-якого $x \in [a + h/2, b - h/2]$ виконуються рівності

$$f(t) - f_h(t) = \int_{x-h/2}^{x+h/2} f(t)(\delta(t-x) - 1) dt = \int_{x-h/2}^{x+h/2} f(t)L'_h(t-x) dt,$$

де

$$L_h(t) = \int_{-h/2}^t (\delta(u) - 1) du = \begin{cases} -1/2 - t/h & (t \in [-h/2, 0)), \\ 1/2 - t/h & (t \in (0, h/2]) \end{cases}.$$

Тепер, зважаючи на те, що $L_h(\pm h/2) = 0$, за допомогою інтегрування частинами, запишемо

$$f(x) - f_h(x) = - \int_{x-h/2}^{x+h/2} f'(t)L_h(t-x) dt. \quad (9)$$

Ми одержали інтегральне уявлення похибки відхилення диференційованої функції від її функції Стеклова.

З рівності (9) маємо, що для будь-якого $x \in [a + h/2, b - h/2]$ виконуються співвідношення

$$\begin{aligned} |f(x) - f_h(x)| &\leq \int_{x-h/2}^{x+h/2} |f'(t)| L_h(t-x) dt \leq \\ &\leq \max_{t \in [x-h/2, x+h/2]} |f'(t)| \int_{x-h/2}^{x+h/2} |L_h(t-x)| dt \leq \max_{t \in [a,b]} |f'(t)| \int_{-h/2}^{+h/2} |L_h(t)| dt = \\ &= \frac{h}{4} \|f'\|_{C_{[a,b]}}, \end{aligned}$$

що і завершує доведення нерівності (7).

Нехай

$$L_h^*(t) = \int_{-h/2}^t L_h(u) du.$$

За допомогою інтегрування частинами правої частини рівності (9) одержуємо

$$f(x) - f_h(x) = \int_{x-h/2}^{x+h/2} f''(t) L_h^*(t-x) dt. \quad (10)$$

Звідси маємо, що для будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^2$ і для будь-якого $x \in [a + h/2, b - h/2]$ виконуються співвідношення

$$\begin{aligned} |f(x) - f_h(x)| &\leq \int_{x-h/2}^{x+h/2} |f''(t)| L_h^*(t-x) dt \leq \\ &\leq \max_{t \in [x-h/2, x+h/2]} |f''(t)| \int_{x-h/2}^{x+h/2} |L_h^*(t-x)| dt \leq \max_{t \in [a,b]} |f''(t)| \int_{-h/2}^{+h/2} |L_h^*(t)| dt = \\ &= 2 \int_0^{h/2} \frac{h}{2} \left(\frac{t}{h} - \frac{1}{2} \right)^2 dt \|f''\|_{C_{[a,b]}} = \frac{h^2}{8} \|f''\|_{C_{[a,b]}}. \end{aligned}$$

Нерівності (7) і (8) є точними тому, що вони обертаються в рівності для функцій $\psi_1(x) = \psi(x - (a+b)/2)$ і $\xi_1(x) = \xi(x - (a+b)/2)$, де $\psi(x) = |x|$ і $\xi(x) = x^2$ при всіх $h < (a+b)/2$.

Дійсно, у першому випадку $\psi(x) - \psi_h(x)$ є парною функцією, яка дорівнює 0 для $x \geq h/2$ і

$$\frac{2}{h} \left(x - x - \frac{h}{2} \right)^2$$

для $x \in [0, h/2]$.

Тому

$$\|\psi_1 - 1 - \psi_{1,h}\|_{C_{[a,b]}} = \|\psi - \psi_h\|_{C_{[-h/2, h/2]}} = |\psi(0) - \psi_h(0)| = h/2$$

і $\|\psi_1'\|_{C_{[a,b]}} = \|\psi'\|_{C_{[-(b-a)/2, (b-a)/2]}} = 1$.

Крім того для всіх x

$$\xi(x) - \xi_h(x) = \frac{h^2}{12}$$

і $\xi''(x) = 2$. Тому

$$\|\xi_1 - 1 - \xi_{1,h}\|_{C_{[a,b]}} = \frac{h^2}{12} = \frac{h^2}{24} \cdot 2 = \frac{h^2}{24} \|\xi''\|_{C_{[a,b]}}.$$

Відзначимо ще три простих факти:

- а) функція Стеклова від непарної функції — непарна;
- б) функція Стеклова від парної функції — парна;
- с) функція Стеклова від a -періодичної функції — a -періодична функція.

Нехай

$$\|f\|_{L_p[a,b]} = \begin{cases} \left(\int_a^b |f(t)|^p dt \right)^{1/p} & p \in [1, \infty); \\ \sup_{t \in [a,b]} |f(t)| & p = \infty; \end{cases}$$

L_p -норма функції f ;

$L_p[a,b]$ — простір вимірних на проміжку $[a,b]$ функцій f з обмеженою нормою $\|f\|_{L_p[a,b]}$;

$L_p^r[a,b]$ — множина всіх функцій f у яких $(r-1)$ похідна $f^{(r-1)}$ ($f^0 = f$) абсолютно неперервна на відрізку $[a,b]$ і $f^{(r)} \in L_p[a,b]$.

Окрім того, нехай

$$V_a^b(f) = \sup_{a=x_0 < x_1 < \dots < x_n=b} \sum_{i=1}^n |f(x_i) - f(x_{i-1})|$$

— повна варіація функції f на проміжку $[a,b]$.

Далі, $W_{p[a,b]}^r$ — множина функцій $f \in L_p^r[a,b]$ таких, що $\|f^{(r)}\|_{L_p[a,b]} \leq 1$.

Наступне твердження (яке ми наведемо без доведення) узагальнює теореми 3 і 4.

Теорема 5 *Оператор Стеклова не збільшує L_p -норму функції, тобто*

$$\|f_h\|_{L_p[a-h/2, b+h/2]} \leq \|f\|_{L_p[a,b]}. \quad (11)$$

Оператор Стеклова не збільшує варіацію функції, тобто

$$V_{a-h/2}^{b+h/2}(f_h) \leq V_a^b(f), \quad (12)$$

для будь-якої функції $f \in L_p^1[a,b]$ виконується нерівність

$$\|f - f_h\|_{L_p[a-h/2, b+h/2]} \leq \frac{h}{4} \|f'\|_{L_p[a,b]} \quad (13)$$

і для будь-якої функції $f \in L_p^2[a,b]$ виконується нерівність

$$\|f - f_h\|_{L_p[a-h/2, b+h/2]} \leq \frac{h^2}{24} \|f''\|_{L_p[a,b]}. \quad (14)$$

Для функції (яку будемо позначати f), яка визначена на всій осі рівностями

$$\begin{cases} f(a+0) & (x < a), \\ f(x) & [a \leq x \leq b], \\ f(b+0) & (x > b), \end{cases}$$

співвідношення (11) — (14) приймуть більш простий вигляд (це також стосується твердження теорем 3 і 4):

$$\|f_h\|_{L_p[a,b]} \leq \|f\|_{L_p[a,b]}; \quad (15)$$

$$V_a^b(f_h) \leq V_a^b(f); \quad (16)$$

для будь-якої функції $f \in L_p^1[a, b]$ виконується нерівність

$$\|f - f_h\|_{L_p[a, b]} \leq \frac{h}{4} \|f'\|_{L_p[a, b]} \quad (17)$$

і для будь-якої функції $f \in L_p^2[a, b]$ виконується нерівність

$$\|f - f_h\|_{L_p[a, b]} \leq \frac{h^2}{24} \|f''\|_{L_p[a, b]}.$$

Так само виглядають нерівності і для періодичних (з періодом $b - a$) функцій.
Нехай

$$\begin{aligned} f_{hh}(x) &= (f_h)_h(x), \\ f_{hhh}(x) &= (f_{hh})_h(x) \end{aligned}$$

і так далі.

Функції $f_{hh}(x)$ і $f_{hhh}(x)$ називають другими і третіми (повторними) функціями Стеклова. Властивості їх багато в чому успадковують властивості функцій Стеклова. Так, наприклад, для других функцій Стеклова вірні нерівності (доведіть самостійно)

$$\|f_{hh}\|_{C_{[a-h, b+h]}} \leq \|f\|_{C_{[a, b]}},$$

для будь-якої функції $f \in C_{[a, b]}^1$ вірна нерівність

$$\|f - f_{hh}\|_{C_{[a-h, b+h]}} \leq \frac{h}{3} \|f'\|_{C_{[a, b]}} \quad (18)$$

і для будь-якої функції $f \in C_{[a, b]}^2$ вірна нерівність

$$\|f - f_{hh}\|_{C_{[a-h, b+h]}} \leq \frac{h^2}{12} \|f''\|_{C_{[a, b]}}. \quad (19)$$

Ми не будемо приводити докладне доведення цих нерівностей, а зазначимо лише, що для цього досить майже дослівно повторити доведення теорем 3 і 4, замінивши інтегральні уявлення (9) і (10) наступними інтегральними уявленнями, які легко перевіряються інтегруванням частинами для будь-якої функції $f \in C^1[a, b]$

$$f(x) - f_{hh}(x) = - \int_{x-h}^{x+h} f'(t) M_h(t-x) dt, \quad (20)$$

де $M_h(t)$ — непарна функція, яка визначається на $(0, h]$ рівністю $M_h(t) = (t/h + 1)^2/2$ і для будь-якої функції $f \in C^2[a, b]$

$$f(x) - f_{hh}(x) = - \int_{x-h}^{x+h} f''(t) M_h^*(t-x) dt, \quad (21)$$

де $M_h^*(t)$ — парна функція, яка визначається на $(0, h]$ рівністю $M_h^*(t) = h(t/h + 1)^3/6$.

2 Розв'язок систем лінійних рівнянь.

Дискретизація будь-якої неперервної задачі, з однієї сторони, приводить до появи різниць, що є дискретним аналогом похідних, а з іншої сторони, до систем лінійних рівнянь. Тому, не дивлячись на уявну прірву, яка поділяє поняття різниці та систем лінійних рівнянь, ці два розділи природно поставити поруч.

На початку розглянемо систему n - лінійних рівнянь із n - невідомими

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \dots + a_{1,n}x_n = d_1, \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \dots + a_{2,n}x_n = d_2, \\ \vdots \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \dots + a_{n,n}x_n = d_n, \end{cases}$$

далі цю систему будемо записувати в матричному вигляді

$$AX = D,$$

де

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}.$$

Задача розв'язку систем лінійних рівнянь виникає дуже часто, що привело до появи багатьох методів. Ми зосередимо увагу лише на тих, які типові для абсолютної більшості задач.

Вибір методу є складним питанням і часто пов'язаний зі специфікою задачі, що породжує дану систему лінійних рівнянь.

2.1 Метод Гауса.

Із прямих методів найпоширенішим є метод Гауса – метод послідовного виключення невідомих.

Нехай $a_{1,1} \neq 0$ (у протилежному випадку перше рівняння можна поміняти місцями з будь-яким рівнянням з коефіцієнтом при x_1 зі значенням відмінним від нуля). Поділимо перше рівняння на $a_{1,1}$, у результаті чого одержимо

$$x_1 + a_{1,2}^1 x_2 + \dots + a_{1,n}^1 x_n = d_1^1, \quad (22)$$

де

$$a_{1,k}^1 = \frac{a_{1,k}}{a_{1,1}}, \quad d_1^1 = \frac{d_1}{a_{1,1}}.$$

Потім з кожного i -го рівняння віднімається рівняння (22) помножене на $a_{1,i}$. У результаті одержуємо систему вигляду

$$\begin{cases} x_1 + a_{1,2}^1 x_2 + \dots + a_{1,n}^1 x_n = d_1^1, \\ a_{2,2}^1 x_2 + \dots + a_{2,n}^1 x_n = d_2^1, \\ \vdots \\ a_{n,2}^1 x_2 + \dots + a_{n,n}^1 x_n = d_n^1. \end{cases}$$

Далі, у припущенні що $a_{2,2}^1 \neq 0$, повторюємо всю цю процедуру, виключаючи x_2 із всіх рівнянь, починаючи із третього. Сукупність n таких обчислень, у результаті яких одержуємо систему вигляду

$$x_i + \sum_{j=i+1}^n a_{i,j}^i x_j = d_i^i \quad i = 1, 2, \dots, m$$

називають *прямим ходом методу Гауса*.

На наступному кроці з останнього n -го рівняння визначаємо x_n , з попереднього знаходимо x_{n-1} і так далі. Послідовне визначення невідомих називають *зворотним ходом методу Гауса*.

У такий спосіб, на кожному кроці прямого ходу вибирається рівняння і невідоме, яке підлягає виключенню з інших рівнянь. Це відповідає вибору коефіцієнту у матриці системи і цей коефіцієнт називають *провідним* на даному кроці. Із побудови зрозуміло, що він повинен бути відмінним від нуля. Більше того, якщо провідний коефіцієнт близький до нуля, то ділення на нього приведе до більших значень на наступному кроці, що приводить до росту похибок і швидкій втраті точності. Щоб уникнути цього, в якості провідного коефіцієнту потрібно брати найбільший по модулю коефіцієнт з всієї системи або у даному рівнянні.

Розглянемо декілька модифікацій методу Гауса.

2.2 Метод Гауса-Жордана.

У цьому методі при виключенні невідомої x_k її виключають із всіх рівнянь, включаючи і ті, які розв'язані для попередніх змінних. При цьому немає необхідності у зворотному ході.

Використання методу Гауса-Жордана найчастіше виправдано необхідністю визначення зворотної матриці.

Так, вирішуючи систему лінійних рівнянь

$$AX = D$$

методом Гауса-Жордана, у результаті ми одержуємо систему вигляду

$$IX = D_0,$$

де I одинична матриця. Якщо ж до лівої частини вихідного рівняння ми приєднаємо одиничну матрицю

$$AX = D|I,$$

то очевидно, що в результаті використання методу Гауса-Жордана одержимо рівняння

$$IX = D_0 A^{-1},$$

де A^{-1} матриця, зворотна до A .

2.3 Схема Халецького.

Як правило, алгоритми розкладання додатно означених матриць пов'язані з перетворенням вихідної матриці або у вигляді

$$A = LL^T,$$

де L нижня трикутна матриця (схема Халецького), або у вигляді

$$A = LDL^T,$$

де L нижня трикутна матриця з одиничною діагоналлю, а D діагональна матриця з додатними елементами. Ці алгоритми забезпечують стійкий обчислювальний процес і вимагають малого числа обчислювальних операцій.

Розв'язуючи систему

$$AX = D,$$

запишемо матрицю коефіцієнтів A у вигляді добутку двох трикутних матриць

$$A = CB,$$

де C нижня трикутна, а B верхня трикутна матриця з діагональними коефіцієнтами, які дорівнюють одиниці. Тоді наша система запишеться у вигляді

$$CBX = D.$$

Якщо позначимо

$$BX = Y, \tag{23}$$

то одержуємо систему

$$CY = D. \tag{24}$$

Розв'язок матричного рівняння (24) є прямим ходом методу Гауса, розв'язок (23) представляє собою зворотний хід.

Коефіцієнти матриць B і C обчислюються послідовно. Спочатку обчислюється перший стовпець матриці C

$$c_{i,1} = a_{i,1}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

потім обчислюється перший рядок матриці B

$$b_{1,i} = \frac{a_{1,i}}{a_{1,1}}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

та елемент

$$y_1 = \frac{d_1}{a_{1,1}}.$$

Потім обчислюється другий стовпець матриці C

$$c_{i,2} = a_{i,2} - c_{i,1}b_{1,2}, \quad i = 2, 3, \dots, n,$$

другий рядок матриці B

$$b_{2,i} = \frac{a_{2,i} - c_{2,1}b_{1,i}}{c_{2,2}}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

та елемент

$$y_2 = \frac{d_2 - c_{2,1}y_1}{c_{2,2}},$$

і так далі.

Алгоритм зручно записати у вигляді таблиці. Наприклад, для $n = 5$:

I	III	V	VII	IX		
$c_{1,1}$	$b_{1,2}$	$b_{1,3}$	$b_{1,4}$	$b_{1,5}$	y_1	II
$c_{2,1}$	$c_{2,2}$	$b_{2,3}$	$b_{2,4}$	$b_{2,5}$	y_2	IV
$c_{3,1}$	$c_{3,2}$	$c_{3,3}$	$b_{3,4}$	$b_{3,5}$	y_3	VI
$c_{4,1}$	$c_{4,2}$	$c_{4,3}$	$c_{4,4}$	$b_{4,5}$	y_4	VIII
$c_{5,1}$	$c_{5,2}$	$c_{5,3}$	$c_{5,4}$	$c_{5,5}$	y_5	X
x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	-	XI

Послідовність обчислення елементів позначена римськими цифрами. Для визначення $c_{i,j}$ потрібно помножити елемент таблиці $c_{i,k}$ який стоїть ліворуч від $c_{i,i}$ у рядку i на відповідний елемент $b_{k,j}$, розташований зверху від $c_{i,i}$ у стовпці j , і отримані результати скласти. Наприклад, для обчислення $c_{4,4}$ визначимо

$$c'_{4,4} = c_{4,1}b_{1,4} + c_{4,2}b_{2,4} + c_{4,3}b_{3,4}$$

і

$$c_{4,4} = a_{4,4} - c'_{4,4}.$$

Для обчислення елементів матриці B аналогічний результат ділять на $c_{i,i}$, так, наприклад, одержуємо

$$b'_{4,5} = c_{4,1}b_{1,5} + c_{4,2}b_{2,5} + c_{4,3}b_{3,5}$$

та

$$c_{4,4} = \frac{a_{4,5} - b'_{4,5}}{c_{4,4}}.$$

У такий же спосіб маємо

$$y'_4 = c_{4,1}y_1 + c_{4,2}y_2 + c_{4,3}y_3$$

та

$$y_4 = \frac{d_4 - y'_4}{c_{4,4}}.$$

Зворотний хід здійснюється в такий спосіб:

$$x_5 = y_5.$$

Для визначення x_4 перемножимо четвертий рядок B на вектор X і віднімемо від y_4 :

$$x_4 = y_4 - x_5b_{4,5},$$

$$x'_3 = x_5b_{3,5} + x_4b_{3,4}, \quad x_3 = y_3 - x'_3.$$

Запишемо формалізацію алгоритму.

Прямий хід:

$$b_{i,i} = 1; \quad y_1 = \frac{d_1}{a_{1,1}},$$

$$b_{1,i} = \frac{a_{1,i}}{a_{1,1}}, \quad c_{i,1} = a_{i,1}, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

$$c_{k,i} = a_{k,i} - \sum_{j=1}^{i-1} c_{k,j}b_{j,i}, \quad k = i, \dots, n, \quad i = 2, \dots, n;$$

$$b_{i,k} = \frac{1}{c_{i,i}} \left(a_{i,k} - \sum_{j=1}^{i-1} c_{i,j} b_{j,k} \right), \quad k = i + 1, \dots, n, \quad i = 2, \dots, n;$$

$$y_i = \frac{1}{c_{i,i}} \left(d_i - \sum_{j=1}^{i-1} c_{i,j} y_j \right), \quad k = i + 1, \dots, n.$$

Зворотний хід:

$$x_n = y_n,$$

$$x_{n-i} = y_{n-i} - \sum_{j=n-i+1}^n b_{n-i,j} x_j, \quad i = 1, \dots, n-1.$$

2.4 Метод прогону.

При розв'язанні досить різних задач (метод різницевих схем, визначення коефіцієнтів сплайнів та інше) виникає необхідність розв'язку систем рівнянь із матрицею, яка має велику кількість нулів. Як правило, такі матриці мають стрічкову або блокову структуру. У даному параграфі ми розглянемо один спеціальний метод розв'язку систем з матрицями стрічкової структури. Матрицю A називають $2q + 1$ -діагональною, або такою, що має стрічкову структуру, якщо $a_{i,j} = 0$ при $|i - j| > q$. При цьому число $2q + 1$ називають шириною стрічки.

Проілюструємо цей метод на прикладі системи

$$AX = D \tag{25}$$

з тридіагональною матрицею вигляду

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_4 & a_4 & b_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & c_n & a_n \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Нехай

$$|a_i| - |c_i| - |b_i| > 0$$

для всіх i . Такі матриці називаються стрічковими матрицями з діагональною перевагою (тобто провідні коефіцієнти стоять на головній діагоналі).

Як видно зі зворотного ходу методу Гауса, розв'язок системи шукається у вигляді

$$x_i = v_i x_{i+1} + u_i \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \tag{27}$$

отже,

$$x_{i-1} = v_{i-1} x_i + u_{i-1}.$$

Використовуючи цю рівність в i -му рівнянні

$$c_i x_{i-1} + a_i x_i + b_i x_{i+1} = d_i,$$

одержуємо

$$c_i (v_{i-1} x_i + u_{i-1}) + a_i x_i + b_i x_{i+1} = d_i,$$

тобто

$$(c_i v_{i-1} + a_i)x_i + b_i x_{i+1} = d_i - c_i u_{i-1}.$$

Таким чином, використовуючи співвідношення (27), одержуємо рекурентні формули для прогоночних коефіцієнтів u_i, v_i (прямий прогін):

$$v_0 = u_0 = 0,$$

$$v_i = -\frac{b_i}{a_i + c_i v_{i-1}}, \quad u_i = \frac{d_i - c_i u_{i-1}}{a_i + c_i v_{i-1}} \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Очевидно, що $x_n = u_n$. Звідси і зі зворотного ходу (27) відразу одержуємо розв'язок системи.

Якщо система не має діагональної переваги, то загалом кажучи, викладений метод прогону не коректний, тому що не виключена можливість обернення до нуля знаменників $a_i + c_i v_{i-1}$, приміром, якщо $a_1 = 0$.

2.5 Метод немонотонного прогону.

Перший етап алгоритму складається з перетворення системи (25) з тридіагональною матрицею до двудиагонального вигляду.

Нехай $(i-1)$ - розв'язок системи зведений до вигляду

$$s_{i-1}x_{i-1} + v_{i-1}x_i = u_{i-1}. \quad (28)$$

Якщо $s_{i-1} \neq 0$, то підсумовуючи співвідношення (28) та i -те рівняння системи помножені на $-c_i$ і s_{i-1} , відповідно, одержуємо

$$\tilde{s}_i x_i + \tilde{v}_i x_{i+1} = \tilde{u}_i,$$

де

$$\tilde{s}_i = a_i s_{i-1} - c_i v_{i-1}, \quad \tilde{v}_i = b_i s_{i-1}, \quad \tilde{u}_i = d_i s_{i-1} - c_i u_{i-1}. \quad (29)$$

Тим самим невідоме x_{i-1} виключено з i -го рівняння.

Далі запишемо

$$s_i = \frac{\tilde{s}_i}{q_i}, \quad v_i = \frac{\tilde{v}_i}{q_i}, \quad u_i = \frac{\tilde{u}_i}{q_i}, \quad q_i = \max\{|\tilde{s}_i|, |\tilde{v}_i|, |\tilde{u}_i|\}. \quad (30)$$

Якщо $s_{i-1} = 0$, то даним перетворенням не можна виключити x_{i-1} . Виконання двох останніх операцій дає

$$s_i = -v_{i-1}, v_i = 0, u_i = -u_{i-1}$$

і відповідає заміні i -го рівняння системи рівнянням (28) з точністю до множника.

У цілому перший етап полягає в наступному: нехай $s_0 = 1, v_0 = u_0 = 0$, тоді згідно формул (29) – (30) обчислюємо $s_i, v_i, u_i, i = 1, 2, \dots, n$. У результаті маємо рівняння

$$s_i x_i + v_i x_{i+1} = u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (31)$$

$$s_n x_n = u_n.$$

Якщо система не вироджена, то перетворення до вигляду (31) можливе. Це витікає з того факту, що у формулах (30) \tilde{s}_i і \tilde{v}_i не можуть одночасно обернутися в нуль,

тому що це означає лінійну залежність перших i рядків матриці, тобто виродженість системи.

Другий етап алгоритму полягає у виконанні аналогічних побудов, але починаючи з останнього рівняння системи. У результаті одержуємо

$$s_i^* x_{i-1} + v_i^* x_i = u_i^*, \quad i = 2, \dots, n, \quad (32)$$

де коефіцієнти s_i^* , v_i^* , u_i^* обчислюються згідно формул

$$\begin{aligned} s_{n+1}^* &= u_{n+1}^* = 0, & v_{n+1}^* &= 1, \\ \tilde{s}_i^* &= c_i v_{i+1}^*, & \tilde{v}_i^* &= a_i v_{i+1}^* - b_i s_{i+1}^*, & \tilde{u}_i^* &= d_i v_{i+1}^* - b_i u_{i+1}^*, \\ s_i^* &= \frac{\tilde{s}_i^*}{q_i^*}, & v_i^* &= \frac{\tilde{v}_i^*}{q_i^*}, & u_i^* &= \frac{\tilde{u}_i^*}{q_i^*}, & q_i &= \max\{|\tilde{s}_i^*|, |\tilde{v}_i^*|, |\tilde{u}_i^*|\}. \end{aligned}$$

Третій етап алгоритму. У результаті виконання перших двох етапів одержуємо набір систем лінійних рівнянь

$$\begin{cases} s_i x_i + v_i x_{i+1} = u_i, \\ s_{i+1}^* x_i + v_{i+1}^* x_{i+1} = u_{i+1}^*, \end{cases} \quad i = 1, 3, 5, \dots, 2 \left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor + 1.$$

При непарному n остання система складається з одного рівняння

$$s_n x_n = u_n.$$

Кожна із цих систем не вироджена, тому що рівняння цих систем отримані у результаті лінійних комбінацій рівнянь первинної системи.

Алгоритм стійкий по відношенню до обчислювальних похибок через нормування прогоночних коефіцієнтів (всі вони не більші одиниці).

2.6 Розв'язок систем лінійних рівнянь методом простої ітерації.

Найпростішим ітераційним методом розв'язку систем лінійних рівнянь є метод простої ітерації. У цьому методі система рівнянь

$$AX = D$$

перетворюється до вигляду

$$X = BX + E, \quad (33)$$

де

$$\begin{aligned} B &= (b_{i,j})_{i,j=1}^n; \\ b_{i,i} &= 0, & b_{i,j} &= -\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}}, & i, j &= 1, \dots, n, \\ e_i &= \frac{d_i}{a_{i,i}}. \end{aligned}$$

Запишемо ітераційний процес

$$X^{k+1} = BX^k + E, \quad k = 0, 1, \dots \quad (34)$$

При використанні ітераційних методів для будь-якого початкового наближення X^0 важливо знати, чи буде метод збігатися.

Щоб відповісти на це питання, нагадаємо деякі поняття.
Якщо в просторі векторів

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

уведено норму $\|x\|$, тоді погоджену з нею нормою в просторі матриць A будемо називати норму

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|AX\|}{\|X\|}.$$

Для найпоширеніших норм векторів

$$\|X\|_1 = \max_{i=1, \dots, n} \|x_i\|$$

та

$$\|X\|_2 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

погодженими нормами матриць будуть

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\nu=1}^n |a_{i,\nu}|,$$

$$\|A\|_2 = \max_{1 \leq \nu \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{i,\nu}|.$$

Теорема 6 (Теорема про достатні умови збіжності методу простої ітерації).
Якщо $\|B\| < 1$, то відповідна система рівнянь має єдиний розв'язок і метод простої ітерації збігається до розв'язків зі швидкістю геометричної прогресії.

Доведення. Застосовуючи до матричного рівняння (33) нерівність трикутника, одержуємо

$$\|X\| \leq \|B\| \|X\| + \|E\|,$$

звідси

$$\|X\| (1 - \|B\|) \leq \|E\|$$

або

$$\|X\| \leq (1 - \|B\|)^{-1} \|E\|.$$

Таким чином, норма $\|X\|$ обмежена, і, отже, система має єдиний розв'язок. Позначимо його через X^* . Нехай

$$\varepsilon^k = X^k - X^*.$$

Віднімаючи з (34) співвідношення (33), одержуємо

$$\varepsilon^{k+1} = B\varepsilon^k.$$

Оскільки

$$\varepsilon^1 = B\varepsilon^0, \quad \varepsilon^2 = B\varepsilon^1 = B^2\varepsilon^0,$$

то неважко бачити, що

$$\varepsilon^k = B^k \varepsilon^0.$$

Звідси та з нерівності трикутника, маємо

$$\|\varepsilon^k\| \leq \|B^k\| \|\varepsilon^0\| = \|B\|^k \|\varepsilon^0\|. \quad (35)$$

Таким чином, за умовою теореми $\|B\| < 1$, при $k \rightarrow \infty$

$$\|\varepsilon^k\| \rightarrow 0.$$

Теорема доведена.

Для визначення числа ітерацій, необхідних для визначення розв'язку з достатньою точністю δ , будемо використовувати співвідношення (35):

$$\|X^K - X^*\| \leq \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|X^1 - X^0\|.$$

Вибираючи в якості початкового наближення праву частину (33), дістаємо

$$\|X^K - X^*\| \leq \frac{\|B\|^{k+1}}{1 - \|B\|} \|E\|. \quad (36)$$

2.6.1 Розв'язок функціональних рівнянь методом простої ітерації.

Розв'язок задач оптимізації, будь то оптимізація виробничих або економічних процесів, конструкцій, або алгоритмів в математичному формулюванні зводиться до пошуку екстремуму. Задача мінімізації великого числа змінних виникає також у випадку застосування варіаційних методів розв'язання задач математичної фізики, крайових задач і інших розділів прикладної математики.

Існує багато методів розв'язку задач на екстремум, але немає єдиного, універсального способу, що дозволяє вирішити будь-яку задачу. На практиці при розв'язанні конкретної задачі потрібно займатися "доведенням" того або іншого методу стосовно до розв'язуваної задачі.

Розглянемо векторне рівняння

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0,$$

тобто

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

і перетворимо його до вигляду

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}).$$

Ітераційний процес, який забезпечує розв'язок цієї задачі запишемо у вигляді

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (37)$$

З'ясуємо умови, при яких метод простої ітерації збігається.

Нехай $\|f - g\|$ – відстань між f і g . Якщо при деякому $0 < q < 1$ відображення $f(x)$ задовольняє умові

$$\|f(x_1) - f(x_2)\| \leq q \|x_2 - x_1\|,$$

то таке відображення називають стискаючим.

Теорема 7 Якщо відображення $y = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ стискаюче, то рівняння $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ має розв'язок \mathbf{X} і

$$\|\mathbf{X} - \mathbf{x}^m\| \leq \frac{q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|}{1 - q}.$$

Доведення. Із співвідношення (37) маємо

$$\|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^m\| = \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{m+1}) - \mathbf{g}(\mathbf{x}^m)\| \leq q \|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^{m-1}\| \leq q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|.$$

Тоді при $k > m$ одержуємо ланцюжок нерівностей

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^m\| &\leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\| + \dots + \|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{x}^m\| \leq \\ &\leq q^{k-1} \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\| + \dots + q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\| \leq q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\| \sum_{i=0}^{\infty} q^i = \frac{q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|}{1 - q}. \end{aligned}$$

Відповідно до критерію Коші послідовність \mathbf{x}^m має скінченну границю \mathbf{X} . Тому, переходячи до границі при $k \rightarrow \infty$, одержуємо

$$\|\mathbf{X} - \mathbf{x}^m\| \leq \frac{q^m \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|}{1 - q}.$$

Крім того,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{X} - \mathbf{g}(\mathbf{X})\| &\leq \|\mathbf{X} - \mathbf{x}^{m+1}\| + \|\mathbf{x}^{m+1} - \mathbf{g}(\mathbf{X})\| = \\ &= \|\mathbf{X} - \mathbf{x}^{m+1}\| + \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{m+1}) - \mathbf{g}(\mathbf{X})\| \leq \|\mathbf{X} - \mathbf{x}^{m+1}\| + q \|\mathbf{x}^m - \mathbf{X}\| \leq 2 \frac{q^{m+1} \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|}{1 - q}. \end{aligned}$$

Оскільки m довільне, то $\|\mathbf{X} - \mathbf{g}(\mathbf{X})\| = 0$, тобто $\mathbf{X} = \mathbf{g}(\mathbf{X})$.

Теорема доведена.

2.7 Метод Зейделя.

Відмінність ітераційного методу Зейделя від методу простої ітерації складається в тому, що на $(k + 1)$ -му кроці ітерації при обчисленні i -ї компоненти вектора X^k використовуються значення

$$x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{i-1}^{k+1},$$

обчислені на цьому кроці.

Ітераційний процес Зейделя в матричному уявленні має вигляд

$$X^{k+1} = LX^{k+1} + MX^k + E,$$

де

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_{2,1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_{3,1} & b_{3,2} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ b_{n,1} & b_{n,2} & \dots & b_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$M = \begin{pmatrix} 0 & b_{1,2} & b_{1,3} & \dots & b_{1,n-1} & b_{1,n} \\ 0 & 0 & b_{2,3} & \dots & b_{2,n-1} & b_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

або, що те ж,

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \sum_{\nu=2}^n b_{1,\nu} x_\nu^k + e_1, \\ x_2^{k+1} = b_{2,1} x_1^{k+1} + \sum_{\nu=3}^n b_{2,\nu} x_\nu^k + e_2, \\ \dots \\ x_n^{k+1} = \sum_{\nu=1}^{n-1} b_{n,\nu} x_\nu^{k+1} + e_n. \end{cases}$$

Області збіжності методу простої ітерації та методу Зейделя різні, у наслідок чого може виникнути така ситуація, що для деякої конкретної системи метод Зейделя не збігається, а метод простої ітерації збігається або навпаки.

Теорема 8 (Теорема про достатню умову збіжності методу Зейделя.) *Якщо при всіх значеннях виконується умова*

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{i,j}| \leq q |a_{i,i}|, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad q < 1,$$

то

$$\|X^{k+1} - X^*\|_1 \leq q \|X^k - X^*\|_1.$$

Для визначення числа ітерацій можна використовувати нерівність (36).

Дана теорема доводиться аналогічно попередній теоремі.

3 Обчислення різниць.

Надалі ми будемо часто використовувати центральні різниці і їхні властивості.

Нехай заданий набір чисел f_0, f_1, \dots, f_n . Їх перші різниці визначаються в такий спосіб

$$\Delta f_{1/2} = f_1 - f_0, \quad \Delta f_{3/2} = f_2 - f_1, \quad \dots, \quad \Delta f_{n-1/2} = f_n - f_{n-1}.$$

Другі центральні різниці визначаються як різниці від різниць, тобто

$$\begin{aligned} \Delta^2 f_1 &= \Delta f_{3/2} - \Delta f_{1/2}, \quad \Delta^2 f_2 = \Delta f_{5/2} - \Delta f_{3/2}, \dots, \\ \Delta^2 f_{n-1} &= \Delta f_{n-1/2} - \Delta f_{n-3/2}. \end{aligned}$$

Аналогічно визначаються різниці третього порядку

$$\begin{aligned} \Delta^3 f_{3/2} &= \Delta^2 f_2 - \Delta^2 f_1, \quad \Delta^3 f_{5/2} = \Delta^2 f_3 - \Delta^2 f_2, \dots, \\ \Delta^3 f_{n-3/2} &= \Delta^2 f_{n-1} - \Delta^2 f_{n-2}, \end{aligned}$$

і так далі.

Зрозуміло, що

$$\begin{aligned} \Delta^2 f_i &= f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \\ \Delta^3 f_{i-1/2} &= f_{i+1} - 3f_i + 3f_{i-1} - f_{i-2}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \\ \Delta^4 f_i &= f_{i+2} - 4f_{i+1} + 6f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}, \quad i = 2, 3, \dots, n-2, \end{aligned}$$

і так далі.

Коефіцієнти в цих уявленнях є біноміальними коефіцієнтами зі знаками, що чередуються.

При обчисленні різниць зручно користуватися таблицею.
Приведемо приклад такої таблиці.

f_i	$\Delta f_{i+1/2}$	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_{i+1/2}$	$\Delta^4 f_i$	$\Delta^5 f_{i+1/2}$	$\Delta^6 f_i$
714						
	6					
720		2				
	8		-8			
728		-6		27		
	2		19		-80	
730		13		-53		235
	15		-34		155	
745		-21		102		
	-6		68			
739		47				
	41					
740						

Набір даних $f_0, f_1, f_2, \dots, f_n$ будемо називати періодичним, якщо $f_n = f_0$. При цьому ми вважаємо, що для всіх цілих i виконується рівність $f_{n+i} = f_i$.

У цьому випадку для всіх i

$$\Delta^1 f_{i+1/2} = f_{i+1} - f_i,$$

$$\Delta^2 f_i = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = \Delta^1 f_{i+1/2} - \Delta^1 f_{i-1/2},$$

$$\Delta^3 f_{i+1/2} = f_{i+2} - 3f_{i+1} + 3f_i - f_{i-1} = \Delta^2 f_{i+1} - \Delta^2 f_i,$$

і так далі.

Приклад обчислення різниць від періодичних даних наведений у наступній таблиці:

i	f_i	$\Delta f_{i+1/2}$	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_{i+1/2}$	$\Delta^4 f_i$
	26	-3	0	7	8
	23				
0	20	4	7	-7	-14
	24				
1	24	4	0	-2	5
2	28	2	-2	-4	-2
3	30	-4	-6	7	11
4	26	-3	1	-1	-8
5	23	-3	0	7	8
6	20	4	7	-7	-14
	24				
	28	4	0	-2	5

Далі ми вважаємо, що якщо $t_i = a + (b - a)/n$ ($i = 0, 1, \dots$), то

$$f_i = f(t_i), \quad f_i^{(\nu)} = f^{(\nu)}(t_i)$$

і

$$f_{i-1/2} = f((t_i + t_{i-1})/2), \quad f_{i-1/2}^{(\nu)} = f^{(\nu)}((t_i + t_{i-1})/2).$$

Використовуючи формулу Тейлора, отримуємо

$$f_{i+1} = f_i + f'_i h + \frac{f''_i}{2} h^2 + \frac{f'''_i}{6} h^3 + \frac{f_i^{(4)}}{24} h^4 + \frac{f_i^{(5)}}{120} h^5 + \dots,$$

$$f_{i-1} = f_i - f'_i h + \frac{f''_i}{2} h^2 - \frac{f'''_i}{6} h^3 + \frac{f_i^{(4)}}{24} h^4 - \frac{f_i^{(5)}}{120} h^5 + \dots,$$

$$f_{i+2} = f_i + 2f'_i h + 4\frac{f''_i}{2} h^2 + 8\frac{f'''_i}{6} h^3 + 16\frac{f_i^{(4)}}{24} h^4 + 32\frac{f_i^{(5)}}{120} h^5 + \dots,$$

$$f_{i-2} = f_i - 2f'_i h + 4\frac{f''_i}{2} h^2 - 8\frac{f'''_i}{6} h^3 + 16\frac{f_i^{(4)}}{24} h^4 - 32\frac{f_i^{(5)}}{120} h^5 + \dots,$$

і так далі. Таким чином,

$$\begin{aligned} \Delta^2 f_i &= f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = \\ &= f_i + f'_i h + \frac{f''_i}{2} h^2 + \frac{f'''_i}{6} h^3 + \frac{f_i^{(4)}}{24} h^4 + \frac{f_i^{(5)}}{120} h^5 + \dots - 2f_i + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + f_i - f'_i h + \frac{f''_i}{2} h^2 - \frac{f'''_i}{6} h^3 + \frac{f^{(4)}_i}{24} h^4 - \frac{f^{(5)}_i}{120} h^5 + \dots = \\
& = f''_i h^2 + \frac{f^{(4)}_i}{12} h^4 + \frac{f^{(6)}_i}{360} h^6 + \dots,
\end{aligned}$$

тобто

$$\Delta^2 f_i = f''_i h^2 + o(h^2),$$

якщо $f \in C^2$,

$$\Delta^2 f_i = f''_i h^2 + \frac{1}{12} f^{(4)}_i h^4 + o(h^4), \quad (38)$$

якщо $f \in C^4$,

$$\Delta^2 f_i = f''_i h^2 + \frac{1}{12} f^{(4)}_i h^4 + \frac{1}{360} f^{(6)}_i h^6 + o(h^6),$$

якщо $f \in C^6$, і так далі.

Із цих рівностей маємо, що

$$\Delta^4 f_i = \Delta^2 f''_i h^2 + o(h^4) = f^{(4)}_i h^4 + o(h^4),$$

якщо $f \in C^4$,

$$\Delta^4 f_i = f^{(4)}_i h^4 + \frac{1}{6} f^{(6)}_i h^6 + o(h^6),$$

якщо $f \in C^6$ і так далі.

3.1 Різниці і факторіальні поліноми.

Розглянемо функцію на дискретній множині рівновіддалених точок

$$f(a), f(a+h), f(a+2h), \dots, f(a+(n-1)h).$$

Визначимо різницевий оператор рівністю

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x).$$

Різницевий оператор є лінійним, як і оператори диференціювання та інтегрування

$$\Delta(af(x) + bg(x)) = a\Delta f(x) + b\Delta g(x).$$

Наведемо деякі властивості різницевого оператора

$$\Delta(f(x)g(x)) = f(x)\Delta g(x) + g(x+h)\Delta f(x),$$

$$\Delta \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{g(x)\Delta f(x) - f(x)\Delta g(x)}{g(x)g(x+h)},$$

крім того,

$$\Delta \sin(ax + b) = 2 \sin \frac{ah}{2} \cos \left(a \left(x + \frac{h}{2} \right) + b \right),$$

$$\Delta \cos(ax + b) = -2 \sin \frac{ah}{2} \sin \left(a \left(x + \frac{h}{2} \right) + b \right),$$

$$\Delta a^x = a^x(a^h - 1),$$

$$\Delta \ln x = \ln \left(1 + \frac{h}{x}\right).$$

Роль, яку грає число e у диференціальному численні, для обчислення кінцевих різниць грає число 2, зокрема, якщо $a = 2$ і $h = 1$, то $\Delta 2^x = 2^x$.

Позначимо

$$\Delta^r = \Delta \left(\Delta^{r-1} f(x)\right).$$

Теорема 9 (Основна теорема обчислення різниць). *Якщо*

$$y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (a_n \neq 0),$$

то

$$\Delta^n y(x) = a_n n! h^n$$

та

$$\Delta^{n+1} y(x) = 0.$$

Для доведення теореми наведемо одне допоміжне твердження:

Лема 1 *Якщо*

$$y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (a_n \neq 0),$$

то $\Delta y(x)$ є поліномом степеня $n-1$.

Використовуючи біном Ньютона, відразу дістаємо

$$\begin{aligned} \Delta y(x) &= (x+h)^n - x^n = \sum_{k=0}^n C_n^k h^{n-k} x^k - x^n = \\ &= nhx^{n-1} + \frac{n(n-1)h^2}{2} x^{n-2} + \dots + h^n. \end{aligned}$$

Таким чином, одержуємо алгебраїчний многочлен степеня $n-1$ зі старшим коефіцієнтом nh . Використовуючи властивість лінійності, одержуємо, що різницевий оператор зменшує степінь кожної складової $y(x)$ на одиницю.

Застосувавши до многочлена n -го степеня n раз лему, одержимо твердження теореми.

В математичному аналізі важливу роль грають ряди по степеневим функціям (ряди Тейлора):

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k,$$

при цьому провідна роль степеневій функції визначена насамперед тим, що степенева функція має наступну властивість

$$\frac{d}{dx} x^n = nx^{n-1} \quad (n \geq 1).$$

Природним аналогом у обчисленні різниць є система функцій $g_n(x)$ з властивістю

$$\Delta g_n(x) = ng_{n-1}(x) \quad (n \geq 1).$$

Цією властивістю володіють факторіальні многочлени

$$g_n(x) = x^{[n]} = x(x-1)(x-2)\dots(x-n+1) \quad (n \geq 1),$$

$$g_0(x) = x^{[0]} = 1.$$

Нехай функція $f(x)$ може бути розкладена по факторіальних многочленах (аналогічно розкладу Тейлора)

$$f(x) = b_0 + b_1x + b_2x^{[2]} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} b_k x^{[k]}. \quad (39)$$

Припустимо, що різницевий оператор є лінійним для нескінченних сум і що його можна застосовувати послідовно.

З співвідношення (39) при $x = 0$ відразу одержуємо

$$f(0) = b_0.$$

Застосовуючи оператор Δ до обох частин (39), одержуємо

$$\Delta f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k k x^{[k-1]}.$$

При $x = 0$ відразу маємо

$$\Delta f(0) = b_1.$$

Аналогічно,

$$\Delta^n f(x) = \sum_{k=n}^{\infty} b_k k(k-1)\dots(k-n+1)x^{[k-n]}$$

та при $x = 0$

$$\Delta^n f(0) = n! b_n.$$

Звідси відразу одержуємо формальний аналог формули Тейлора

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Delta^k f(0)}{k!} x^{[k]} = \sum_{k=0}^{\infty} C_x^k \Delta^k f(0).$$

Якщо $f(x)$ є поліномом степеня n , то

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\Delta^k f(0)}{k!} x^{[k]} \quad (40)$$

отримуємо інтерполяційну формулу Ньютона.

Із визначення факторіальних многочленів маємо

$$x^{[n]} = x^{[m]}(x-m)^{[n-m]}.$$

Таким чином,

$$x^{[0]} = 1 = x^{[m]}(x-m)^{[-m]},$$

або, що те ж саме,

$$y^{[-m]} = \frac{1}{(y+m)^{[m]}} = \frac{1}{(y+m)(y+m-1)\dots(y+1)}.$$

Зауважимо, що при $m \neq 0$

$$x^{[m]}x^{[-m]} \neq x^{[0]}.$$

Для розкладання даного многочлена в суму по факторіальним многочленам потрібно даний многочлен послідовно поділити на x , частку поділити на $(x - 1)$, далі, на $(x - 2)$, і так далі. Останки від ділення і є коефіцієнтами при факторіальних многочленах.

Розкладання даного многочлена в суму по факторіальним многочленам наведемо на прикладі.

Нехай $P(x) = x^4 + 6x^2 - 7x + 8$, тоді

$$\begin{aligned} P(x) &= ([1(x - 3) + 6](x - 2) + 13(x - 1) + 0)x + 8 = \\ &= x^{[4]} + 6x^{[3]} + 13x^{[2]} + 0x^{[1]} + 8. \end{aligned}$$

3.2 Числа Стірлінга

Зважаючи на важливість степеневих функцій у диференціальному численні, а факторіальних в різницевому численні, було б добре знайти співвідношення між ними. І ці співвідношення існують. Так

$$x^{[n]} = \sum_{k=0}^n S(n, k)x^k. \quad (41)$$

Коефіцієнти $S(n, k)$ називаються числами Стірлінга першого роду.

Нехай $n = 1$, тоді

$$x^{[1]} = x = S(1, 0) + S(1, 1)x,$$

де $S(1, 0) = 0$, $S(1, 1) = 1$.

Нехай $n = 2$, тоді

$$x^{[2]} = x(x - 1) = x^2 - x = S(2, 0) + S(2, 1)x + S(2, 2)x^2,$$

звідки, $S(2, 0) = 0$, $S(2, 1) = -1$, $S(2, 2) = 1$.

Використавши в рекурентному співвідношенні

$$x^{[n+1]} = (x - n)x^{[n]}$$

рівність (41), одержуємо

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n+1} S(n+1, k)x^k &= (x - n) \sum_{k=1}^n S(n, k)x^k = \\ &= \sum_{k=1}^n (S(n, k-1) - nS(n, k))x^k + S(n, n)x^{n+1} - nS(n, 0). \end{aligned} \quad (42)$$

Зауважимо, що при $n > 0$

$$S(n, n) = 1$$

і

$$S(n, 0) = 0.$$

Прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях x в лівій і правій частинах, одержуємо

$$S(n+1, k) = S(n, k-1) - nS(n, k) \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

Числа Стірлінга другого роду $\varphi(n, k)$ дозволяють знайти степеневу функцію через факторіальні многочлени

$$x^n = \sum_{k=0}^n \varphi(n, k)x^{[k]}. \quad (43)$$

Нехай $n = 1$, тоді

$$x = \varphi(1, 0) + \varphi(1, 1)x,$$

де $\varphi(1, 0) = 0$, $\varphi(1, 1) = 1$.

Нехай $n = 2$, тоді

$$x^2 = \varphi(2, 0) + \varphi(2, 1)x + \varphi(2, 2)x(x - 1),$$

звідки $\varphi(2, 0) = 0$, $\varphi(2, 1) = 1$, $\varphi(2, 2) = 1$.

У рекурентному співвідношенні

$$x^{n+1} = x x^n$$

з рівності (43), одержуємо

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n+1} \varphi(n+1, k)x^{[k]} &= x \sum_{k=1}^n \varphi(n, k)x^{[k]} = \\ &= \sum_{k=1}^n (\varphi(n, k-1) + k\varphi(n, k))x^{[k]} + \varphi(n, n)x^{[n+1]} - \varphi(n, 0). \end{aligned} \quad (44)$$

Зауважимо, що при $n > 0$

$$\varphi(n, n) = 1$$

і

$$\varphi(n, 0) = 0.$$

Прирівняємо коефіцієнти при подібних факторіальних многочленах в лівій і правій частинах, в результаті чого одержуємо

$$\varphi(n+1, k) = \varphi(n, k-1) + k\varphi(n, k) \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

3.3 Обчислення сум.

Нехай

$$\sum_{x=a}^b f(x) = f(a) + f(a+1) + \dots + f(b),$$

тоді якщо

$$\Delta f(x) = f(x+1) - f(x),$$

то

$$\sum_{x=a}^{b-1} \Delta f(x) = f(b) - f(a), \quad (45)$$

що є аналогом формули Ньютона-Лейбніца.

Теорема 10 (Основна теорема обчислення сум). *Якщо дві функції дані на дискретній множині точок і мають ті ж самі перші різниці, то вони відрізняються один від одного не більш ніж постійним доданком.*

З рівності

$$\Delta x^{[n]} = nx^{[n-1]}$$

і рівності (45) одержуємо при $n \neq -1$

$$\sum_{x=a}^{b-1} x^{[n]} = \frac{b^{[n+1]} - a^{[n+1]}}{n+1}. \quad (46)$$

Нехай $n = 0$, тоді одержимо

$$\sum_{x=a}^{b-1} x^{[0]} = \frac{b^{[1]} - a^{[1]}}{1} = b - a.$$

Використовуючи формулу (46) і лінійність оператора підсумовування, можна знаходити суми многочленів шляхом перетворення x^n у факторіальні многочлени або за допомогою чисел Стірлінга другого роду, або використовуючи ділення многочленів.

Можна показати, що

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^n x &= \sum_{x=1}^n x^{[1]} = \frac{n(n+1)}{2}, \\ \sum_{x=1}^n x^2 &= \sum_{x=1}^n (x^{[2]} + x^{[1]}) = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}, \\ \sum_{x=1}^n x^3 &= \sum_{x=1}^n (x^{[3]} + 3x^{[2]} + x^{[1]}) = \frac{n^2(n+1)^2}{4}. \end{aligned}$$

Формула підсумовування для $x^{[n]}$ вірна і для від'ємних показників ($n \neq -1$), наприклад,

$$\sum_{x=1}^n \frac{1}{x(x+1)} = \sum_{x=1}^n (x-1)^{[-2]} = \frac{n^{[-1]} - 0^{[-1]}}{-1} = -\frac{1}{n+1} + \frac{1}{1} = \frac{n}{n+1}.$$

Аналогічно,

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^n \frac{1}{x(x+1)(x+2)} &= \sum_{x=1}^n (x-1)^{[-3]} = \frac{n^{[-2]} - 0^{[-2]}}{-2} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1 \cdot 2} - \frac{1}{(n+1)(n+2)} \right). \end{aligned}$$

Різницева формула

$$\Delta a^x = (a-1)a^x$$

приводить до геометричної прогресії

$$\sum_{x=1}^n a^x = \frac{a^{n+1} - 1}{a - 1}.$$

Формули для різниць синуса і косинуса приводять до формул

$$\sum_{x=0}^n \sin(ax + b) = \frac{\sin \frac{a(n+1)}{2} \sin \left(\frac{an}{2} + b \right)}{\sin \frac{a}{2}},$$

$$\sum_{x=0}^n \cos(ax + b) = \frac{\sin \frac{a(n+1)}{2} \cos \left(\frac{an}{2} + b \right)}{\sin \frac{a}{2}}.$$

В обчисленні сум є метод аналогічний методу інтегрування частинами.
Із формули для різниці добутків

$$\Delta uv = u\Delta v + v(x+1)\Delta u$$

підсумовуванням одержуємо

$$\sum_{x=0}^{n-1} u\Delta v = u(n)v(n) - u(0)v(0) - \sum_{x=0}^{n-1} v(x-1)\Delta u(x).$$

Наведемо один приклад

$$\begin{aligned} \sum_{x=0}^{n-1} xa^x &= \left. \frac{xa^x}{a-1} \right|_0^n - \sum_{x=0}^{n-1} \frac{a^{x+1}}{a-1} 1 = \frac{na^n}{a-1} - \frac{a^{n+1}}{(a-1)^2} \Big|_0^n = \\ &= \frac{a}{(1-a)^2} [(n-1)a^n - na^{n-1} + 1]. \end{aligned}$$

Розглянуті методи підсумовування спираються на рівність (46) вірну при $n \neq -1$.
У диференціальному численні це аналогічно співвідношенню

$$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C,$$

дійсному при $n \neq -1$. При $n = -1$ має місце інша рівність

$$\int x^{-1} dx = \ln |x| + C.$$

Щось подібне має місце і у різницево-численні.
Дігамма-функцією позначимо функцію вигляду

$$F(x) = \sum_{n=1}^x \frac{1}{n} - \gamma,$$

де $\gamma = 0.5772156649\dots$ - константа Ейлера.

Отже, $F(0) = -\gamma$. Ця формула вірна для цілих x . Запис

$$F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x}{n(n+x)} - \gamma, \quad F(0) = -\gamma$$

дозволяє поширити це визначення на всі нецілі значення. Для доказу досить встановити рівність

$$\Delta F(x) = \frac{1}{x+1}.$$

Між дігамма-функцією і натуральним логарифмом існує зв'язок

$$F(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\ln(x+n+1) - \frac{1}{x+1} - \frac{1}{x+2} - \dots - \frac{1}{x+n} \right).$$

Зрозуміло, що

$$F'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n+x)^2},$$
$$F''(x) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n+x)^3},$$

і так далі.

4 Наближення функцій.

4.1 Інтерполяційний поліном Лагранжа.

Нехай дана система точок

$$(x_i, y_i) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n)$$

і потрібно відновити функцію, що проходить через дану систему точок.

Насамперед відзначимо найбільш відомий класичний апарат наближення – інтерполяційний поліном Лагранжа. Під цим терміном будемо мати на увазі алгебраїчний поліном $L_n(x)$ степеня n , що проходить через дану систему точок:

$$L_n(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n).$$

Легко переконатися в тому, що він має вигляд

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) y_i,$$

де

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}.$$

Якщо ж

$$x_i = a + i * h \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n),$$
$$h = \frac{b - a}{n},$$

то його можна записати у вигляді

$$L_n(x) = y_0 + (x - a) \frac{\Delta y_0}{h} + (x - a)(x + h - a) \frac{\Delta^2 y_0}{2! h^2} +$$
$$+ (x - a)(x + h - a)(x + 2h - a) \frac{\Delta^3 y_0}{3! h^3} + \dots +$$
$$+ (x - a)(x + h - a) \dots (x + nh - a) \frac{\Delta^n y_0}{n! h^n},$$

де $\Delta^\nu y_0$ є різниця ν -го порядку.

У цьому випадку поліном називають інтерполяційним поліномом Ньютона.

Наведемо деякі апроксимаційні властивості інтерполяційного многочлена Лагранжа.

Зрозуміло, що різниця $y(x) - L_n(x)$ обертається в нуль у точках x_i , отже, можна записати співвідношення

$$y(x) - L_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)f(x),$$

$f(x)$ деяка функція. Отже, для довільного \tilde{x} має місце рівність

$$y(\tilde{x}) - L_n(\tilde{x}) - (\tilde{x} - x_0)(\tilde{x} - x_1) \dots (\tilde{x} - x_n)f(\tilde{x}) = 0.$$

Розглянемо функцію

$$F(x) = y(x) - L_n(x) - (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)f(\tilde{x}).$$

Якщо $y(x)$ має похідну $(n + 1)$ -го порядку, то і над $F(x)$ можна провести операцію диференціювання $n + 1$ раз, що приведе до рівності

$$F^{(n+1)}(x) = y^{(n+1)}(x) - (n + 1)!f(\tilde{x}).$$

Зважаючи на той факт, що $F(x)$ обертається в нуль $n + 2$ рази (у точках x_i і \tilde{x}), то по теоремі про середнє значення, $F'(x)$ обертається в нуль на інтервалі (x_0, x_n) принаймні, $n + 1$ раз. Використовуючи цей факт, отримуємо, що $F^{(n+1)}(x)$ обертається в нуль, хоча б один раз. Таким чином, на даному інтервалі існує значення \hat{x} таке, що

$$y^{(n+1)}(\hat{x}) = (n + 1)!f(\tilde{x}).$$

Звідси відразу одержуємо

$$f(\tilde{x}) = \frac{y^{(n+1)}(\hat{x})}{(n + 1)!}$$

і, отже, похибка наближення функції $y \in C_{[a,b]}^{n+1}$ інтерполяційним многочленом Лагранжа буде мати вигляд:

$$y(x) - L_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{y^{(n+1)}(\hat{x})}{(n + 1)!}$$

і

$$\|y - L_n\|_{C[a,b]} \leq \frac{\|y^{(n+1)}\|_{C[a,b]}}{(n + 1)!} \left\| \prod_{i=0}^n (\cdot - x_i) \right\|_{C[a,b]}, \quad (47)$$

де

$$\|f\|_{C[a,b]} = \max_{x \in [a,b]} |f(x)|.$$

Ця оцінка точна, наприклад, для $y(x) = x^{n+1}$ ця нерівність обертається в рівність. У такий спосіб маємо

$$\sup_{y \in W_{\infty}^{n+1}[a,b]} \|y - L_n\|_{C[a,b]} = \frac{1}{(n + 1)!} \left\| \prod_{i=0}^n (\cdot - x_i) \right\|_{C[a,b]}.$$

Так, зокрема, для інтерполяційного полінома Лагранжа другого степеня (інтерполяційної квадратичної параболи) має місце рівність

$$\sup_{y \in W_{\infty}^3[a,b]} \|y - L_2\|_{C[a,b]} = \frac{1}{3!} \left\| (\cdot - a) \left(\cdot - a - \frac{a+b}{2} \right) (\cdot - b) \right\|_{C[a,b]}.$$

Зробивши заміну, що переводить відрізок $[a, b]$ у відрізок $[-1, 1]$, одержимо

$$\sup_{y \in W_{\infty}^3[a,b]} \|y - L_2\|_{C[a,b]} = \frac{(b-a)^3}{3!2^3} \left\| (1 - (\cdot)^2) \right\|_{C[-1,1]}.$$

Зауважуючи, та те, що

$$\max_{t \in [-1,1]} |t(1-t^2)| = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1 - \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right)^2 \right) \right| = \frac{2\sqrt{3}}{9},$$

одержуємо

$$\sup_{y \in W_{\infty}^3[a,b]} \|y - L_2\|_{C[a,b]} = \frac{(b-a)^3 \sqrt{3}}{216}.$$

Аналогічний результат можна одержати для кубічного многочлена $H_3(x)$, який інтерполює в точках a і b функцію та її похідну (інтерполяційний поліном Ерміта). Не зупиняючись докладно, відзначимо, що для відрізка $[-1, 1]$ цей поліном має вигляд

$$\begin{aligned} H_3(x) &= \frac{y-1}{4}(1-x)^2(2+x) + \frac{y_1}{4}(1+x)^2(2-x) + \\ &+ \frac{y'-1}{4}(1-x)^2(1+x) - \frac{y'_1}{4}(1+x)^2(1-x), \end{aligned} \quad (48)$$

і

$$\|y - H_3\|_{C[a,b]} = \frac{(b-a)^4}{384} |y^{(4)}(\xi)|,$$

звідки маємо рівність

$$\sup_{y \in W_{\infty}^4[a,b]} \|y - H_3\|_{C[a,b]} = \frac{(b-a)^4}{384}.$$

Співвідношення (47) дозволяє відповісти на питання, як розпорядитися вузлами інтерполяції полінома Лагранжа, щоб зменшити похибку наближення. Відповідь тривіальна - вузли x_i варто вибрати так, щоб величина

$$\left\| \prod_{i=0}^n (\cdot - x_i) \right\|_{C[a,b]}$$

була мінімальною.

Для проміжку $[-1, 1]$ розв'язок цієї задачі дає відома теорема Чебишева про альтернанс, згідно якої, серед всіх алгебраїчних поліномів степеня n зі старшим коефіцієнтом рівним одиниці, найменш відхиляється від нуля поліном

$$T_n(x) = \frac{1}{2^n} \cos(n \arccos x). \quad (49)$$

Звідси легко визначаються точки, в яких поліном Чебишева обертається в ноль

$$x_i = \cos \frac{2i-1}{2n} \pi, \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Зауваження. Графічно нулі полінома Чебишева можна побудувати в такий спосіб: розділимо півколо, яке спирається на відрізок $[-1, 1]$ як на діаметр, на n рівних частин і спроектуємо їхні кінці на діаметр. Отримані проєкції і є нулями полінома Чебишева.

Покажемо, що (49) дійсно алгебраїчний многочлен.

Дійсно, виберемо в рівності

$$\cos(n+1)t + \cos(n-1)t = 2 \cos nt \cos t$$

у якості t величину $\arccos x$, тоді одержимо

$$2^n T_{n+1}(x) + 2^{n-2} T_{n-1}(x) = 2^n T_n(x)x,$$

тобто

$$T_{n+1}(x) = T_n(x)x - \frac{1}{4} T_{n-1}(x). \quad (50)$$

З співвідношення (49) відразу маємо

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

Використовуючи рекурентну формулу (50), одержуємо

$$T_2(x) = x^2 - \frac{1}{2}, \quad T_3(x) = x^3 - \frac{3}{4}x,$$

і так далі.

Пафнугій Львович Чебишев довів, що серед всіх алгебраїчних многочленів $P_n(x)$ степеня n зі старшим коефіцієнтом 1 у многочлена

$$\frac{T_n(x)}{2^{n-1}}, \quad T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

точна верхня грань абсолютних значень на інтервалі $(-1, 1)$ найменша і дорівнює 2^{-n+1} .

Таким чином, вибираючи в якості значень x_i^* нулі полінома Чебишева, одержуємо найменшу похибку серед всіх розбивок проміжку:

$$\frac{\|y^{(n+1)}\|_{C[a,b]}}{2^n(n+1)!}.$$

З вигляду похибки відразу одержуємо, що для досить гладких функцій маємо непогану ступінь апроксимації. Крім того,

$$\|y - L_n\|_{C[a,b]} \leq (1 + \|L_n\|) E_n(y),$$

де $E_n(y)$ - найкраще наближення функції $y(x)$ алгебраїчними многочленами і

$$\|L_n\| = 2\pi \ln n + O(1).$$

Таким чином, наближення інтерполяційними многочленами лише в $\ln n$ раз гірше найкращого наближення многочленами того ж порядку. У випадку, якщо функція має, наприклад, 10 похідних, порядок апроксимації буде

$$\frac{\ln n}{n^{10}} \approx \frac{1}{n^{10}},$$

якщо ж функція не досить гладка, то цей логарифм здобуває іншу вагу, що серйозно позначається на похибці наближення.

Найбільший інтерес інтерполяційні многочлени Лагранжа викликають не тільки як апарат опису дискретних даних, а як інструмент для розв'язування самих різноманітних задач. Проілюструє це на деяких прикладах.

4.2 Поповнення даних за межі даного проміжку.

В процесі розв'язку всіляких задач при використанні дискретних даних доводиться зіштовхуватися з тією ситуацією, що потрібно знати значення функції за межами даного проміжку, наприклад, $x_{-1}, x_{-2}, \dots, x_{n+1}, x_{n+2}, \dots$. Для досягнення цієї мети застосовують інтерполяційні поліноми Лагранжа. Наведемо приклад. Нехай дані значення

$$(x_i, y_i), \quad (x_i = a + ih), \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

Обчислимо інтерполяційний многочлен Лагранжа, що проходить через точки x_0, x_1, x_2 :

$$\begin{aligned} \ell_1(y, x) = & \frac{1}{2h^2} (y_0(x - x_1)(x - x_2)) - \frac{1}{h^2} (y_1(x - x_0)(x - x_2)) + \\ & + \frac{1}{2h^2} (y_2(x - x_0)(x - x_1)), \end{aligned}$$

і обчислимо його значення в точці $x_{-1} = a - h$, тим самим одержимо

$$y_{-1} = 3y_0 - 4y_1 + 2y_2$$

та

$$y_{-2} = 6y_0 - 8y_1 + 3y_2.$$

Для іншого кінця проміжку формули будуть мати вигляд:

$$y_{n+1} = 3y_n - 4y_{n-1} + 2y_{n-2}$$

$$y_{n+2} = 6y_n - 8y_{n-1} + 3y_{n-2}.$$

Зауважимо, що в багатьох алгоритмах і програмних реалізаціях використовують алгоритм лінійної екстраполяції, тобто через точки x_0 і x_1 проводять пряму і у якості y_{-1} беруть відповідне значення на цій прямій. Використання цього методу вкрай небажано, тому що використовуючи надалі який-небудь апарат наближення, ми прирікаємо себе на те, що біля кінців проміжку похибка наближення буде не краще $O(h^2)$. Низька точність веде до перекручування остаточного результату, так, у випадку роботи із зображенням, одержуємо графічний образ з розмитими краями.

4.3 Поповнення таблиць даних.

З появою необхідності зберігання великих обсягів інформації виникла потреба в методах компресії (стиску) і декомпресії інформації. Розглянемо наступну задачу – дана таблиця даних

x_0	x_1	\dots	x_i	\dots	x_n
y_0	y_1	\dots	y_i	\dots	y_n

Потрібно збільшити число даних у цій таблиці (поповнити її).

Існує багато різних методів розв'язку цієї проблеми, один із яких полягає в наступному: використовуючи значення таблиці як точки на площині, побудувати який-небудь апроксимуючий апарат (інтерполяційний поліном, сплайн та ін.) і точки, що знімаються з отриманого апарата наближення, брати в якості даних, які поповнюються.

Інший метод зводиться до отримання рекурентної формули, що поповнює значення таблиці у середині між кожною парою даних. Наведемо приклад.

Будемо вважати, що $x_i = a + ih$, тобто дані рівновіддалені.

Через кожні чотири точки $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$ проведемо інтерполяційний поліном Лагранжа

$$L_{3,i}(y, x) = -\frac{1}{6h^3}y_{i-1}(x - x_i)(x - x_{i+1})(x - x_{i+2}) - \\ -\frac{1}{2h^3}y_i(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})(x - x_{i+2}) + \frac{1}{2h^2}y_{i+1}(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+2}) + \\ + \frac{1}{6h^3}y_{i+2}(x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1}),$$

і, в якості поповнюваного значення $y_{i+1/2}$, виберемо

$$y_{i+1/2} = L_{3,i}(y, x_{i+1/2}) = \frac{1}{16}(-y_{i-1} + 9y_i + 9y_{i+1} - y_{i+2}).$$

Після нескладних спрощень одержимо наступну формулу:

$$y_{i+1/2} = \frac{y_i + y_{i+1}}{2} - \frac{1}{8}\Delta^2 \left(\frac{y_i + y_{i+1}}{2} \right). \quad (51)$$

Зрозуміло, що якщо дані визначені на відрізку, то для використання формули (51) потрібні значення x_{-1} і x_{n+1} , які визначаються з результатів попереднього параграфа.

Недоліки інтерполяції по Лагранжу.

Відомий наступний факт: з ростом числа рівновіддалених вузлів максимальне відхилення інтерполяційного многочлена від функції (функція Рунге)

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

не зменшується.

Більше того, з теорії апроксимації відомо, що для кожного n і набору x_i $i = 0, 1, \dots, n$, знайдеться така функція $f(x)$, що

$$\|f - L_n(f)\|_{C[a,b]} \rightarrow \infty$$

при $n \rightarrow \infty$.

4.4 Тригонометричні інтерполяційні поліноми.

У багатьох задачах прогнозування, частотного аналізу та ін. відомо, що дані є періодичними. У цьому випадку використання алгебраїчних многочленів для опису даних

неприродно. Зрозуміло, що при описі періодичних даних варто використовувати періодичні функції. У цьому випадку можна використовувати інтерполяційний тригонометричний поліном. Розіб'ємо період на $2n + 1$ рівних частин. Тригонометричний поліном

$$T_n(x) = a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + \dots + a_n \cos nx + b_n \sin nx$$

степеня n будемо називати інтерполяційним по системі точок x_i, y_i $i = 0, 1, \dots, 2n$, якщо виконуються інтерполяційні умови

$$T_n(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, \dots, 2n).$$

Для визначення коефіцієнтів інтерполяційного многочлена потрібно розв'язати систему рівнянь

$$a_0 + a_1 \cos x_i + b_1 \sin x_i + \dots + a_n \cos nx_i + b_n \sin nx_i = y_i \\ (i = 0, 1, \dots, 2n).$$

Спочатку покажемо, що якщо систему можна розв'язати, то її розв'язок єдиний. В алгебрі відомий той факт, що систему лінійних рівнянь можна розв'язати тоді і тільки тоді, коли відповідна однорідна система має лише тривіальний розв'язок. У нашому випадку це значить, що інтерполяційний поліном існує і єдиний тоді і тільки тоді, коли інтерполяційний поліном, який інтерполює всі нулі, тотожно дорівнює нулю.

Покладемо протилежне, нехай таких поліномів два. Тоді різниця їх буде обертатися до нуля у цих точках. З основної теореми алгебри для тригонометричних поліномів відомо, що будь-який тригонометричний поліном степеня n має рівно $2n$ коренів дійсних та уявних (з урахуванням кратності). А тому, що різниця цих інтерполяційних поліномів є тригонометричний поліном того ж степеня, то ця різниця тотожно дорівнює нулю. Однозначність доведена. Таким чином, якщо ми знайдемо многочлен степеня n , що інтерполює наші дані, то це й буде інтерполяційний тригонометричний поліном.

Розглянемо тригонометричний поліном

$$T_n(y, x) = \sum_{i=0}^{2n} y_i \prod_{j=0, j \neq i}^{2n} \frac{\sin \frac{x-x_j}{2}}{\sin \frac{x_i-x_j}{2}}.$$

Умова інтерполяції доводиться безпосередньою перевіркою твердження. З іншого боку, тому що в знаменнику стоїть стала, то досить показати, що в чисельнику стоять тригонометричні поліноми степеня n . Цей факт відразу витікає з того, що в чисельнику стоїть добуток n тригонометричних многочленів першого порядку.

Для рівновіддалених вузлів формула здобуває набагато простішого вигляду, так, якщо

$$x_i = a + ih, \quad (i = 0, 1, \dots, 2n), \quad h = \frac{2\pi}{2n+1}, \quad a \in \left(0, \frac{2\pi}{2n+1}\right],$$

то

$$T_n(y, x) = \sum_{i=0}^{2n} \frac{y_i}{2n+1} \prod_{j=0, j \neq i}^{2n} \frac{\sin \left((2n+1) \frac{x-x_j}{2} \right)}{\sin \frac{x_i-x_j}{2}}.$$

Апроксимаційні властивості інтерполяційних тригонометричних поліномів багато в чому збігаються із властивостями поліномів Лагранжа.

Так,

$$\|y - T_n(y)\|_{C[0,2\pi]} \leq (1 + \|T_n\|) \tilde{E}_n(y),$$

де $\tilde{E}_n(y)$ - найкраще наближення функції $y(x)$ тригонометричними многочленами та

$$\|T_n\| = 2\pi \ln n + O(1).$$

У такий спосіб, наближення інтерполяційними многочленами лише в $\ln n$ раз гірше найкращого наближення многочленами того ж порядку.

4.5 Метод найменших квадратів.

Нехай дана система точок

$$(x_i, y_i) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n),$$

які задані з похибкою.

У цьому випадку використання інтерполяційних методів недоцільно. Крім того, можлива ситуація, коли вигляд апарата, який використовується для наближення, визначається технологічними умовами або природою явища. Наприклад, функція, що наближає, повинна бути лінійною або квадратичною.

Розглянемо випадок, коли потрібно дані описати функцією вигляду

$$y = Au_1(x) + Bu_2(x) + Cu_3(x),$$

де u_1, u_2, u_3 деякі функції.

Випишемо функцію

$$\Psi(A, B, C) = \sum_{i=0}^n (y_i - Au_1(x_i) - Bu_2(x_i) - Cu_3(x_i))^2 \rho_i^2,$$

де ρ_i – деякі невід’ємні числа (вагові коефіцієнти) і підберемо коефіцієнти A, B, C таким чином, щоб

$$\Psi(A, B, C) \rightarrow \min.$$

Зважаючи на той факт, що функція гладка по всім змінним, то мінімум її досягається у критичних точках, які визначаються рівностями

$$\frac{\partial \Psi(A, B, C)}{\partial A} = 0,$$

$$\frac{\partial \Psi(A, B, C)}{\partial B} = 0,$$

$$\frac{\partial \Psi(A, B, C)}{\partial C} = 0,$$

або, що те ж

$$\begin{cases} A \sum_{i=0}^n u_1^2(x_i) \rho_i^2 + B \sum_{i=0}^n u_1(x_i) u_2(x_i) \rho_i^2 + \\ + C \sum_{i=0}^n u_1(x_i) u_3(x_i) \rho_i^2 = \sum_{i=0}^n u_1(x_i) y_i \rho_i^2, \\ A \sum_{i=0}^n u_1(x_i) u_2(x_i) \rho_i^2 + B \sum_{i=0}^n u_2^2(x_i) \rho_i^2 + \\ + C \sum_{i=0}^n u_2(x_i) u_3(x_i) \rho_i^2 = \sum_{i=0}^n u_2(x_i) y_i \rho_i^2, \\ A \sum_{i=0}^n u_1(x_i) u_3(x_i) \rho_i^2 + B \sum_{i=0}^n u_2(x_i) u_3(x_i) \rho_i^2 + \\ + C \sum_{i=0}^n u_3^2(x_i) \rho_i^2 = \sum_{i=0}^n u_3(x_i) y_i \rho_i^2. \end{cases} \quad (52)$$

Розв'язок цієї системи і дає параметри шуканої функції.

Зокрема, якщо $\rho_i = 1$ ($i = 0, 1, \dots, n$) і

$$u_1(x) = x, \quad u_2(x) = 1, \quad u_3(x) = 0,$$

то одержимо рівняння лінійної регресії, а якщо

$$u_1(x) = x^2, \quad u_2(x) = x, \quad u_3(x) = 1,$$

то одержимо рівняння квадратичної регресії.

4.6 Лінеаризація при методі найменших квадратів.

Наведена методологія визначення апроксимуючих функцій методом найменших квадратів годиться лише для функцій, у яких невизначені коефіцієнти задані лінійно. Якщо ж ця умова не виконується, то пряме використання методу найменших квадратів неможливо. Як же бути в цьому випадку? Чи можливо взагалі використовувати в таких випадках метод найменших квадратів? Так. Можливо. Але тоді потрібно проводити деякі додаткові побудови, які дозволяють провести лінеаризацію (за коефіцієнтами) функції, що наближає.

Проілюструємо це на декількох прикладах.

1. Нехай функція, що наближає, має вигляд

$$y = \frac{1}{\alpha x + \beta}.$$

Тоді для x_i похибка буде дорівнювати

$$\delta_i = y_i - \frac{1}{\alpha x_i + \beta}. \quad (53)$$

Пряме використання методу найменших квадратів приводить до мінімізації величини

$$\sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \sum_{i=0}^n \left(y_i - \frac{1}{\alpha x_i + \beta} \right)^2. \quad (54)$$

Взявши частинні похідні по α і β і прирівнявши їх нулю, одержимо систему із двох нелінійних рівнянь, що не підлягає точному розв'язку.

У зв'язку із цим, проведемо деякі побудови.

Розглянемо величини

$$\Delta_i = y_i(\alpha x_i + \beta) - 1, \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

З'ясуємо залежність між Δ_i і δ_i . Із співвідношення (53) одержуємо

$$\alpha x_i + \beta = \frac{1}{y_i - \delta_i}.$$

Тоді

$$\Delta_i = \frac{y_i}{y_i - \delta_i} - 1 = \frac{\delta_i}{y_i - \delta_i},$$

і, отже,

$$\delta_i = \frac{y_i \Delta_i}{\Delta_i + 1} \approx y_i \Delta_i.$$

Тоді задача (54) зводиться до задачі визначення коефіцієнтів α і β так, щоб величина

$$\sum_{i=0}^n (y_i \Delta_i)^2 = \sum_{i=0}^n (1 - \alpha x_i y_i - \beta y_i)^2 y_i^2$$

була мінімальною.

Таким чином, ми прийшли до задачі (52) за умови, що функція, яка наближається, тотожно дорівнює одиниці,

$$u_1(x) = xy(x), \quad u_2(x) = y(x), \quad \rho_i = y_i.$$

2. Розглянемо інший приклад. Нехай функція, що наближає, має вигляд

$$y = \frac{x}{\alpha x + \beta}.$$

Для x_i похибка буде дорівнювати

$$\delta_i = y_i - \frac{x_i}{\alpha x_i + \beta} \quad (55)$$

та

$$\Delta_i = y_i(\alpha x_i + \beta) - x_i \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

З'ясуємо зв'язок між Δ_i і δ_i . З (55) маємо

$$\alpha x_i + \beta = \frac{x_i}{y_i - \delta_i}.$$

Тоді

$$\Delta_i = \frac{x_i y_i}{y_i - \delta_i} - x_i = \frac{x_i \delta_i}{y_i - \delta_i}.$$

Звідси

$$\delta_i = \frac{y_i \Delta_i}{\Delta_i + x_i} \approx \frac{y_i}{x_i} \Delta_i.$$

Для малих δ_i

$$\sum_{i=0}^n \delta_i^2 \approx \sum_{i=0}^n \left(\frac{y_i}{x_i} \Delta_i \right)^2$$

та

$$\sum_{i=0}^n \left(\frac{y_i}{x_i} \Delta_i \right)^2 = \sum_{i=0}^n (x_i - \alpha x_i y_i - \beta y_i)^2 \left(\frac{y_i}{x_i} \right)^2.$$

Таким чином, ми прийшли до задачі (52) за умови, що наближається функція, яка тотожно дорівнює x ,

$$u_1(x) = xy(x), \quad u_2(x) = y(x), \quad \rho_i = \frac{y_i}{x_i}.$$

3. Нарешті, нехай функція, яка наближує, має вигляд

$$y = \frac{\alpha x + \beta}{\gamma x + 1}.$$

Завдання полягає в знаходженні коефіцієнтів α , β , γ , при яких величина

$$\sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \sum_{i=0}^n \left(y_i - \frac{\alpha x_i + \beta}{\gamma x_i + 1} \right)^2$$

буде мінімальною.

Лінеаризуємо цю задачу.

Нехай

$$\Delta_i = \gamma x_i y_i + y_i - \alpha x_i - \beta \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

З'ясуємо зв'язок між Δ_i і δ_i . З попереднього маємо

$$\frac{\Delta_i}{\gamma x_i + 1} = y_i - \frac{\alpha x_i + \beta}{\gamma x_i + 1}.$$

У такий спосіб

$$\frac{\Delta_i}{\gamma x_i + 1} = \delta_i.$$

Для малих δ_i одержуємо еквівалентну задачу

$$\sum_{i=0}^n \left(\frac{\Delta_i}{\gamma x_i + 1} \right)^2 = \sum_{i=0}^n (y_i - \alpha x_i - \beta + \gamma x_i y_i)^2 \left(\frac{1}{\gamma x_i + 1} \right)^2 \rightarrow \min.$$

В цьому випадку використовувати метод найменших квадратів не можливо, тому що у ваговий коефіцієнт входить невідомий параметр γ .

Розглянемо ітераційний метод покрокового уточнення вагових коефіцієнтів.

Для задачі (52) покладемо

$$u_1(x) = x, \quad u_2(x) = 1, \quad u_3(x) = -xy(x), \quad \rho_i = 1.$$

Розв'язуючи цю задачу, одержуємо α_1 , β_1 , γ_1 .

Нехай тепер

$$u_1(x) = x, \quad u_2(x) = 1, \quad u_3(x) = -xy(x), \quad \rho_i = \frac{1}{\gamma_1 x_i + 1}.$$

І знову розв'язуючи цю задачу, одержуємо α_2 , β_2 , γ_2 . Продовжуючи цей процес при

$$u_1(x) = x, \quad u_2(x) = 1, \quad u_3(x) = -xy(x), \quad \rho_i = \frac{1}{\gamma_2 x_i + 1},$$

одержимо α_2 , β_2 , γ_2 .

Ітерацію будемо продовжувати доти, поки не будуть виконуватися співвідношення

$$|\alpha_k - \alpha_{k-1}| < \varepsilon,$$

$$|\beta_k - \beta_{k-1}| < \varepsilon,$$

$$|\gamma_k - \gamma_{k-1}| < \varepsilon,$$

де ε - задана похибка.

Поряд із дрібно-лінійними функціями досить часто використовуються степеневі та показникові функції.

4. Будемо шукати функцію, що наближає, у вигляді

$$y = \alpha x^\beta.$$

Для всіх $i = 1, 2, \dots, n$ покладемо

$$\delta_i = y_i - \alpha x_i^\beta$$

та

$$\Delta_i = \ln y_i - \ln \alpha - \beta \ln x_i = \ln \frac{y_i}{\alpha x_i^\beta}.$$

З'ясуємо зв'язок між цими величинами. З першої рівності знайдемо

$$\alpha x_i^\beta = y_i - \delta_i$$

і підставимо в друге співвідношення, маємо рівність

$$\Delta_i = \ln \frac{y_i}{y_i - \delta_i}.$$

Звідси

$$y_i - \delta_i = y_i \exp(-\Delta_i)$$

і

$$\delta_i = y_i (1 - \exp(-\Delta_i)) \approx y_i \Delta_i.$$

Таким чином, задачу мінімізації величини

$$\sum_{i=1}^n \delta_i^2$$

можна замінити задачею мінімізації співвідношення

$$\sum_{i=1}^n (y_i \Delta_i)^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 (\ln y_i - \ln \alpha - \beta \ln x_i)^2,$$

яка є задачею вигляду (52).

Похибка наближення має вигляд

$$\sigma_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha x_i^\beta)^2.$$

5. Нехай функція, що наближає, задана у вигляді

$$y = \alpha \beta^x.$$

Для всіх $i = 1, 2, \dots, n$ покладемо

$$\delta_i = y_i - \alpha \beta^{x_i}$$

та

$$\Delta_i = \ln y_i - \ln \alpha - x_i \ln \beta = \ln \frac{y_i}{\alpha \beta^{x_i}}.$$

Знайдемо зв'язок між цими величинами. Виражаючи з першої рівності

$$\alpha \beta^{x_i} = y_i - \delta_i$$

і використовуючи у другому, одержуємо

$$\Delta_i = \ln \frac{y_i}{y_i - \delta_i}.$$

Отже,

$$\delta_i = y_i (1 - \exp(-\Delta_i)) \approx y_i \Delta_i.$$

Таким чином, за аналогією, задачу мінімізації величини

$$\sum_{i=1}^n \delta_i^2$$

можна замінити задачею мінімізації співвідношення

$$\sum_{i=1}^n (y_i \Delta_i)^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 (\ln y_i - \ln \alpha - x_i \ln \beta)^2,$$

яка є задачею (52).

Похибка наближення буде мати вигляд

$$\sigma_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha \beta^{x_i})^2.$$

5 Сплайни.

У розглянутому курсі ми вже зіштовхувалися з наближеним описом функції по даним значенням. Маючи значення функції в точках i ($i = n, \dots, m$, $n, m \in \mathbb{N}$) ми одержували наближений опис цієї функції у вигляді алгебраїчного многочлена (40) (інтерполяційний многочлен). Незважаючи на простоту інтерполяційних многочленів, їхнє використання для великої кількості даних незручно. Насамперед це пояснюється тим, що методи поліноміальної апроксимації збігаються не для всіх функцій, характерним прикладом є функція Рунге (що відмічалось вище). Як це не дивно, з ростом рівновіддалених вузлів, відхилення інтерполяційного многочлена, наприклад, від функції $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$

$$\max_{x \in [-1, 1]} |f(x) - P_n(f, x)|$$

не зменшується.

З іншого боку, вигляд і реалізація інтерполяційних многочленів досить зручні.

У зв'язку із цим природне бажання побудувати такий апарат наближення, який зберігає зручність поліноміальної апроксимації і вільний від недоліків інтерполяційних многочленів. Такі методи існують і називаються методами кусково-поліноміальної апроксимації або сплайнами.

Сплайном порядку r дефекту k по довільному розбиттю

$$\Delta_n = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$$

відрізку $[a, b]$ називається $(r - k)$ - раз неперервно диференційована на відрізку $[a, b]$ функція $s_{r,k}(\Delta_n, x)$, яка на кожному проміжку (x_i, x_{i+1}) ($i = 0, 1, \dots, n - 1$) є алгебраїчним многочленом степеня не вище r .

Найбільш популярними є сплайни мінімального дефекту, тобто сплайни $s_r(\Delta_n, x) = s_{r,k}(\Delta_n, x)$ при $k = 1$. При цьому, практичні потреби більш ніж на 90% задовольняються сплайнами другого і третього порядків.

Сплайни порівняно молодий апарат теорії наближень. Їх широке використання стало можливим з появою і розвитком обчислювальної техніки. У цих умовах повною мірою виявилися їхні позитивні сторони. Незабаром сфера їх використання охопила, практично, всі області, де застосовувалися обчислювальні методи – теорія апроксимації, чисельні методи розв’язку диференціальних і інтегральних рівнянь, теорія керування, математична статистика і багато інших.

5.1 Інтерполяційні ламані. Гарантовані оцінки похибки.

У цьому параграфі наведені застосування попередніх результатів до знаходження гарантованих оцінок відхилення функцій від їх інтерполяційних ламаних. На прикладі ламаних, як на моделі, ми покажемо схему знаходження оцінок наближення. Надалі ми часто будемо додержуватися цієї схеми.

Задача 5.1 *Вивести інтегральне уявлення похибки відхилення функції від її інтерполяційної ламаної в довільній точці.*

Розв’язок. Нехай $\ell(f, x)$ – пряма, яка інтерполуює функцію $f(t)$ у точках α і β . Добре відомо (зокрема з курсу аналітичної геометрії), що

$$\ell(f, x) = \frac{x - \beta}{\alpha - \beta} f(\alpha) + \frac{\alpha - x}{\alpha - \beta} f(\beta)$$

або

$$\ell(f, x) = \sigma_1 f(\alpha) + \sigma_2 f(\beta)$$

де

$$\sigma_1 = \frac{x - \beta}{\alpha - \beta} \quad \sigma_2 = \frac{\alpha - x}{\alpha - \beta}.$$

Неважко бачити, що

$$1 - (\sigma_1 + \sigma_2) = 0.$$

Нехай тепер для $x \in [a, b]$

$$K_x(t) = \begin{cases} 0 & (t \in (-\infty, \alpha) \cup (\beta, \infty)), \\ \sigma_1 & (t \in (\alpha, x)), \\ \sigma_2 & (t \in (x, \beta)). \end{cases} \quad (56)$$

Легко помітити, що

$$K'_x(t) = -(\delta(t - x) - (\sigma_1 \delta(t - \alpha) + \sigma_2 \delta(t - \beta))).$$

Звідси та із твердження 3 відразу маємо, що

$$f(x) - \ell(f, x) = - \int_{\alpha}^{\beta} f(t) (\delta(t - x) - (\sigma_1 \delta(t - \alpha) + \sigma_2 \delta(t - \beta))) dt.$$

Тобто

$$f(x) - \ell(f, x) = \int_{\alpha}^{\beta} f'(t) K_x(t) dt. \quad (57)$$

Рівність (57) і подібні співвідношення (інтегральні уявлення залишків) ми неодноразово будемо використовувати надалі.

При цьому функцію $K_x(t)$ називають ядром інтегрального уявлення (або просто ядром) або (функцією) ядром Пеано.

Наступне твердження дає гарантовані оцінки похибки функцій від їх інтерполяційних ламаних.

Нехай задане довільне розбиття

$$\Delta_{n[a,b]} = \{a = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n = b\}$$

проміжку $[a, b]$.

Тут і надалі

$$h_{i-1/2} = t_i - t_{i-1} \quad (i = 1, \dots, n)$$

та

$$\bar{h} = \bar{h}(\Delta_{n[a,b]}) = \max_{1 \leq i \leq n} h_{i-1/2}.$$

Через $s_1(f, \Delta_{n[a,b]}, t)$ позначимо ламану з вузлами в точках t_i (вузлах розбиття $\Delta_{n[a,b]}$), яка інтерполуює функцію $f(t)$ у вузлах.

Теорема 11 Для будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^1$ виконується нерівність

$$\|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C_{[a,b]}} \leq \frac{\bar{h}}{2} \|f'\|_{C_{[a,b]}} \quad (58)$$

і для будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^2$ виконується нерівність

$$\|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C_{[a,b]}} \leq \frac{\bar{h}^2}{8} \|f''\|_{C_{[a,b]}}. \quad (59)$$

Зокрема, якщо

$$\Delta_{n[a,b]}^0 = \left\{ a + \frac{b-a}{n} i \right\}_{i=0}^n$$

розбиття відрізка $[a, b]$ на рівні частини (рівномірне розбиття відрізка $[a, b]$), то для будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^1$ виконується нерівність

$$\|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]}^0)\|_{C_{[a,b]}} \leq \frac{b-a}{2n} \|f'\|_{C_{[a,b]}}, \quad (60)$$

і для будь-якої функції $f \in C_{[a,b]}^2$ виконується нерівність

$$\|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]}^0)\|_{C_{[a,b]}} \leq \frac{(b-a)^2}{8n^2} \|f''\|_{C_{[a,b]}}. \quad (61)$$

Доведення. Насамперед, зазначимо, що з інтегрального уявлення (57) витікає, що

$$\begin{aligned} |f(x) - \ell(f, x)| &= \left| \int_{\alpha}^{\beta} f'(t) K_x(t) dt \right| \leq \int_{\alpha}^{\beta} |f'(t)| |K_x(t)| dt \leq \\ &\leq \max_{t \in [\alpha, \beta]} |f'(t)| \int_{\alpha}^{\beta} |K_x(t)| dt = \|f'\|_{C_{[\alpha, \beta]}} \left(\int_{\alpha}^x \frac{\beta-x}{\beta-\alpha} dt + \int_x^{\beta} \frac{x-\alpha}{\beta-\alpha} dt \right) = \end{aligned}$$

$$= \frac{2(\beta - x)(x - \alpha)}{\beta - \alpha} \|f'\|_{C_{[\alpha, \beta]}} \leq \frac{\beta - \alpha}{2} \|f'\|_{C_{[\alpha, \beta]}}.$$

Таким чином, якщо $f \in C_{[\alpha, b]}^1$, тоді

$$|f(x) - \ell(f, x)| \leq \frac{\beta - \alpha}{2} \|f'\|_{C_{[\alpha, \beta]}}. \quad (62)$$

Звідси маємо, якщо $f \in C_{[a, b]}^1$, і $x \in [t_{i-1}, t_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$), то маємо

$$|f(x) - s_1(f, \Delta_{n[a, b]}, x)| \leq \frac{t_i - t_{i-1}}{2} \|f'\|_{C_{[t_{i-1}, t_i]}} = \frac{h_{i-1/2}}{2} \|f'\|_{C_{[t_{i-1}, t_i]}} \leq \frac{\bar{h}}{2} \|f'\|_{C_{[a, b]}}.$$

З цього співвідношення негайно випливає нерівність (58).

З інтегрального уявлення (57) за допомогою інтегрування частинами, одержуємо

$$f(x) - \ell(f, x) = - \int_{\alpha}^{\beta} f''(t) K_x^*(t) dt,$$

де

$$K_x^*(t) = \int_{\alpha}^t K_x(u) du$$

є ламана із двома ланками, яка приймає значення 0 у точках α та β і значення $(x - \alpha)(x - \beta)/(\beta - \alpha)$ у точці x .

Звідси отримуємо, що

$$\begin{aligned} |f(x) - \ell(f, x)| &= \left| \int_{\alpha}^{\beta} f''(t) K_x^*(t) dt \right| \leq \int_{\alpha}^{\beta} |f''(t)| |K_x^*(t)| dt \leq \\ &\leq \max_{t \in [\alpha, \beta]} |f''(t)| \int_{\alpha}^{\beta} |K_x^*(t)| dt = \|f''\|_{C_{[\alpha, \beta]}} \frac{(\beta - x)(x - \alpha)}{2} \leq \frac{(\beta - \alpha)^2}{8} \|f''\|_{C_{[\alpha, \beta]}}. \end{aligned}$$

Таким чином, якщо $f \in C_{[\alpha, \beta]}^2$, тоді

$$|f(x) - \ell(f, x)| \leq \frac{(\beta - \alpha)^2}{8} \|f''\|_{C_{[\alpha, \beta]}}.$$

Звідси маємо, якщо $f \in C_{[a, b]}^2$, і $x \in [t_{i-1}, t_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$), то

$$|f(x) - s_1(f, \Delta_{n[a, b]}, x)| \leq \frac{(t_i - t_{i-1})^2}{8} \|f''\|_{C_{[t_{i-1}, t_i]}} = \frac{h_{i-1/2}^2}{8} \|f''\|_{C_{[t_{i-1}, t_i]}} \leq \frac{\bar{h}^2}{8} \|f''\|_{C_{[a, b]}}.$$

Таким чином негайно випливає нерівність (59).

Рівності (60) і (61) відразу отримуємо із рівностей (58) і (59) зауважуючи, що для рівномірного розбиття $h = (b - a)/n$.

Нерівності (58) — (61) називають гарантованими оцінками відхилення функцій від їх інтерполяційних ламаних у метриці простору C (розглядають відхилення і в інших просторах) на класах $C_{[a, b]}^1$ і $C_{[a, b]}^2$ (розглядають і інші класи).

Нерівності (58) — (61) є точними, тобто існують функції для яких ці нерівності обертаються в рівності.

Дійсно, якщо

$$\bar{h} = \max_{1 \leq i \leq n} h_{i-1/2} = h_{\nu-1/2}$$

і $c = (t_\nu + t_{\nu-1})/2$, то для функції

$$f_0(x) = |x - c|$$

будуть виконуватися співвідношення

$$\|f_0 - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} \geq |f_0(c) - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})| = |t_\nu - c| = \frac{h_{\nu-1/2}}{2} = \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2} \|f'_0\|_{C[a,b]}.$$

Тобто

$$\|f_0 - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} \geq \frac{\hbar}{2} \|f'_0\|_{C[a,b]}.$$

Крім того, якщо $f_1(t) = t^2$, то для $t \in (t_{i-1}, t_i)$ виконується рівність

$$f_1(t) - s_1(f_1, \Delta_{n[a,b]}, t) = (t - t_{i-1})(t - t_i).$$

Тому

$$\begin{aligned} \|f_1 - s_1(f_1, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} &= \max_{1 \leq i \leq n} \max_{t \in [t_{i-1}, t_i]} |(t - t_{i-1})(t - t_i)| = \\ &= \max_{1 \leq i \leq n} \frac{h_{i-1/2}^2}{4} = \frac{\hbar^2}{4} = \frac{\hbar^2}{8} \|f''_1\|_{C[a,b]}, \end{aligned}$$

тобто

$$\|f_1 - s_1(f_1, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} = \frac{\hbar^2}{8} \|f''_1\|_{C[a,b]}.$$

З останньої рівності і з того факту, що функція $f_1(t) = t^2$ має похідні всіх порядків отримуємо той факт, що ламані не можуть дати порядок наближення функції краще, ніж $O(1/n^2)$.

5.2 Асимптотично оптимальний вибір вузлів при наближенні кривої ламаними.

Нехай $s_1(f, \Delta_{n[a,b]}, x)$ - інтерполяційна ламана.

Тоді для $x \in [x_{i-1}, x_i]$

$$f(x) - s_1(f, \Delta_{n[a,b]}, x) = f(x) - \left(-\frac{x - x_i}{h_{i-1/2}} f_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_{i-1/2}} f_i \right)$$

Не обмежуючи загальності, можна вважати $x_{i-1} = 0$, $x_i = h$, $h_{i-1/2} = h$ і $f_{1/2} = f(h/2)$, тоді для $x \in [0, h]$

$$\begin{aligned} f(x) - s_1(f, \Delta_{n[a,b]}, x) &= f(x) - \frac{h-x}{h} f_0 - \frac{x}{h} f_1 = \\ &= f_{1/2} + f'_{1/2} \left(x - x - \frac{h}{2} \right) + \frac{1}{2} f''_{1/2} \left(x - x - \frac{h}{2} \right)^2 + \dots \\ &+ \frac{x-h}{h} \left(f_{1/2} - \frac{h}{2} f'_{1/2} + \left(\frac{h}{2} \right)^2 \frac{1}{2} f''_{1/2} + \dots \right) - \frac{x}{h} \left(f_{1/2} + \frac{h}{2} f'_{1/2} + \frac{h^2}{8} f''_{1/2} + \dots \right) = \\ &= \frac{1}{2} f''_{1/2} x(x-h) + \dots \end{aligned}$$

Таким чином для $x \in [x_{i-1}, x_i]$

$$f(x) - s_1(f, \Delta_{n[a,b]}, x) = \frac{1}{2} f''_{1/2} x(x-h) + o(h^2). \quad (63)$$

Звідси відразу одержуємо

$$\begin{aligned} \|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} &= \max_i \frac{1}{2} |f''_{i-1/2}| \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]} |(x - x_{i-1})(x - x_i)| + o(\hbar^2) = \\ &= \frac{1}{8} \max_i |f''_{i-1/2}| h_{i-1/2}^2 + o(\hbar^2). \end{aligned}$$

Згідно теореми про середнє значення, знайдеться точка $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$ така, що:

$$\left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \sqrt{|f''(x)|} dx \right)^2 = \left(\sqrt{|f''(\xi_i)|} h_{i-1/2} \right)^2 = |f''(\xi_i)| h_{i-1/2}^2,$$

тоді

$$\begin{aligned} \|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} &= \frac{1}{8} \max_i |f''_{i-1/2}| h_{i-1/2}^2 + o(\hbar^2) = \\ &= \frac{1}{8} \max_i |f''(\xi_i)| h_{i-1/2}^2 + \frac{1}{8} \max_i |f''_{i-1/2} - f''(\xi_i)| h_{i-1/2}^2 + o(\hbar^2) = \\ &= \frac{1}{8} \max_i |f''(\xi_i)| h_{i-1/2}^2 + O(\hbar^2 \max_i |f''_{i-1/2} - f''(\xi_i)|) = \\ &= \frac{1}{8} \max_i \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \sqrt{|f''(x)|} dx \right)^2 + O(\hbar^2 \max_i |f''_{i-1/2} - f''(\xi_i)|). \end{aligned}$$

Лема 2 Нехай $\alpha > 0$ і $C_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Тоді

$$\min \left\{ \max\{C_i^\alpha \mid i = 1, 2, \dots, n\}, \quad C_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^n C_i = \mathcal{C} \right\} = \left(\frac{\mathcal{C}}{n} \right)^\alpha. \quad (64)$$

Таким чином, у множині векторів $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_n)$ з невід'ємними координатами, що задовольняють умові

$$\sum_{i=1}^n C_i = \mathcal{C}, \quad (65)$$

найменше значення величини $\max\{C_i \mid i = 1, 2, \dots, n\}$ досягається, коли всі C_i рівні між собою, тобто коли

$$C_i = C_i^0 = \frac{\mathcal{C}}{n} \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Нехай мінімум досягається в точках $\{C_i^0\}$, де всі C_i рівні між собою

$$\|C_i^0\| = C_1 = \dots = C_m; \quad \min_{1 \leq k \leq n} C_k = C_k^0 = M.$$

Розглянемо:

$$C_1^* = C_1^0 - \varepsilon$$

$$\begin{aligned}
& \dots \\
& C_m^* = C_m^0 - \varepsilon \\
& C_{m+1}^* = C_m^0 + \varepsilon \frac{m}{n-m} \\
& \dots \\
& C_n^* = C_n^0 + \varepsilon \frac{m}{n-m}
\end{aligned}$$

Тоді при малих $\varepsilon > 0$:

$$C_k^* \geq 0, \quad \sum_{k=1}^n C_k^* = \mathcal{C} \quad \text{і} \quad \min_{1 \leq k \leq n} |C_k^*| = M - \varepsilon < M,$$

що неможливо, тому що суперечить умові мінімуму.

Тоді якщо $f(x) \in C_{[a,b]}^2$ така, що $f''(x)$ обертається в ноль тільки на скінченній множині точок, то

$$\|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} = \frac{1}{8} \left(\max_{1 \leq k \leq n} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \sqrt{|f''(x)|} dx \right)^2 + O(\hbar^2 \max_i |f''_{i-1/2} - f''(\xi_i)|)$$

досягає мінімуму тільки тоді, коли

$$\begin{aligned}
\int_{x_k}^{x_{k+1}} \sqrt{|f''(x)|} dx &= \frac{1}{n} \int_a^b \sqrt{|f''(x)|} dx, \quad k = \overline{1, n} \\
&\Downarrow \\
\int_a^{x_k} \sqrt{|f''(x)|} dx &= \frac{k}{n} \int_a^b \sqrt{|f''(x)|} dx,
\end{aligned}$$

і маємо співвідношення

$$\min_{\Delta_{[a,b]}} \|f - s_1(f, \Delta_{n[a,b]})\|_{C[a,b]} = \frac{1}{n^2} \left(\int_a^b \sqrt{|f''(x)|} dx \right)^2 (1 + o(1)).$$

Нехай $R(f, \Delta_n)$ - похибка деякого методу наближення.

Розбиття Δ_n^0 називається оптимальним для функції f і відстані R , якщо

$$\min_{\Delta_n} R(f, \Delta_n) = R(f, \Delta_n^0).$$

Послідовність розбиттів Δ_n^* називається асимптотично оптимальною для функції f і відстані R , якщо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{R(f, \Delta_n^0)}{R(f, \Delta_n^*)} = 1,$$

або

$$R(f, \Delta_n^*) = R(f, \Delta_n^0) \cdot (1 + o(1)), \quad n \rightarrow \infty.$$

Розбиття $\Delta_n^0 = \Delta_{n^0}^0(\varepsilon)$ називається ε -оптимальним, якщо $R(f, \Delta_{n^0}^0(\varepsilon)) \leq \varepsilon$ і для довільного Δ_N такого, що $R(f, \Delta_N) \leq \varepsilon$, буде виконуватися: $N \geq n$.

Інфінітна послідовність розбиттів $\Delta_{n^*}^*(\varepsilon)$ називається ε -асимптотично оптимальною, якщо існує

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{n^*(\varepsilon)}{n^0(\varepsilon)} = 1$$

або

$$n^*(\varepsilon) = n^0(\varepsilon) \cdot (1 + o(1)), \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Розглянемо приклад

$$\delta_k = \int_{y_k}^{y_{k+1}} (y^2 - s_1(y^2, \Delta\{y_k\}, y)) dy = \int_{y_k}^{y_{k+1}} (y - y_k)(y_{k+1} - y) dy.$$

зробивши заміну змінних, одержуємо

$$\delta_k = h_{k+1/2}^3 \int_0^1 t(1-t) dt = \frac{1}{6} h_{k+1/2}^3.$$

Звідси отримуємо

$$\delta = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n h_{k+1/2}^3 \longrightarrow \min \implies \sum_{k=1}^n h_{k+1/2} = \sqrt{2}$$

$$\delta_{\min} = \frac{n}{6} \left(\frac{\sqrt{2}}{n} \right)^3 = \frac{\sqrt{2}}{3n^2}$$

5.3 Кусково-параболічна інтерполяція.

З вигляду інтерполяційної формули Ньютона (40) видно, що парабола, яка приймає в точках $-1, 0$ і 1 значення f_{-1}, f_0 і f_1 , відповідно, має вигляд

$$\frac{1}{2} f_{-1} x(x-1) + f_0(1-x^2) + \frac{1}{2} f_1 x(1+x).$$

Отже, парабола, що інтерполює в точках $x_i, x_{i+1/2}$ і x_{i+1} значення функції $f(x)$ буде мати вигляд

$$\frac{1}{2} f_i \tau(\tau-1) + f_{i+1/2}(1-\tau^2) + \frac{1}{2} f_{i+1} \tau(1+\tau), \quad (66)$$

де

$$\tau = 2 \frac{x - x_{i+1/2}}{h_{i+1/2}}, \quad h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i, \quad x_{i+1/2} = \frac{x_{i+1} + x_i}{2}.$$

Функція, яка на кожному проміжку $[x_i, x_{i+1}]$ має вигляд (66) є інтерполяційним сплайном $s_{2,2}(f, \Delta_n, x)$ порядку 2 дефекту 2.

Як і в попередньому випадку, знайдемо рівномірну похибку наближення даної функції $f(x)$ сплайнами $s_{2,2}(f, \Delta_n, x)$.

Будемо вважати, що функція $f(x)$ має четверту неперервну похідну на проміжку $[a, b]$.

Використовуючи формулу Тейлора для функції $f(x)$ в околі точки $x_{i+1/2}$,

$$f(x) = f_{i+1/2} + f'_{i+1/2} \frac{1}{2} h_{i+1/2} \tau + \frac{1}{2} f''_{i+1/2} \left(\frac{1}{2} h_{i+1/2} \tau \right)^2 +$$

$$+\frac{1}{3!}f'''_{i+1/2}\left(\frac{1}{2}h_{i+1/2}\tau\right)^3+\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi_{i+1/2})\left(\frac{1}{2}h_{i+1/2}\tau\right)^4$$

і, відповідно, розклад згідно формули Тейлора для f_i і f_{i+1} , одержуємо

$$f(x)-s_{2,2}(f,\Delta_n,x)=\frac{1}{24}h_{i+1/2}^3f'''_{i+1/2}\tau(\tau^2-1)+C(f)h_{i+1/2}^4. \quad (67)$$

Розглянемо задачу

$$\Psi(\tau)=\tau(\tau^2-1)\rightarrow\text{extr}\quad(\tau\in[-1,1]).$$

Знайдемо критичні точки похідної від функції $\Psi(\tau)$:

$$\Psi'(\tau)=3\tau^2-1=0,$$

тоді $\tau_1=1/\sqrt{3}$ і $\tau_2=-1/\sqrt{3}$.

Залишається знайти значення функції Ψ на границі області і у критичних точках

$$\Psi(1)=\Psi(-1)=0,\quad\Psi\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)=-\frac{2\sqrt{3}}{9},\quad\Psi\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)=\frac{2\sqrt{3}}{9}.$$

Таким чином,

$$\|f-s_{2,2}(f,\Delta_n)\|_{C[x_i,x_{i+1}]}=\frac{\sqrt{3}}{108}h_{i+1/2}^3|f'''_{i+1/2}|+C(f)h_{i+1/2}^4,$$

і, аналогічно попередньому, встановлюємо вірність рівності

$$\begin{aligned}\|f-s_{2,2}(f,\Delta_n)\|_{C[a,b]}&=\frac{\sqrt{3}}{108}\max_{i=0,\dots,n-1}\left(h_{i+1/2}^3|f'''_{i+1/2}|+C(f)h_{i+1/2}^4\right)= \\ &=\frac{\sqrt{3}}{108}\max_{i=0,\dots,n-1}\left(\left(\int_{x_i}^{x_{i+1}}\sqrt[3]{|f'''(x)|}dx\right)^3+C^*(f)h_{i+1/2}^4\right).\end{aligned} \quad (68)$$

Звідси і із леми 2 одержуємо, що, якщо функція $f(x)$ така, що $f'''(x)$ обертається в нуль лише в скінченному числі точок, то похибка наближення функції $f(x)$ сплайнами $s_{2,2}(f,\Delta_n)$ буде найменшою для розбиття Δ_n^0 з вузлами, які вибираються із умов

$$\int_{x_i^0}^{x_{i+1}^0}\sqrt[3]{|f'''(x)|}dx=\frac{1}{n}\int_a^b\sqrt[3]{|f'''(x)|}dx, \quad (69)$$

і, при цьому,

$$\min_{\Delta_n}\|f(x)-s_{2,2}(f,\Delta_n)\|_{C[a,b]}=\frac{\sqrt{3}}{108n^3}\left(\int_a^b\sqrt[3]{|f'''(x)|}dx\right)^3+\frac{C(f)}{n^4}.$$

Побудовані параболічні сплайни не є гладкими, що істотно погіршує їхні характеристики. Подальші наші міркування стосуються параболічних сплайнів мінімального дефекту, тобто неперервно диференційованих кусково-параболічних функцій.

Розглянемо функцію $s_2(f,\Delta_n,x)$, яка на проміжку $[x_i,x_{i+1}]$ записана у такий спосіб

$$s_2(f,\Delta_n,x)=\frac{1}{2}m_i\tau(\tau-1)+f_{i+1/2}(1-\tau^2)+\frac{1}{2}m_{i+1}\tau(1+\tau), \quad (70)$$

де числа $m_i = s_2(f, \Delta_n, x_i)$ визначаються з умови неперервності похідної $s_2'(f, \Delta_n, x)$, тобто

$$s_2'(f, \Delta_n, x_i - 0) = s_2'(f, \Delta_n, x_i + 0) \quad (i = 1, 2, \dots, n - 1). \quad (71)$$

З (70) відразу одержуємо

$$s_2'(f, \Delta_n, x) = \frac{1}{h_{i+1/2}} m_i (2\tau - 1) - \frac{4}{h_{i+1/2}} f_{i+1/2} \tau + \frac{1}{h_{i+1/2}} m_{i+1} (1 + 2\tau),$$

отже,

$$\begin{aligned} s_2'(f, \Delta_n, x_i - 0) &= -\frac{3}{h_{i+1/2}} m_i + \frac{4}{h_{i+1/2}} f_{i+1/2} - \frac{1}{h_{i+1/2}} m_{i+1}, \\ s_2'(f, \Delta_n, x_i + 0) &= \frac{1}{h_{i-1/2}} m_{i-1} - \frac{4}{h_{i-1/2}} f_{i-1/2} + \frac{3}{h_{i-1/2}} m_i. \end{aligned}$$

Звідси та з умови (71) одержуємо систему $n - 1$ лінійних рівнянь для отримання значень m_i :

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_{i-1/2}} m_{i-1} - \frac{4}{h_{i-1/2}} f_{i-1/2} + \frac{3}{h_{i-1/2}} m_i &= \\ = -\frac{3}{h_{i+1/2}} m_i + \frac{4}{h_{i+1/2}} f_{i+1/2} - \frac{1}{h_{i+1/2}} m_{i+1} & \\ (i = 1, 2, \dots, n - 1), & \end{aligned}$$

або, що те ж саме

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_{i-1/2}} m_{i-1} + \left(\frac{3}{h_{i-1/2}} + \frac{3}{h_{i+1/2}} \right) m_i + \frac{1}{h_{i+1/2}} m_{i+1} &= \frac{4}{h_{i-1/2}} f_{i-1/2} + \frac{4}{h_{i+1/2}} f_{i+1/2}, \\ (i = 1, 2, \dots, n - 1). & \end{aligned}$$

Помноживши обидві частини i -го рівняння системи на $h_{i+1/2} h_{i-1/2} (h_{i+1/2} + h_{i-1/2})^{-1}$, одержуємо наступну систему

$$\begin{cases} m_0 = \sigma_0, \\ \lambda_i m_{i-1} + 3m_i + \mu_i m_{i+1} = \sigma_i \quad (i = 1, 2, \dots, n - 1), \\ m_n = \sigma_n, \end{cases} \quad (72)$$

де

$$\lambda_i = \frac{h_{i+1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}, \quad \mu_i = \frac{h_{i-1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}, \quad (\lambda_i + \mu_i = 1),$$

$$\sigma_0 = f(a), \quad \sigma_n = f(b), \quad \sigma_i = 4\mu_i f_{i+1/2} + 4\lambda_i f_{i-1/2} \quad (i = 1, 2, \dots, n - 1).$$

Матриця системи (72)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lambda_1 & 3 & \mu_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 3 & \mu_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 3 & \mu_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

має діагональну перевагу, тому для визначення чисел m_i можна використовувати алгоритм монотонного прогону.

З'ясуємо тепер міру похибки рівномірного наближення функції інтерполяційним параболічним сплайном мінімального дефекту.

Покладемо

$$c_i = m_i - f_i \quad (i = 0, 1, \dots, n),$$

тоді система (72) переписеться у вигляді

$$\begin{cases} c_0 = \delta_0, \\ \lambda_i c_{i-1} + 3c_i + \mu_i c_{i+1} = \delta_i, & (i = 1, 2, \dots, n-1), \\ c_n = \delta_n, \end{cases}$$

де

$$\delta_i = \sigma_i - \lambda_i f_{i-1} - 3f_i - \mu_i f_{i+1} \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$$

і $\delta_0 = \delta_n = 0$.

Якщо функція f має четверту неперервну похідну, то використовуючи формулу Тейлора для функції $f(x)$ в околі точки x_i , одержуємо

$$\delta_i = \frac{h_{i+1/2} h_{i-1/2}}{12(h_{i+1/2} + h_{i-1/2})} \left(|f_i'''| (h_{i+1/2}^2 - h_{i-1/2}^2) + C(f) (h_{i+1/2}^3 + h_{i-1/2}^3) \right),$$

і, отже,

$$|c_i| \leq \frac{1}{2} \max_{i=1,2,\dots,n-1} \delta_i \leq \max_{i=1,2,\dots,n-1} \frac{h_{i+1/2} h_{i-1/2}}{12(h_{i+1/2} + h_{i-1/2})} |f_i'''| (h_{i+1/2}^2 - h_{i-1/2}^2). \quad (73)$$

Розглянемо похибку наближення функції $f(x)$ сплайном $s_2(f, \Delta_n, x)$:

$$|f(x) - s_2(f, \Delta_n, x)| = |f(x) - s_{2,2}(f, \Delta_n, x) + s_{2,2}(f, \Delta_n, x) - s_2(f, \Delta_n, x)|.$$

Використовуючи нерівність трикутника, одержуємо

$$\begin{aligned} |f(x) - s_{2,2}(f, \Delta_n, x)| - |s_{2,2}(f, \Delta_n, x) - s_2(f, \Delta_n, x)| &\leq |f(x) - s_2(f, \Delta_n, x)| \leq \\ &\leq |f(x) - s_{2,2}(f, \Delta_n, x)| + |s_{2,2}(f, \Delta_n, x) - s_2(f, \Delta_n, x)|. \end{aligned}$$

Крім того, з (66), (70) і (73) маємо для $x \in [x_i, x_{i+1}]$

$$\begin{aligned} s_2(f, \Delta_n, x) - s_{2,2}(f, \Delta_n, x) &= \frac{1}{2} c_i \tau (\tau - 1) + \frac{1}{2} c_{i+1} \tau (1 + \tau) = \\ &= \tilde{C}_i h^2 \max_{i=1,2,\dots,n-1} (h_{i+3/2}^2 - h_{i-1/2}^2), \end{aligned}$$

де \tilde{C}_i деяка стала, залежна від функції.

Таким чином, з огляду на рівність (68), одержуємо вигляд похибки апроксимації функції параболічними сплайнами мінімального дефекту

$$\begin{aligned} \|f - s_{2,1}(f, \Delta_n)\|_{C[a,b]} &= \frac{\sqrt{3}}{108} \max_{i=0,\dots,n-1} \left(h_{i+1/2}^3 |f_{i+1/2}'''| + \tilde{C}(f) h_{i+1/2}^2 |h_{i+1/2}^2 - h_{i-1/2}^2| \right) = \\ &= \frac{\sqrt{3}}{108} \max_{i=0,\dots,n-1} \left(\left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt[3]{|f'''(x)|} dx \right)^3 + \tilde{C}(f) h_{i+1/2}^2 |h_{i+1/2}^2 - h_{i-1/2}^2| \right). \quad (74) \end{aligned}$$

Нехай функція $f(x)$ така, що $f'''(x)$ неперервна та обертається в нуль лише в скінченному числі точок. Виберемо вузли сплайну із умов (69), тобто

$$\int_{x_i^0}^{x_{i+1}^0} \sqrt[3]{|f'''(x)|} dx = \frac{1}{n} A,$$

де

$$A = \int_a^b \sqrt[3]{|f'''(x)|} dx.$$

Тоді згідно теореми про середнє значення знайдеться точка $\xi_{i+1/2} \in [x_i^0, x_{i+1}^0]$ така, що

$$\int_{x_i^0}^{x_{i+1}^0} \sqrt[3]{|f'''(x)|} dx = h_{i+1/2}^0 \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i+1/2})|},$$

тобто

$$h_{i+1/2}^0 = \frac{A}{n \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i+1/2})|}} = O\left(\frac{1}{n}\right),$$

де $h_{i+1/2}^0 = x_{i+1}^0 - x_i^0$.

Окрім цього,

$$\begin{aligned} |h_{i+1/2}^0 - h_{i-1/2}^0| &= \frac{A}{n} \left| \frac{1}{\sqrt[3]{|f'''(\xi_{i+1/2})|}} - \frac{1}{\sqrt[3]{|f'''(\xi_{i-1/2})|}} \right| = \\ &= \frac{A}{n \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i+1/2})|} \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i-1/2})|}} \left| \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i+1/2})|} - \sqrt[3]{|f'''(\xi_{i-1/2})|} \right| = O\left(\frac{1}{n^2}\right). \end{aligned}$$

Таким чином маємо

$$\min_{\Delta_n} \|f(x) - s_{2,1}(f, \Delta_n)\|_{C[a,b]} = \frac{\sqrt{3}}{108 n^3} \left(\int_a^b \sqrt[3]{|f'''(x)|} dx \right)^3 + \frac{C(f)}{n^4}.$$

5.4 Кубічні сплайни.

Незважаючи на те, що ми приділили параболічним сплайнам так багато уваги, найбільш зручними і часто використовуваними сплайнами є не параболічні, а кубічні сплайни. На це є багато причин, зокрема, при тих же обчислювальних витратах, кубічні сплайни точніше описують функцію та мають деякі унікальні властивості, які властиві лише їм.

Розглянемо наступну допоміжну задачу: побудувати кубічну параболу, яка приймає в точках 1 та -1 значення f_1 і f_{-1} таку, що її похідна в цих точках дорівнює f'_1 і f'_{-1} відповідно, тобто функцію

$$s(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$$

таку, що

$$s(1) = f_1, \quad s(-1) = f_{-1}, \quad s'(1) = f'_1, \quad s'(-1) = f'_{-1}.$$

Розв'язок цієї задачі зводиться до системи

$$\begin{cases} a + b + c + d = f_1, \\ -a + b - c + d = f_{-1}, \\ 3a + 2b + c = f'_1, \\ 3a - 2b + c = f'_{-1}. \end{cases}$$

Вирішуючи її, одержимо параболу вигляду:

$$\begin{aligned} s(x) &= \frac{f_{-1}}{4}(1-x)^2(2+x) + \frac{f_1}{4}(1+x)^2(2-x) + \\ &+ \frac{f'_{-1}}{4}(1-x)^2(1+x) - \frac{f'_1}{4}(1+x)^2(1-x). \end{aligned}$$

Отже, кубічна параболка, яка інтерполює в точках x_i і x_{i+1} значення функції $f(x)$, а її похідна в цих же точках інтерполює значення $f'(x)$ буде мати вигляд

$$\begin{aligned} &\frac{f_i}{4}(1-\tau)^2(2+\tau) + \frac{f_{i+1}}{4}(1+\tau)^2(2-\tau) + \\ &+ \frac{h_{i+1/2}}{8} \left(f'_i(1-\tau)^2(1+\tau) - f'_{i+1}(1+\tau)^2(1-\tau) \right). \end{aligned} \quad (75)$$

Функція, яка на кожному проміжку $[x_i, x_{i+1}]$ має вигляд (75) є інтерполяційним сплайном $s_{3,2}(f, \Delta_n, x)$ порядку 3 дефекту 2 (інша назва таких сплайнів – ермитові сплайни).

Використовуючи ті ж міркування, що й при одержанні похибки наближення функції сплайнами $s_{2,2}(f, \Delta_n)$, для функції $f(x)$ з неперервною четвертою похідною, одержимо

$$\|f - s_{3,2}(f, \Delta_n)\|_{C[a,b]} = \frac{1}{384} \max_{i=0, \dots, n-1} \left(h_{i+1/2}^4 |f_{i+1/2}^{(4)}| + C(f) h_{i+1/2}^5 \right).$$

Надалі розглянемо інтерполяційний кубічний сплайн мінімального дефекту $s_3(f, \Delta_n, x)$. Це функція, неперервна на проміжку $[a, b]$ разом зі своїми двома похідними, така, що виконуються наступні інтерполяційні умови:

$$\begin{aligned} s'_3(f, \Delta_n, a) &= f'_0, \\ s_3(f, \Delta_n, x_i) &= f_i, \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n), \\ s'_3(f, \Delta_n, b) &= f'_n. \end{aligned}$$

Неважко бачити, що для $x \in [x_i, x_{i+1}]$ інтерполяційний кубічний сплайн мінімального дефекту має вигляд

$$\begin{aligned} s_3(f, \Delta_n, x) &= \frac{f_i}{4}(1-\tau)^2(2+\tau) + \frac{f_{i+1}}{4}(1+\tau)^2(2-\tau) + \\ &+ \frac{h_{i+1/2}}{8} \left(m_i(1-\tau)^2(1+\tau) - m_{i+1}(1+\tau)^2(1-\tau) \right), \end{aligned} \quad (76)$$

де числа m_i $i = 0, 1, \dots, n$ вибираються з умови неперервності другої похідної функції $s_3(f, \Delta_n, x)$ (зрозуміло, що функція вигляду (76) неперервна і має неперервну похідну на $[a, b]$ при будь-яких числах f_i, m_i , де $i = 0, 1, \dots, n$).

Випишемо цю умову. Насамперед відзначимо, що

$$s_3''(f, \Delta_n, x) = \frac{6\tau}{h_{i+1/2}^2}(f_i - f_{i+1}) + \frac{1}{h_{i+1/2}}((3\tau - 1)m_i + (3\tau - 1)m_{i+1}),$$

і умова

$$s_3''(f, \Delta_n, x_i - 0) = s_3''(f, \Delta_n, x_i + 0)$$

запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} & \frac{6}{h_{i-1/2}^2}(f_{i-1} - f_i) + \frac{2}{h_{i-1/2}}(2m_i + m_{i-1}) = \\ & = \frac{6}{h_{i+1/2}^2}(f_i - f_{i+1}) - \frac{2}{h_{i+1/2}}(2m_i + m_{i+1}). \end{aligned}$$

Таким чином, якщо інтерполюються значення похідної функції на кінцях проміжку, то значення m_i , необхідні для побудови сплайна, являють собою розв'язок системи

$$\begin{cases} m_0 = \delta_0, \\ \lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} = \delta_i \quad (i = 1, 2, \dots, n-1), \\ m_n = \delta_n, \end{cases} \quad (77)$$

де

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \frac{h_{i+1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}, \quad \mu_i = \frac{h_{i-1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}, \\ \delta_0 &= f'(a), \quad \delta_n = f'(b), \quad \delta_i = 3 \left(\mu_i \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1/2}} + \lambda_i \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1/2}} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n-1). \end{aligned}$$

Матриця системи (77)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 2 & \mu_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 2 & \mu_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

має діагональну перевагу, тому для визначення чисел m_i можна використовувати алгоритм монотонного прогону.

Вид сплайну істотно залежить від граничних умов. Ми розглянули випадок інтерполяції значень похідної функції, іншим важливим випадком є періодичні умови (тобто шуканий сплайн є $(b - a)$ -періодичною функцією). Використовуючи умови $f_0 = f_n$, $f_{n+1} = f_1$, $m_0 = m_n$, $m_{n+1} = m_1$, одержуємо систему

$$\begin{cases} 2m_1 + \mu_1 m_2 + \lambda_1 m_n = \delta_1, \\ \lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} = \delta_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n-1), \\ \mu_n m_1 + \lambda_n m_{n-1} + 2m_n = \delta_n. \end{cases} \quad (78)$$

Не вдаючись у деталі, відзначимо, що якщо функція $f(x)$ має п'ять неперервних похідних на $[a, b]$, тоді для $x \in [x_i, x_{i+1}]$ при

$$\max_i h_{i+1/2} \rightarrow 0$$

та при $n \rightarrow \infty$ рівномірно по x і по i виконуються співвідношення

$$\begin{aligned} f(x) - s_3(f, \Delta_n, x) &= \frac{h_{i+1/2}^4}{24}((1 - \tau)\tau)^2 f^{(4)}(x) + O(h_{i+1/2}^5), \\ f'(x) - s'_3(f, \Delta_n, x) &= \frac{h_{i+1/2}^3}{12}\tau(1 - \tau)(2\tau - 1)f^{(4)}(x) + O(h_{i+1/2}^4), \\ f''(x) - s''_3(f, \Delta_n, x) &= \frac{h_{i+1/2}^2}{12}(1 - 6\tau + 6\tau^2)f^{(4)}(x) + O(h_{i+1/2}^3). \end{aligned}$$

Усюди тут

$$\tau = (x - x_i)/h_{i+1/2}. \quad (79)$$

Використовуючи підхід, який наведено в минулому параграфі, можна отримати розв'язок задачі побудови асимптотично оптимального розбиття для кубічних сплайнів.

5.5 В-сплайни.

У цьому параграфі ми розглянемо вигляд сплайнів, на основі яких, як із кубиків, можна будувати різні вигляди сплайнів, які необхідні для розв'язку різних задач.

Позначимо

$$B_{0,h}(x) = \begin{cases} 1 & (|t| < h/2), \\ 0 & (|t| \geq h/2). \end{cases}$$

Функцію $B_{r,h}(x)$ уведемо за допомогою рекурентних співвідношень, використовуючі функції Стеклова

$$B_{r,h}(x) = (B_{r-1,h}, t)_h = \frac{1}{h} \int_{x-h/2}^{x+h/2} B_{r-1,h}(x) dx \quad (r = 1, 2, \dots).$$

Цю функцію назвемо нормалізованим В -сплайном по рівномірному розбиттю або просто В -сплайном.

Відзначимо деякі властивості В -сплайнів необхідні нам надалі.

Насамперед зауважимо, що В -сплайн порядку r має своїм носієм (замикання множини, де він відмінний від нуля) проміжок

$$d_r = \left[-\frac{r+1}{2}h, \frac{r+1}{2}h \right],$$

тобто $B_{r,h}(x) \neq 0$ усередині відрізка d_r .

З вигляду $B_{0,h}$ маємо, що

$$\int_{-\infty}^{\infty} B_{r,h}(x) dt = \int_{d_r} B_{r,h}(x) dt = h. \quad (80)$$

У колі досліджуваних нами задач будуть використовуватися сплайни порядку 2 і 3, тобто кубічні та параболічні сплайни, тому приділимо увагу саме таким В -сплайнам.

Насамперед зазначимо (це легко одержати безпосередньо з визначення В -сплайнів), що

$$B_{3,h}(x) = \frac{1}{48} \begin{cases} (4 - 2t/h)^3 & (t \in [h, 2h]), \\ 3(2t/h)^3 - 12(2t/h)^2 + 32 & (t \in [0, h]), \\ -3(2t/h)^3 - 12(2t/h)^2 + 32 & (t \in [-h, 0]), \\ (4 + 2t/h)^3 & (t \in [-2h, -h]), \\ 0 & (|t| \geq 2h), \end{cases}$$

і графік $B_{3,h}(x)$ має вигляд

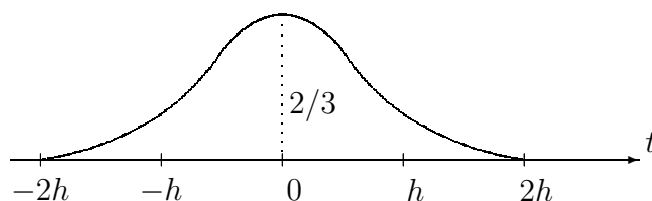


Рисунок 1: Кубічний В-сплайн.

Звідси маємо, що

$$B'_{3,h}(x) = \frac{1}{48h} \begin{cases} -6(4 - 2t/h)^2 & (t \in [h, 2h]), \\ 18(2t/h)^2 - 48(2t/h) & (t \in [0, h]), \\ -18(2t/h)^2 - 48(2t/h) & (t \in [-h, 0]), \\ 6(4 + 2t/h)^2 & (t \in [-2h, -h]), \\ 0 & (|t| \geq 2h), \end{cases}$$

На графіку це буде виглядати в такий спосіб:

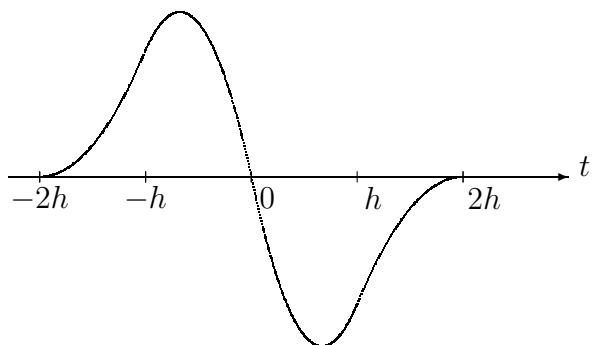


Рисунок 2: Перша похідна кубічного В-сплайну.

Крім того,

$$B''_{3,h}(x) = \frac{1}{48h^2} \begin{cases} 24(4 - 2t/h) & (t \in [h, 2h]), \\ 144t/h - 96 & (t \in [0, h]), \\ -144t/h - 96 & (t \in [-h, 0]), \\ 24(4 + 2t/h) & (t \in [-2h, -h]), \\ 0 & (|t| \geq 2h), \end{cases}$$

що виглядає так:

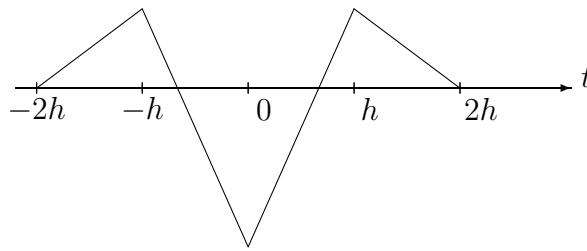


Рисунок 3: Друга похідна кубічного В-сплайну.

Крім того

$$B'''_{3,h}(x) = \frac{1}{48h^3} \begin{cases} -48 & (t \in [h, 2h]), \\ 144 & (t \in [0, h]), \\ -144 & (t \in [-h, 0]), \\ 48 & (t \in [-2h, -h]), \\ 0 & (|t| \geq 2h). \end{cases}$$

і графічно:

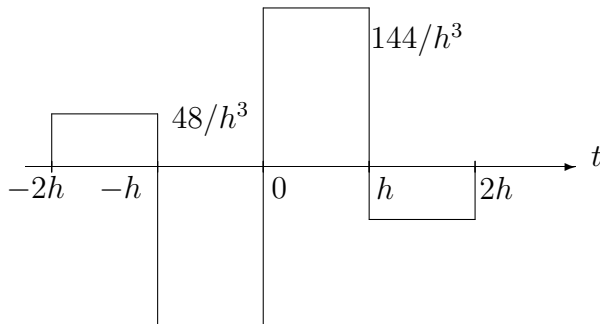


Рисунок 4: Третя похідна кубічного В-сплайну.

Наведемо деякі корисні співвідношення кубічного В - сплайну

$$B_{3,h}(0) = \frac{2}{3}, \tag{81}$$

$$B_{3,h} \left(\pm \frac{h}{2} \right) = \frac{23}{48}, \quad (82)$$

$$B_{3,h}(\pm h) = \frac{1}{6}, \quad (83)$$

$$B_{3,h} \left(\pm \frac{3h}{2} \right) = \frac{1}{48}, \quad (84)$$

$$B_{3,h} \left(\pm \frac{kh}{2} \right) = 0 \quad (|k| > 3), \quad (85)$$

$$\frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} B_{3,h}(x) dt = \frac{230}{384}, \quad (86)$$

$$\frac{1}{h} \int_{(\pm 1 - 1/2)h}^{(\pm 1 + 1/2)h} B_{3,h}(x) dt = \frac{76}{384}, \quad (87)$$

$$\frac{1}{h} \int_{(\pm 2 - 1/2)h}^{(\pm 2 + 1/2)h} B_{3,h}(x) dt = \frac{1}{384}, \quad (88)$$

$$\frac{1}{h} \int_{(k-1/2)h}^{(k+1/2)h} B_{3,h}(x) dt = 0 \quad (|k| > 2). \quad (89)$$

5.6 Кубічні сплайни мінімального дефекту.

Зрозуміло, що множина кубічних сплайнів мінімального дефекту з рівномірною решіткою – це множина всіх функцій вигляду

$$s_{3,h}(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} c_i B_{3,h}(t - ih). \quad (90)$$

Зрозуміло, що для будь-яких чисел c_i звуження сплайнів (90) на відрізок $[0, T]$ (де $T = nh$) є сплайном. Крім того, при будь-якому конкретному $t \in (ih, (i+1)h)$ у співвідношенні (90) використовується лише чотири доданки. Це дозволяє для $t \in [0, T]$ записати сплайни (90) у вигляді:

$$s_{3,h}(x) = \sum_{i=-1}^{n+1} c_i B_{3,h}(t - ih). \quad (91)$$

Записи такого роду будемо називати уявленням сплайнів за допомогою В-сплайнів.

Для $t \in [ih, (i+1)h]$

$$\begin{aligned} s_3(x) = s_{3,h}(x) = & c_{i-1} B_{3,h}(t - (i-1)h) + c_i B_{3,h}(t - ih) + \\ & + c_{i+1} B_{3,h}(t - (i+1)h) + c_{i+2} B_{3,h}(t - (i+2)h). \end{aligned} \quad (92)$$

Форма запису (92) не завжди зручна для практики. При $t \in [ih, (i+1)h]$ можна використовувати іншу форму запису:

$$s_3(x) = \frac{1}{6}(c_{i+1} + 4c_i + c_{i-1}) + \frac{1}{2h}(c_{i+1} - c_{i-1})(t - ih) +$$

$$+\frac{1}{2h^2}(c_{i+1}-2c_i+c_{i-1})(t-ih)^2+\frac{\Delta^2(c_{i+1}-c_i)}{6h^3}(t-ih)^3. \quad (93)$$

З співвідношення (92) і властивостей кубічних В-сплайнів, одержуємо значення сплайна і його похідних у вузлах:

$$s_3(ih) = \frac{c_{i+1} + 4c_i + c_{i-1}}{6}, \quad (94)$$

$$s'_3(ih) = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h}, \quad (95)$$

$$s''_3(ih) = \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2}, \quad (96)$$

$$s_3^{(3)}(ih) = \frac{c_{i+2} - 3c_{i+1} + 3c_i - c_{i-1}}{h^3} = \frac{\Delta^2(c_{i+1} - c_i)}{h^3}. \quad (97)$$

Звідси і із формули Тейлора в точці ih витікає, що кубічний многочлен, який задовольняє таким умовам, існує, єдиний і для $t \in [ih, (i+1)h]$ має вигляд:

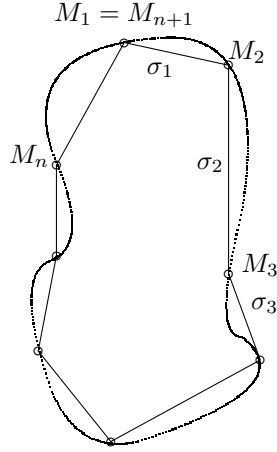
$$\begin{aligned} s_3(x) &= s_3(ih) + s'_3(ih)(t-ih) + \frac{1}{2!}s''_3(ih)(t-ih)^2 + \\ &+ \frac{1}{3!}s_3^{(3)}(ih)(t-ih)^3 = \frac{c_{i+1} + 4c_i + c_{i-1}}{6} + \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h}(t-ih) + \\ &+ \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{2!h^2}(t-ih)^2 + \frac{\Delta^2(c_{i+1} - c_i)}{3!h^3}(t-ih)^3. \end{aligned} \quad (98)$$

У деяких випадках більш зручним є використання запис сплайну $s_3(x)$ на проміжку $[ih, (i+1)h]$ через значення в точках $(i+1/2)h$:

$$\begin{aligned} s_3(x) &= \frac{c_{i+1} + c_i}{48} + \frac{23}{24} \left(\frac{c_{i+1} + c_i}{2} \right) + \\ &+ \left[(c_{i+1} - c_i) + \frac{1}{8}\Delta^2(c_{i+1} - c_i) \right] \left(\frac{t}{h} - i - \frac{1}{2} \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{c_{i+2} - c_{i+1}}{2} - \frac{c_i - c_{i-1}}{2} \right] \left(\frac{t}{h} - i - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{6}\Delta^2(c_{i+1} - c_i) \left(\frac{t}{h} - i - \frac{1}{2} \right)^3. \end{aligned} \quad (99)$$

Коефіцієнти c_i інтерполяційних сплайнів можна знайти з умов інтерполяції: з рівності (94) треба, якщо сплайн $s_3(x)$ інтерполює функцію $f(x)$ у точках ih , то

$$s_3(ih) = \frac{c_{i+1} + 4c_i + c_{i-1}}{6} = f_i \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$



Для періодичної функції треба врахувати, що $c_{-1} = c_{n-1}$, $c_0 = c_n$ і $c_1 = c_{n+1}$ маємо

$$\left\{ \begin{array}{l} 4c_0 + c_1 + c_{n-1} = 6f_0, \\ c_0 + 4c_1 + c_2 = 6f_1, \\ c_1 + 4c_2 + c_3 = 6f_2, \\ \dots\dots\dots \\ c_{n-3} + 4c_{n-2} + c_{n-1} = 6f_{n-2}, \\ c_0 + c_{n-2} + 4c_{n-1} = 6f_{n-1} \end{array} \right. \quad (100)$$

Матриця цієї системи має діагональну перевагу і, отже, система має один і тільки один розв'язок. Це розв'язок легко знайти за допомогою однієї з різновидів алгоритму прогону.

5.7 Опис кривих сплайнами.

Важливим застосуванням сплайнів є використання їх при описі плоских і просторових кривих.

У випадку, коли відомі точки $M_i = (x_i, y_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) кривої Γ , можна одержати опис цієї кривої через інтерполяційні сплайни мінімального дефекту. Для простоти розглянемо замкнену криву.

Нехай $\mathbf{x} = \{x_i\}_{i=1}^n$ і $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^n$ відповідно.

У зв'язку з тим, що точки описують замкнену криву, то $M_{n+1} = M_1$.

Через

$$\sigma_{i+1/2} = \sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2 + (y_{i+1} - y_i)^2} \quad (i = 0, 1, \dots, n-1) \quad (101)$$

позначимо довжину відрізка прямої, що з'єднує точки M_i і M_{i+1} .

Покладемо

$$\begin{aligned} t_0 = 0, \quad t_1 = \sigma_{1/2}, \quad t_2 = \sigma_{1/2} + \sigma_{3/2}, \quad t_3 = \sigma_{1/2} + \sigma_{3/2} + \sigma_{5/2}, \dots, \\ t_n = \sigma_{1/2} + \dots + \sigma_{n-1/2}. \end{aligned} \quad (102)$$

Інтерполяційним параметричним замкнутим кубічним сплайном по розбиттю $\Delta_n = \{t_i\}_{i=0}^n$ будемо називати функцію

$$s_3(\Gamma, \Delta_n, t) = (s_3(\mathbf{x}, \Delta_n, t), s_3(\mathbf{y}, \Delta_n, t)), \quad (103)$$

де $s_3(\mathbf{x}, \Delta_n)$ і $s_3(\mathbf{y}, \Delta_n)$ – періодичні сплайни, що задовольняють інтерполяційним умовам:

$$s_3(\mathbf{x}, \Delta_n, t_i) = x_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n), \quad (104)$$

$$s_3(\mathbf{y}, \Delta_n, t_i) = y_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n). \quad (105)$$

Алгоритм визначення коефіцієнтів періодичних сплайнів $s_3(\mathbf{x}, \Delta_n, t_i)$ і $s_3(\mathbf{y}, \Delta_n, t_i)$ наведений раніше.

6 Чисельне диференціювання і інтегрування.

Методи чисельного диференціювання і інтегрування засновані на тому, що якщо для $x \in [a, b]$

$$f(x) \approx s(x),$$

то

$$f'(x) \approx s'(x)$$

та

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b s(x) dx.$$

Використовуючи викладені раніше матеріали, одержимо формули чисельного диференціювання та інтегрування функцій.

Споконвічно найпростішою квадратурною формулою (формулою наближеного обчислення інтегралів) є формула прямокутників. У цьому випадку на кожному проміжку $[x_i, x_{i+1}]$ в якості даної функції беруть сталу, яка дорівнює одному значенню цієї функції. Це може бути $f(x_i)$, $f(x_{i+1})$, $f(x_{i+1/2})$ або будь-яке інше значення.

Прикладом квадратурної формули прямокутників може бути наступне співвідношення:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} h_{i+1/2} f_{i+1/2}.$$

Зокрема, якщо всі відрізки рівні між собою

$$h_{i+1/2} = \frac{b-a}{n},$$

то квадратурна формула прямокутників має дуже простий вигляд

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f_{i+1/2}.$$

Аналогічно, найпростішою формулою наближеного обчислення похідної буде

$$f'(x) \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1/2}}, \quad (x \in [x_i, x_{i+1}]),$$

породжена кусково-сталою функцією, яка інтерполює значення функції у вузлах, або

$$f'(x) \approx 2 \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}, \quad (x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}])$$

породжена кусково-сталою функцією, яка інтерполює значення функції в точках $x_{i+1/2}$.

6.1 Чисельне диференціювання.

Розглянемо задачу наближеного обчислення похідної. Найпростіша формула наближеного обчислення похідної виходить прямо з визначення похідної

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Звідси відразу одержуємо найбільш часто використовуваний (хоча далеко не єдиний) метод наближеного обчислення похідної

$$f'(x) \approx f'_h(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (106)$$

— метод центральних різниць.

Як правило, при використанні центральних різниць крок розбиття вибирається від 10^{-3} до 10^{-4} . Чи є цей вибір випадковим? Здавалося б, із (106) витікає, що чим менше значення h , тим вище точність обчислення похідної. Однак на практиці цей постулат є невірним. Наприклад, якщо похибка обчислення дорівнює 10^{-9} і величина кроку h вибирається порядку 10^{-10} , то похибка обчислення похідної відповідно до формули (106), буде дорівнювати $10^{-9}10^{10} = 10$. Таким чином, вибрати крок h занадто малим не доцільно. Уточнимо, що мається на увазі під "занадто малим".

Розглянемо наступну задачу: у яких рамках варто вибрати крок h , щоб якнайточніше обчислити похідну $f'(x)$?

Використовуючи формулу Тейлора

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{3!}f'''(x)h^3 + \dots$$

і

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 - \frac{1}{3!}f'''(x)h^3 + \dots,$$

одержуємо

$$f'_h(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{1}{3!}f'''(x)h^2 + \dots \quad (107)$$

Звідси маємо, що

$$|f'(x) - f'_h(x)| = \frac{1}{3!}|f'''(x)|h^2 + \dots \quad (108)$$

Нехай задана не функція $f(x)$, а її наближене (з точністю до ε) значення $\tilde{f}(x)$, тоді в реальній ситуації ми маємо не $f'_h(x)$, а $\tilde{f}'_h(x)$. Тоді помилка обчислення похідної по формулі (106) буде оцінюватися в такий спосіб:

$$\left| f'(x) - \tilde{f}'_h(x) \right| = \left| f'(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} \right| \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \right| + \left| \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} \right| = \\ &= |f'(x) - f'_h(x)| + \frac{1}{2h} |f(x+h) - \tilde{f}(x+h) - f(x-h) + \tilde{f}(x-h)|. \end{aligned}$$

Звідси, з (108), і того, що $|f(x) - \tilde{f}(x)| \leq \varepsilon$ відразу одержуємо

$$|f'(x) - \tilde{f}'_h(x)| \leq \frac{1}{3!} |f'''(x)| h^2 + \frac{\varepsilon}{h} + O(h^3).$$

Зневажаючи величиною $O(h^3)$, одержуємо, що задача найбільш точного обчислення похідної звелася до мінімізації по h величини

$$\Psi(h) = \frac{1}{3!} |f'''(x)| h^2 + \frac{\varepsilon}{h}.$$

Ця задача легко вирішується традиційними методами математичного аналізу.

Обчислюючи похідну по h , одержуємо

$$\frac{d\Psi}{dh} = \frac{1}{3} |f'''(x)| h - \frac{\varepsilon}{h^2} = \frac{|f'''(x)| h^3 - 3\varepsilon}{3h^2},$$

і критичними точками будуть $h = 0$ і

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{|f'''(x)|}}.$$

Неважко переконатися в тому, що мінімум досягається при останньому значенні h і

$$\min_h \Psi(h) = \Psi\left(\sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{|f'''(x)|}}\right) = \frac{\sqrt[3]{9}}{2} \sqrt[3]{\varepsilon^2 |f'''(x)|}.$$

Більш того, можна показати, що в (109) має місце рівність, тобто

$$\inf_h \sup_{\tilde{f}: \|f - \tilde{f}\| \leq \varepsilon} \sup_{f \in W_\infty^3} |f'(x) - \tilde{f}'_h| = \frac{\sqrt[3]{9}}{2} \sqrt[3]{\varepsilon^2 |f'''(x)|}. \quad (109)$$

Природно, що на практиці величина третьої похідної не відома, але нам потрібна не ця величина, а її порядок. В обчислювальній практиці можна вважати, що третя похідна лежить в границях від одиниці до тисячі. Виходячи з точності, яка досягається на комп'ютері, одержуємо, що величина кроку повинна лежати в межах

$$10^{-4} < h < 10^{-3}.$$

У такий спосіб переконуємося, що рекомендації з вибору кроку не випадкові.

6.2 Рішення задачі чисельного диференціювання на класі W_∞^r ($r = 2, 3$).

У цьому параграфі ми розглянемо точну постановку задачі про вибір кроку при чисельному диференціюванні на класі W_∞^r ($r = 2, 3$).

Нехай заданий клас функцій \mathfrak{M} і \mathfrak{L} — множина лінійних операторів діючих з $C_{(-\infty, \infty)}$ в $C_{(-\infty, \infty)}$ (наприклад, вигляду (106)).

Величину

$$\mathbb{E}(f, A) = \|f' - A(f)\|$$

будемо називати похибкою відновлення похідної оператором A , величину

$$\mathbb{E}(\mathfrak{M}, A) = \sup_{f \in \mathfrak{M}} \mathbb{E}(f, A)$$

— похибкою відновлення похідної оператором A на класі \mathfrak{M} , а

$$\mathbb{E}(\mathfrak{M}, \mathfrak{L}) = \inf_{A \in \mathfrak{L}} \mathbb{E}(\mathfrak{M}, A)$$

похибкою найкращого методу відновлення похідної оператором з \mathfrak{L} на класі \mathfrak{M} .

Для функцій $f(x) \in \mathfrak{M}$ через $\mathfrak{F}(\mathfrak{M}, \varepsilon)$ позначимо множину всіх функцій $\tilde{f}(x)$ вигляду

$$\tilde{f}(x) = f(x) + \sigma(x),$$

де $\|\sigma\|_C \leq \varepsilon$.

Завдання полягає в тім, щоб вибрати оператор $\mathfrak{A} \in \mathfrak{L}$ такий, що

$$\mathbb{E}(\mathfrak{F}(\mathfrak{M}, \varepsilon), \mathfrak{A}) = \mathbb{E}(\mathfrak{F}(\mathfrak{M}, \varepsilon), \mathfrak{L}).$$

Розглянемо конкретизацію цієї задачі для операторів вигляду (106) і $r = 2, 3$. Знайдемо величину

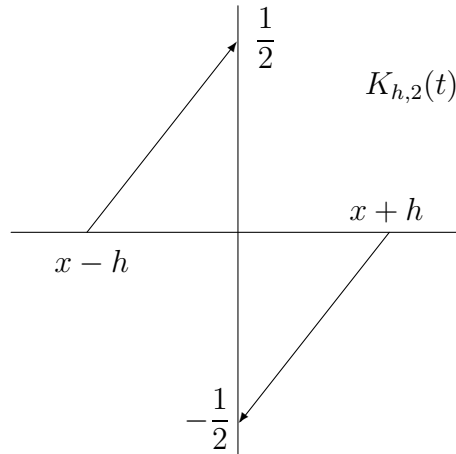
$$\inf_h \sup \left\{ \|f' - \tilde{f}'_h\|_C \mid f \in W_\infty^r, \|f - \tilde{f}\| \leq \varepsilon \right\}.$$

Розглядаючи задачу про чисельне обчислення похідної ми допустили деяку неточність — зневажили величиною $O(h^3)$. У даному параграфі ми проведемо більш акуратні викладки. Використовуючи інтегрування частинами, неважко переконатися в вірності співвідношення

$$f'(x) - f'_h(x) = - \int_{x-h}^{x+h} K_{h,2}(t) y''(t) dt = \int_{x-h}^{x+h} K_{h,3}(t) y'''(t) dt,$$

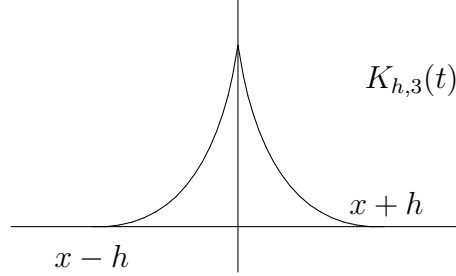
де

$$K_{h,2}(t) = \begin{cases} \frac{1}{2h}(t - x + h), & (t \in (x - h, x)), \\ \frac{1}{2h}(t - x - h), & (t \in (x, x + h)), \end{cases}$$



i

$$K_{h,3}(t) = \begin{cases} \frac{1}{4h}(t-x+h)^2, & (t \in (x-h, x)), \\ \frac{1}{4h}(t-x-h)^2, & (t \in (x, x+h)). \end{cases}$$



Тоді для $r = 2, 3$ маємо

$$\begin{aligned} & \sup_{\tilde{f}: \|f-\tilde{f}\| \leq \varepsilon} \sup_{f \in W_\infty^r} |f'(x) - \tilde{f}'_h| \leq \\ & \leq \sup_{f \in W_\infty^r} |f'(x) - f'_h| + \frac{\varepsilon}{h} = \sup_{f \in W_\infty^r} \left| \int_{x-h}^{x+h} K_{h,r}(t) y^{(r)}(t) dt \right| + \frac{\varepsilon}{h} \leq \\ & \leq \sup_{f \in W_\infty^r} |y^{(r)}(t)| \int_{x-h}^{x+h} |K_{h,r}(t)| dt + \frac{\varepsilon}{h} \leq \int_{x-h}^{x+h} |K_{h,r}(t)| dt + \frac{\varepsilon}{h} = \frac{h^{r-1}}{r!} + \frac{\varepsilon}{h}. \end{aligned}$$

Зауважуючи, що

$$\min_h \left(\frac{h^{r-1}}{r!} + \frac{\varepsilon}{h} \right) = \frac{h_0^{r-1}}{r!} + \frac{\varepsilon}{h_0} = \frac{r}{r-1} \sqrt[r]{\frac{r-1}{r!} \varepsilon^2}$$

при

$$h_0 = \sqrt[r]{\frac{\varepsilon r!}{r-1}},$$

одержуємо для $r = 2, 3$

$$\inf_h \sup \left\{ \|f' - \tilde{f}'_h\|_C \mid f \in W_\infty^r, \|f - \tilde{f}\| \leq \varepsilon \right\} = \frac{r}{r-1} \sqrt[r]{\frac{r-1}{r!} \varepsilon^2}.$$

6.3 Уточнені формули обчислення похідних.

Результатом попередніх параграфів є той факт, що зменшення кроку при обчисленні похідних по формулі (106) не приводить до одержання більш точного значення похідної.

Поставимо наступну задачу: якщо зменшення кроку не приводить до підвищення якості наближення, то можливо варто змінити формулу обчислення похідної? Чи

існують такі методи? Відповідь на це питання позитивна. Приведемо один з таких підходів.

Використовуючи формулу Тейлора, з (106) дістаємо

$$f'_h(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{1}{3!}f'''(x)h^2 + \frac{1}{5!}f^{(5)}(x)h^4 + \dots$$

і

$$f'_{2h}(x) = \frac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h} = f'(x) + \frac{4}{3!}f'''(x)h^2 + \frac{32}{5!}f^{(5)}(x)h^4 + \dots$$

Звідси маємо

$$\frac{4f'_h(x) - f'_{2h}(x)}{3} = f'(x) - \frac{28}{5!}f^{(5)}(x)h^4 + \dots \quad (110)$$

Розписуючи лінійну комбінацію, що знаходиться в лівій частині, одержуємо уточнену формулу обчислення похідної:

$$f'_{h,2}(x) = \frac{4f'_h(x) - f'_{2h}(x)}{3} = \frac{1}{12h}(f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h))$$

і

$$f'(x) - f'_{h,2}(x) = \frac{28}{5!}f^{(5)}(x)h^4 + \dots = \frac{7}{30}f^{(5)}(x)h^4 + \dots$$

Як і в попередньому випадку, вибирати довільним образом крок h не можна. Яку ж рекомендацію з вибору h можна дати при використанні формули (110)?

Нехай відоме наближене (з точністю до ε) значення $\tilde{f}(x)$ функції $f(x)$, тоді зневажаючи величиною $O(h^5)$, маємо

$$\begin{aligned} |f'(x) - \tilde{f}'_{h,2}(x)| &\leq |f'(x) - f'_{h,2}(x)| + \frac{3\varepsilon}{2h} = \\ &= \frac{7}{30}f^{(5)}(x)h^4 + \frac{3\varepsilon}{2h} = \frac{7f^{(5)}(x)h^5 + 45\varepsilon}{2h}. \end{aligned}$$

Неважко переконатися, що мінімум цієї величини досягається при

$$h = \sqrt[5]{\frac{45\varepsilon}{28f^{(5)}(x)}}$$

і

$$\inf_h \sup_{\tilde{f}: \|f-\tilde{f}\| \leq \varepsilon} |f'(x) - \tilde{f}'_{h,2}| \leq \frac{7}{30} \sqrt[5]{\frac{45^4 \varepsilon^4 f^{(5)}(x)}{28^4}}.$$

У такий спосіб рекомендується виделка, значень кроку для методу (110) – $[0.01, 0.001]$.

Зрозуміло, що можна одержати і більш точні формули обчислення похідної.

Природно виникає питання: якою формулою наближеного обчислення похідної треба користуватися?

Як правило, якщо функція досить гладка, то використовуються уточнені формули обчислення похідних. Якщо ж функція не має неперервної четвертої похідної, то варто використовувати формулу (106).

Помітимо, що використання уточнених формул наближеного обчислення похідних доцільно в тих задачах, де використовуються великі кроки h .

6.4 Чисельне інтегрування. Формула трапецій.

На кожному проміжку $[x_i, x_{i+1}]$ ($i = 0, 1, \dots, n-1$) інтерполяційна ламана може бути записана у вигляді

$$s_1(f, \Delta_n, x) = \frac{1}{2}f_i(1 - \tau) + \frac{1}{2}f_{i+1}(1 + \tau),$$

де

$$\tau = 2 \frac{x - x_{i+1/2}}{h_{i+1/2}}$$

та

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{1}{2}h_{i+1/2}, \quad h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i, \quad (i = 0, 1, \dots, n-1).$$

Таким чином

$$s'_1(f, \Delta_n, x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1/2}}.$$

Тоді звідси отримуємо

$$f'(x) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1/2}} + \frac{1}{8}h_{i+1/2}f''(\xi_{i+1/2}),$$

де $\xi_{i+1/2} \in [x_i, x_{i+1}]$.

З іншого боку,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} s_1(f, \Delta_n, x) dx = \frac{1}{2}h_{i+1/2}(f_{i+1} + f_i),$$

отже, звідси і з (63) одержуємо

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(s_1(f, \Delta_n, x) + \frac{1}{8}h_{i+1/2}^2 f''(\xi_{i+1/2}) (\tau^2 - 1) \right) dx = \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{1}{2}h_{i+1/2}(f_{i+1} + f_i) + \frac{1}{12}h_{i+1/2}^3 f''(\xi_{i+1/2}) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} h_{i+1/2}(f_{i+1} + f_i) + R(f, \Delta_n). \end{aligned} \quad (111)$$

Отримана формула наближеного обчислення інтеграла називається формулою трапецій. Похибка квадратурної формули $R(f, \Delta_n)$ залежить, як від самої функції, так і від розбиття Δ_n відрізка $[a, b]$.

Розглянемо наступну задачу: Знайти таке розбиття Δ_n^0 , при якому похибка квадратурної формули (111) буде найменшою, тобто

$$R(f, \Delta_n^0) = \min_{\Delta_n} R(f, \Delta_n).$$

Використовуючи формулу Тейлора, одержуємо

$$\frac{1}{12}h_{i+1/2}^3 f''(\xi_{i+1/2}) = \frac{1}{12} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt[3]{f''(x)} dx \right)^3 + C_i(f)h_{i+1/2}^4.$$

$$\begin{aligned}
R(f, \Delta_n) &= \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{1}{12} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt[3]{f''(x)} dx \right)^3 + C_i(f) h_{i+1/2}^4 \right) = \\
&= \frac{1}{12} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt[3]{f''(x)} dx \right)^3 + C(f) h_{i+1/2}^3.
\end{aligned} \tag{112}$$

Лема 3 Нехай $\alpha > 0$ і $\mathcal{C} > 0$. Тоді

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^n C_i^\alpha \mid C_i \geq 0, \sum_{i=1}^n C_i = \mathcal{C} \right\} = n \left(\frac{\mathcal{C}}{n} \right)^\alpha.$$

Тобто у множині векторів $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_n)$ з невід'ємними координатами, що задовольняють умові $\sum_{i=1}^n C_i = \mathcal{C}$, найменше значення величини $\sum_{i=1}^n C_i^\alpha$ досягається, коли всі C_i рівні між собою, тобто коли

$$C_i = C_i^0 = \frac{\mathcal{C}}{n} \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Для того, щоб довести дане твердження використаємо метод невизначених множників Лагранжа.

Виписемо функцію цілі

$$L = \lambda_0 \sum_{i=1}^n C_i^\alpha + \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^n C_i - \mathcal{C} \right)$$

Тоді

$$\frac{\partial L}{\partial C_i} = \lambda_0 \cdot \alpha \cdot C_i^{\alpha-1} + \lambda_1 = 0$$

що те ж ,

$$\lambda_0 \cdot \alpha \cdot \left(C_i^{\alpha-1} + \lambda_2 \right) = 0,$$

де

$$\lambda_2 = \frac{\lambda_1}{\lambda_0 \cdot \alpha}.$$

Отже,

$$C_i = -\lambda_2^{\frac{1}{\alpha-1}}$$

і

$$\sum_{i=1}^n C_i = -\sum_{i=1}^n \lambda_2^{\frac{1}{\alpha-1}} = -\lambda_2^{\frac{1}{\alpha-1}} n = \mathcal{C}.$$

Таким чином,

$$\lambda_2^{\frac{1}{\alpha-1}} = -\frac{\mathcal{C}}{n},$$

або, що те ж ,

$$C_i = \frac{\mathcal{C}}{n}.$$

Звідси одержуємо, що, якщо функція $f(x)$ така, що $f''(x)$ обертається в нуль лише в скінченному числі точок, то похибка наближення квадратурної формули трапецій буде найменшою для розбиття Δ_n^0 з вузлами, які визначаються з рівностей

$$\int_{x_i^0}^{x_{i+1}^0} \sqrt[3]{|f''(x)|} dx = \frac{1}{n} \int_a^b \sqrt[3]{|f''(x)|} dx$$

і, при цьому,

$$\min_{\Delta_n} R(f, \Delta_n) = \frac{1}{12 n^2} \left(\int_a^b \sqrt[3]{|f''(x)|} dx \right)^3 + \frac{C(f)}{n^3}.$$

6.5 Чисельне інтегрування. Формула Сімпсона.

Із співвідношення (66) маємо, що парабола, яка інтерполює в точках $x_i, x_{i+1/2}$ і x_{i+1} значення функції $f(x)$ буде мати вигляд

$$s_{2,2}(f, \Delta_n, x) = \frac{1}{2} f_i \tau (\tau - 1) + f_{i+1/2} (1 - \tau^2) + \frac{1}{2} f_{i+1} \tau (1 + \tau).$$

Тоді

$$f'(x) \approx s'_{2,2}(f, \Delta_n, x) = \frac{1}{h_{i+1/2}} \left(f_i (2\tau - 1) - 4 f_{i+1/2} \tau + f_{i+1} (1 + 2\tau) \right).$$

Крім того, значення інтеграла від цієї функції дорівнює

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} s_{2,2}(f, \Delta_n, x) dx = \frac{h_{i+1/2}}{6} (f_i + 4 f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

та

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{h_{i+1/2}}{6} (f_i + 4 f_{i+1/2} + f_{i+1}).$$

У такий спосіб одержуємо наступну формулу наближеного обчислення інтеграла

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{6} \sum_{i=0}^{n-1} h_{i+1/2} (f_i + 4 f_{i+1/2} + f_{i+1}). \quad (113)$$

Ця формула називається формулою Сімпсона.

Як видно з побудови, вона точна для всіх многочленів степеня два

$$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2.$$

Більше того, насправді вона ще краще: вона точна для всіх многочленів вигляду

$$P_3(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3.$$

Дійсно, для

$$P_3(x) = P_2(x) + a_3 x^3$$

маємо

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} P_3(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x) dx + a_3 \int_{x_i}^{x_{i+1}} x^3 dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x) dx + \frac{a_3}{4} (x_{i+1}^4 - x_i^4).$$

З однієї сторони, формула Сімпсона дає співвідношення

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x) dx = \frac{h_{i+1/2}}{6} (P_2(x_i) + 4 P_2(x_{i+1/2}) + P_2(x_{i+1})),$$

а з іншого боку, можна записати

$$\frac{a_3}{4} (x_{i+1}^4 - x_i^4) = \frac{h_{i+1/2}}{6} (a_3 (x_i)^3 + 4 a_3 (x_{i+1/2})^3 + a_3 (x_{i+1})^3),$$

що доводить рівність

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} P_3(x) dx = \frac{h_{i+1/2}}{6} (P_3(x_i) + 4P_3(x_{i+1/2}) + P_3(x_{i+1})).$$

Зауважимо, що формули, точні на алгебраїчних многочленах степеня n називаються квадратурними формулами Гауса. Таким чином формула Сімпсона є квадратурною формулою Гауса порядку три.

Як і у випадку формули трапецій, для формули Сімпсона є актуальною задача вибору вузлів квадратурної формули x_i так, щоб похибка обчислення інтеграла функції за допомогою формули Сімпсона була найменшою.

Аналогічно (67) отримуємо рівність

$$\begin{aligned} f(x) - s_{2,2}(f, \Delta_n, x) &= \frac{1}{24} h_{i+1/2}^3 f_{i+1/2}''' \tau (\tau^2 - 1) + \\ &+ \frac{1}{384} h_{i+1/2}^4 f_{i+1/2}^{(4)} \tau^2 (1 - \tau^2) + C(f) h_{i+1/2}^5, \end{aligned}$$

звідки маємо

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s_{2,2}(f, \Delta_n, x) dx + \frac{1}{2690} h_{i+1/2}^5 f_{i+1/2}^{(4)} + C(f) h_{i+1/2}^6,$$

отже, одержуємо

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \\ &= \frac{1}{6} \sum_{i=0}^{n-1} h_{i+1/2} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) + R_2(f, \Delta_n). \end{aligned}$$

Використовуючи формулу Тейлора, одержуємо

$$R_2(f, \Delta_n) = \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{1}{2690} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt[5]{f^{(4)}(x)} dx \right)^5 + C_i(f) h_{i+1/2}^6 \right). \quad (114)$$

Звідси і з леми 3 одержуємо, що якщо функція $f(x)$ така, що $f^{(4)}(x)$ неперервна і обертається в нуль лише в скінченному числі точок, то похибка квадратурної формули Сімпсона буде найменшою для розбиття Δ_n^0 з вузлами, які визначаються з рівностей

$$\int_{x_i^0}^{x_{i+1}^0} \sqrt[5]{|f^{(4)}(x)|} dx = \frac{1}{n} \int_a^b \sqrt[5]{|f^{(4)}(x)|} dx,$$

і при цьому

$$\min_{\Delta_n} R(f, \Delta_n) = \frac{1}{2690 n^4} \left(\int_a^b \sqrt[5]{|f^{(4)}(x)|} dx \right)^5 + \frac{C(f)}{n^5}.$$

6.6 Інтегрування функцій, які швидко осцилюють.

При обчисленні коефіцієнтів Фур'є потрібно обчислити інтеграли вигляду

$$\int_a^b \cos(\alpha) f(x) dx, \quad \int_a^b \sin(\alpha) f(x) dx.$$

При великих значеннях параметру α неефективно використовувати квадратурні формули, засновані на заміні сплайнами підінтегральної функції. Більш зручні формули виходять, якщо функції $\sin \alpha$ і $\cos \alpha$ розглядати в якості вагових функцій, а сплайном наближати лише функцію $f(x)$.

Розглянемо інтеграл

$$\int_a^b \exp(i\alpha x) s_1(f, \Delta_n, x) dx = \\ = \sum_{k=0}^{n-1} h_{k+1/2} \int_{-1}^1 \exp(i\alpha(x_{k+1/2} + h_{k+1/2}\tau/2)) \frac{1}{2} (f_k(1-\tau) + f_{k+1}(1+\tau)) d\tau,$$

де $i = \sqrt{-1}$.

Інтегруючи частинами, одержуємо

$$\int_a^b \exp(i\alpha x) s_1(f, \Delta_n, x) dx = -\frac{i}{\alpha} f_0 \exp(i\alpha x_0) - \frac{i}{\alpha} f_n \exp(i\alpha x_n) + \\ + \frac{1}{\alpha^2} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\exp(i\alpha x_{k+1}) - \exp(i\alpha x_k)}{h_{k+1/2}} (f_{k+1} - f_k).$$

Виділяючи дійсну і умовну частину, маємо

$$\int_a^b \cos(\alpha x) s_1(f, \Delta_n, x) dx = -\frac{1}{\alpha} f_0 \sin(\alpha x_0) + \frac{1}{\alpha} f_n \sin(\alpha x_n) + \\ + \frac{1}{\alpha^2} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\cos(\alpha x_{k+1}) - \cos(\alpha x_k)}{h_{k+1/2}} (f_{k+1} - f_k)$$

та

$$\int_a^b \sin(\alpha x) s_1(f, \Delta_n, x) dx = \frac{1}{\alpha} f_0 \cos(\alpha x_0) - \frac{1}{\alpha} f_n \cos(\alpha x_n) + \\ + \frac{1}{\alpha^2} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\sin(\alpha x_{k+1}) - \sin(\alpha x_k)}{h_{k+1/2}} (f_{k+1} - f_k).$$

Оцінимо похибку використання цієї квадратурної формули:

$$\left| \int_a^b \sin(\alpha x) f(x) dx - \int_a^b \sin(\alpha x) s_1(f, \Delta_n, x) dx \right| \leq \\ \leq \|f - s_1(f, \Delta_n)\|_{C[a,b]} \int_a^b |\sin(\alpha x)| dx \leq (b-a) \|f - s_1(f, \Delta_n)\|_{C[a,b]}.$$

7 Чисельні методи розв'язку диференціальних рівнянь.

Задача розв'язку диференціальних рівнянь складніше задачі обчислення інтегралів, і частка задач, які дозволяють знайти розв'язок у явному вигляді, навіть для звичайних диференціальних рівнянь досить мала.

7.1 Використання формули Тейлора для розв'язку задачі Коші.

Розглянемо задачу Коші

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} \quad (115)$$

де $f(x, y)$ функція, аналітична в точці (x_0, y_0) .

Диференціюючи обидві частини диференціального рівняння по змінній x , одержуємо

$$\begin{aligned} y'' &= f'_x(x, y) + f'_y(x, y)y', \\ y''' &= f''_{xx}(x, y) + 2f''_{xy}(x, y)y' + f''_{yy}(x, y)y'^2 + f'_y(x, y)y'', \dots \end{aligned}$$

Підставляючи $x = x_0, y = y_0$, послідовно одержуємо значення

$$y'(x_0), y''(x_0), y'''(x_0), \dots$$

Використовуючи отримані значення у формулі Тейлора, одержуємо наближене значення розв'язку даного диференціального рівняння

$$y(x) \approx \sum_{\nu=0}^n \frac{y^{(\nu)}(x_0)}{\nu!} (x - x_0)^\nu. \quad (116)$$

Якщо значення $|x - x_0|$ менше радіуса збіжності ряду

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{y^{(\nu)}(x_0)}{\nu!} (x - x_0)^\nu,$$

то метод сходиться, в іншому випадку похибка запропонованого методу не прямує до нуля при $n \rightarrow \infty$, тобто пропонується застосувати не можна.

7.2 Метод Ейлера

З формули (116) при $n = 1$ одержуємо

$$y_{i+1} = y_i + h_{i+1/2} f(x_i, y_i) \quad (117)$$

з точністю до порядку $h_{i+1/2}^2$.

Метод послідовного отримання значень розв'язку (117) задачі Коші (115) називається методом Ейлера. Однак сфера використання методу Ейлера обмежена великою похибкою цього методу. Приведемо одну його модифікацію – метод Ейлера з ітераціями.

Зрозуміло, що

$$y(x+h) = y(x) + \int_0^h y'(x+t) dt. \quad (118)$$

Використовуючи формулу трапецій, звідси одержуємо

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + \frac{h}{2} (y'(x) + y'(x+h)) + Ch^3 = \\ &= y(x) + \frac{h}{2} (f(x, y(x)) + f(x+h, y(x+h))) + Ch^3. \end{aligned}$$

Отже, з точністю до порядку $O(h_{i+1/2}^3)$ маємо

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h_{i+1/2}}{2} (f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})).$$

У такий спосіб можна записати

$$y_{i+1}^{(0)} = y_i + h_{i+1/2} f(x_i, y_i) \quad (119)$$

і для $k = 1, 2, \dots$

$$y_{i+1}^{(k)} = y_i + \frac{h_{i+1/2}}{2} (f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k-1)})). \quad (120)$$

Для заданої похибки ε ітерації проводяться доти, поки не виконається нерівність

$$|y_{i+1}^{(k)} - y_{i+1}^{(k-1)}| \leq \varepsilon, \quad (121)$$

тут

$$y_{i+1} = y_{i+1}^{(k)}.$$

Якщо для 3-4 ітерацій нерівність (121) не виконується, то величину кроку $h_{i+1/2}$ зменшуємо вдвічі і знову використовуємо розрахункові формули (119) – (120).

7.3 Метод Рунге-Кутта.

Мала точність методу Ейлера стримує широке його використання.

Якоюсь мірою цей метод можна підправити, щоб підвищити його точність. Саме на цьому і побудований метод Рунге-Кутта, який дозволяє збільшити точність наближеного розв'язку задачі Коші на кожному кроці до порядку h^5 .

Існує багато варіантів методу Рунге-Кутта, наведемо найпоширеніший алгоритм.

Для задачі Коші

$$\begin{cases} y' = f(x, y), \\ y(x_n) = y_n \end{cases}$$

проводяться послідовні обчислення

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= h f(x_n, y_n), \\ \alpha_2 &= h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\alpha_1}{2}\right), \\ \alpha_3 &= h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\alpha_2}{2}\right), \\ \alpha_4 &= h f(x_n + h, y_n + \alpha_3), \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6} (\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4). \end{aligned}$$

Геометрично цей процес можна представити в такий спосіб: у точці (x_n, y_n) обчислюється тангенс кута нахилу α_1/h , використовуючи його, ідемо на половину кроку вперед і беремо тангенс кута нахилу в новій точці. Використовуючи новий тангенс кута нахилу α_2/h , знову йдемо з точки (x_n, y_n) уперед на півкроку і знову беремо тангенс

кута нахилу α_3/h . Взявши останнє значення, знову йдемо із точки (x_n, y_n) , але вже з повним кроком, після чого одержуємо тангенс кута нахилу α_4/h . Знайдемо середнє значення отриманих тангенсів кутів нахилу з вагами $1/6, 1/3, 1/3, 1/6$, в результаті одержуємо середнє значення тангенса кута нахилу. Використовуючи отримане значення, робимо остаточний крок від точки (x_n, y_n) до точки (x_{n+1}, y_{n+1}) .

Якщо $f(x, y)$ не залежить від y , то усереднення можна проводити згідно формули Сімпсона. У цьому випадку залишковий член буде пропорційний h^5 .

7.4 Розв'язок звичайних лінійних диференціальних рівнянь другого порядку методом різниць

Розглянемо задачу

$$\begin{aligned} y'' + p(x)y' + q(x)y &= f(x), \\ y(0) &= y_0, \\ y(x_k) &= y_k. \end{aligned} \quad (122)$$

З співвідношення (38) маємо

$$y''(x) \approx \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + O(h^4) \quad (123)$$

та

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + \frac{h^2}{6}y^{(3)}(x) + O(h^4). \quad (124)$$

Тоді звідси і з (122) одержуємо різницеву схему

$$\begin{aligned} &\frac{y(x_i+h) - 2y(x_i) + y(x_i-h)}{h^2} + \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x_i) + \\ &+ p(x_i) \left(\frac{y(x_i+h) - y(x_i-h)}{2h} + \frac{h^2}{6}y^{(3)}(x_i) \right) + q(x_i)y(x_i) = f(x_i). \end{aligned}$$

Думаючи $\varphi(x_i) = \varphi_i$, перепишемо останнє співвідношення у вигляді

$$y_{i+1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_i}{2h} \right) + y_i \left(q_i - i - \frac{2}{h^2} \right) + y_{i-1} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_i}{2h} \right) + \frac{h^2}{12} \left(y_i^{(4)} + 2p_i y_i^{(3)} \right) = f_i. \quad (125)$$

Продиференціюємо співвідношення (122)

$$y''' + p'(x)y' + p(x)y'' + q'(x)y + q(x)y' = f'(x)$$

і згрупуємо доданки

$$y''' + p(x)y'' + y'(q(x) + p'(x)) + q'(x)y = f'(x),$$

після чого ще раз знайдемо похідну

$$y^{(4)} + p(x)y''' + p'(x)y'' + y''(q(x) + p'(x)) + y'(q'(x) + p''(x)) + q''(x)y + q'(x)y' = f''(x),$$

або, що те ж,

$$y^{(4)} + p(x)y''' + y''(q(x) + 2p'(x)) + y'(2q'(x) + p''(x)) + q''(x)y = f''(x),$$

i

$$y^{(4)} + p(x)y''' = f''(x) - y''(q(x) + 2p'(x)) - y'(2q'(x) + p''(x)) - q''(x)y,$$

а також

$$y''' = f'(x) - p(x)y'' - y'(q(x) + p'(x)) - q'(x)y.$$

Перемножимо останню рівність на $p(x)$ і, підсумовуючи з попередньою, одержимо

$$\begin{aligned} y^{(4)} + 2p(x)y''' &= f''(x) - y''(q(x) + 2p'(x)) - y'(2q'(x) + p''(x)) - q''(x)y + \\ &+ f'(x)p(x) - p^2(x)y'' - y'(q(x) + p'(x))p(x) - q'(x)p(x)y = \\ &= f''(x) + f'(x)p(x) - y''(q(x) + 2p'(x) + p^2(x)) - \\ &- y'(2q'(x) + p''(x) + q(x) + p'(x)) - y(q''(x) + q'(x)p(x)). \end{aligned}$$

Звідси і з (124) і (123) отримуємо

$$\begin{aligned} &y_i^{(4)} + 2p_i y_i''' = \\ &= f_i'' + f_i' p_i - i - (q_i + 2p_i' + p_i^2) \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \frac{h^2}{12} y_i^{(4)} + O(h^4) \right) - \\ &- (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i') \left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \frac{h^2}{6} y_i^{(3)} + O(h^4) \right) - y_i(q_i'' + q_i' p_i) = \\ &= \frac{1}{2h^2} y_{i+1} \left(-2(q_i + 2p_i' + p_i^2) - (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i')h \right) + \\ &\quad + \frac{1}{h^2} y_i \left(2(q_i + 2p_i' + p_i^2) - y_i(q_i'' + q_i' p_i)h^2 \right) + \\ &\quad + \frac{1}{2h^2} y_{i-1} \left(-2(q_i + 2p_i' + p_i^2) + (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i')h \right) + \\ &+ f_i'' + f_i' p_i + \frac{h^2}{12} \left(-(q_i + 2p_i' + p_i^2) y_i^{(4)} - 2(2q_i' + p_i'' + q_i + p_i') y_i^{(3)} \right) + O(h^4). \end{aligned}$$

Підставимо отримане співвідношення в (125)

$$\begin{aligned} &y_{i+1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_i}{2h} \right) + y_i \left(q_i - i - \frac{2}{h^2} \right) + y_{i-1} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_i}{2h} \right) + \\ &+ \frac{h^2}{12} \left(\frac{1}{2h^2} y_{i+1} \left(-2(q_i + 2p_i' + p_i^2) - (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i')h \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{h^2} y_i \left(2(q_i + 2p_i' + p_i^2) - y_i(q_i'' + q_i' p_i)h^2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2h^2} y_{i-1} \left(-2(q_i + 2p_i' + p_i^2) + (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i')h \right) + \right. \\ &\quad \left. + f_i'' + f_i' p_i + \frac{h^2}{12} \left(-(q_i + 2p_i' + p_i^2) y_i^{(4)} - 2(2q_i' + p_i'' + q_i + p_i') y_i^{(3)} \right) \right) = f_i. \end{aligned} \tag{126}$$

Розкриємо дужки і приведемо подібні

$$y_{i+1} \left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_i}{2h} + \frac{1}{24} \left(-2(q_i + 2p_i' + p_i^2) - (2q_i' + p_i'' + q_i + p_i')h \right) \right) + \tag{127}$$

$$\begin{aligned}
& + y_i \left(q_i - i - \frac{2}{h^2} + \left(2(q_i + 2p'_i + p_i^2) - y_i(q_i'' + q'_i p_i) h^2 \right) \right) + \\
& y_{i-1} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_i}{2h} + \frac{1}{24} \left(-2(q_i + 2p'_i + p_i^2) - (2q'_i + p_i'' + q_i + p'_i) h \right) \right) + \\
& + \frac{h^4}{144} \left(-(q_i + 2p'_i + p_i^2) y_i^{(4)} - 2(2q'_i + p_i'' + q_i + p'_i) y_i^{(3)} \right) = f_i - \frac{h^2}{12} (f_i'' + f'_i p_i).
\end{aligned}$$

Отримана різницева схема (при тім же шаблоні, що й (125)) дає помилку четвертого порядку точності.

7.5 Метод сплайн-колокації.

Принципова відмінність колокаційних методів від різницевих полягає у тому, що наближений розв'язок визначається не на решітці, а на всій області розв'язку задачі. Це дозволяє одержувати більш повну інформацію про точний розв'язок.

Розглянемо двоточечну крайову задачу

$$y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), \quad (x \in [a, b]) \quad (128)$$

з крайовими умовами

$$\alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = \gamma_1, \quad (129)$$

$$\alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = \gamma_2. \quad (130)$$

Введемо на $[a, b]$ решітку

$$\Delta_n = \{a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b\}.$$

Розв'язок будемо шукати у вигляді кубічного сплайну $s_{3,1}(\Delta_n, x)$ мінімального дефекту по розбиттю Δ_n .

Для цього зажадаємо, щоб сплайн у вузлах задовольняв рівнянню (128) (умова колокації) і крайовим умовам (129), (130):

$$s_{3,1}''(\Delta_n, x_i) + p(x_i)s_{3,1}'(\Delta_n, x_i) + q(x_i)s_{3,1}(\Delta_n, x_i) = r(x_i) \quad (131)$$

$$(i = 0, 1, \dots, n)$$

і

$$\alpha_1 s_{3,1}(\Delta_n, a) + \beta_1 s_{3,1}'(\Delta_n, a) = \gamma_1, \quad (132)$$

$$\alpha_2 s_{3,1}(\Delta_n, b) + \beta_2 s_{3,1}'(\Delta_n, b) = \gamma_2. \quad (133)$$

Запишемо цей сплайн у вигляді розкладу по базису з нормованих В-сплайнів:

$$s_{3,1}(\Delta_n, x) = \sum_{i=-1}^{n+1} b_i B_i(x).$$

Щоб базисні функції були визначені, доповнимо решітку вузлами

$$x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < x_0, \quad x_{n+3} > x_{n+2} > x_{n+1} > x_n.$$

Надалі будемо вибирати точки так, щоб виконувалися умови

$$h_{-j+1/2} = h_{j-1/2}, \quad h_{n+j-1/2} = h_{n-j+1/2}, \quad (j = 1, 2, 3).$$

З огляду на значення В-сплайнів у вузлах, з (131) одержуємо систему рівнянь

$$b_{i-1}A_i + b_iC_i + b_{i+1}B_i = D_i, \quad (i = 0, 1, \dots, n), \quad (134)$$

де

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{1}{x_{i+1} - x_{i-2}} \left(1 - \frac{1}{2}p_i h_{i+1/2} + \frac{1}{6}q_i h_{i+1/2}^2 \right), \\ B_i &= \frac{1}{x_{i+1} - x_{i-2}} \left(1 + \frac{1}{2}p_i h_{i-1/2} + \frac{1}{6}q_i h_{i-1/2}^2 \right), \\ C_i &= -A_i - B_i + \frac{1}{6}q_i (h_{i+1/2} + h_{i-1/2}), \quad D_i = \frac{1}{6}r_i (h_{i+1/2} + h_{i-1/2}). \end{aligned}$$

Крім того, із крайових умов маємо

$$b_{-1}A_{-1} + b_0C_{-1} + b_1B_{-1} = D_{-1}, \quad (135)$$

$$b_{n-1}A_{n+1} + b_nC_{n+1} + b_{n+1}B_{n+1} = D_{n+1}, \quad (136)$$

де

$$\begin{aligned} A_{-1} &= \alpha_1 h_{1/2} - 3\beta_1, \quad B_{-1} = \alpha_1 h_{1/2} + 3\beta_1, \\ C_{-1} &= 2\alpha_1 (h_{3/2} + h_{1/2}), \quad D_{-1} = 2\gamma_1 (h_{3/2} + 2h_{1/2}), \\ A_{n+1} &= \alpha_2 h_{n-1/2} - 3\beta_2, \quad B_{n+1} = \alpha_2 h_{n-1/2} + 3\beta_2, \\ C_{n+1} &= 2\alpha_2 (h_{n-3/2} + h_{n-1/2}), \quad D_{n+1} = 2\gamma_2 (h_{n-3/2} + 2h_{n-1/2}). \end{aligned}$$

Рівняння (134) – (136) утворюють систему $n + 3$ рівнянь із невідомими b_i .

Тоді, окрім значень невідомого b_{-1} і b_{n+1} , приходимо до системи із тридіагональною матрицею

$$\begin{aligned} b_0\tilde{C}_0 + b_1\tilde{B}_0 &= \tilde{D}_0, \\ b_{i-1}A_i + b_iC_i + b_{i+1}B_i &= D_i \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \\ b_{n-1}\tilde{A}_n + b_n\tilde{C}_n &= \tilde{D}_n, \end{aligned}$$

де

$$\tilde{B}_0 = B_0 - \frac{B_{-1}A_0}{A_{-1}}, \quad \tilde{C}_0 = C_0 - \frac{C_{-1}A_0}{A_{-1}}, \quad \tilde{D}_0 = D_0 - \frac{D_{-1}A_0}{A_{-1}},$$

та

$$\tilde{A}_n = A_n - \frac{A_{n+1}B_n}{B_{n+1}}, \quad \tilde{C}_n = C_n - \frac{C_{n+1}B_n}{B_{n+1}}, \quad \tilde{D}_n = D_n - \frac{D_{n+1}B_n}{B_{n+1}}.$$

Залишається визначити умови на коефіцієнти крайової задачі, при яких матриця системи буде мати діагональну перевагу:

$$|C_i| - |A_i| - |B_i| > 0 \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

та

$$|\tilde{C}_0| > |\tilde{B}_0|, \quad |\tilde{C}_n| > |\tilde{A}_n|.$$

Безпосередня перевірка показує, що для цього потрібне виконання наступних умов:

$$\beta_1 \leq 0, \quad \beta_2, \alpha_j \geq 0, \quad |\alpha_j| + |\beta_j| \neq 0, \quad (j = 1, 2), \quad q(x) \leq q < 0$$

при умові, що крок розбиття досить малий, тобто такий, що

$$1 - \frac{1}{2}p_i h_{i+1/2} + \frac{1}{6}q_i h_{i+1/2}^2 \geq 0, \quad 1 + \frac{1}{2}p_i h_{i-1/2} + \frac{1}{6}q_i h_{i-1/2}^2 \geq 0.$$

В остаточному підсумку метод сплайн-колокації зводиться до обчислення коефіцієнтів b_0, \dots, b_n із системи (134) і наступному визначенню b_{-1}, \dots, b_{n+1} з рівнянь (135) і (136).

7.6 Розв'язок рівняння Пуассона методом різниць.

Розглянемо граничну задачу Пуассона

$$\begin{cases} \nabla f(x, y) = \rho(x, y), \\ f|_{\Gamma} = \varphi, \end{cases} \quad (137)$$

де

$$\nabla f(x, y) = \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2},$$

та Γ – крива, яка обмежує область дії рівняння.

Спочатку для апроксимації оператора Лапласа використовуємо наступну різницю

$$\begin{aligned} \nabla f(x, y) = & \frac{1}{h^2} (f(x+h, y) + f(x, y+h) + f(x-h, y) + \\ & + f(x, y-h) - 4f(x, y)) - \\ & - \frac{h^2}{12} \left(\frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial y^4} \right) + O(h^4), \end{aligned} \quad (138)$$

у результаті одержуємо наступну різницеву схему

$$\begin{aligned} & f_{i+1,j} + f_{i,j+1} + f_{i-1,j} + f_{i,j-1} - 4f_{i,j} - \\ & - \frac{h^4}{12} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \Big|_{(i,j)} + \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial y^4} \Big|_{(i,j)} \right) = h^2 \rho_{i,j}. \end{aligned} \quad (139)$$

Якщо ж візьмемо різницю

$$\begin{aligned} \nabla f(x, y) = & \frac{1}{2h^2} (f(x+h, y+h) + f(x-h, y+h) + \\ & + f(x+h, y-h) + f(x-h, y-h) - 4f(x, y)) - \\ & - \frac{h^2}{12} \left(\frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial x^4} + 6 \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial y^4} \right) + O(h^4). \end{aligned} \quad (140)$$

Тоді одержуємо наступну різницеву схему

$$\begin{aligned} & f_{i+1,j+1} + f_{i-1,j+1} + f_{i+1,j-1} + f_{i-1,j-1} - 4f_{i,j} - \\ & - \frac{h^4}{6} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \Big|_{(i,j)} + 6 \frac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2} \Big|_{(i,j)} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4} \Big|_{(i,j)} \right) = 2h^2 \rho_{i,j}. \end{aligned} \quad (141)$$

Помножимо (139) на 4 і складемо з (141), у результаті одержимо різницеву схему

$$\begin{aligned} & 4f_{i+1,j} + 4f_{i,j+1} + 4f_{i-1,j} + 4f_{i,j-1} + f_{i+1,j+1} + f_{i-1,j+1} + f_{i+1,j-1} + f_{i-1,j-1} - 20f_{i,j} - \\ & - \frac{h^4}{2} \left(\frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \Big|_{(i,j)} + 2 \frac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2} \Big|_{(i,j)} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4} \Big|_{(i,j)} \right) = 6h^2 \rho_{i,j}. \end{aligned}$$

Тоді, зауважуючи, що

$$\nabla(\nabla f(x, y)) = \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 f(x, y)}{\partial y^4} = \nabla(\rho),$$

одержуємо схему порядку $O(h^6)$

$$\begin{aligned} 4f_{i+1,j} + 4f_{i,j+1} + 4f_{i-1,j} + 4f_{i,j-1} + f_{i+1,j+1} + f_{i-1,j+1} + f_{i+1,j-1} + f_{i-1,j-1} - 20f_{i,j} = \\ = 6h^2\rho_{i,j} + \frac{h^4}{2}\nabla\rho_{i,j}. \end{aligned}$$

Література

- [1] Годунов С.К. Разностные схемы/С.К.Годунов, В.С.Рябенский .– М.:Наука, 1977 .– 440 с.
- [2] Дронов С.Г. О приближении сплайнами решения краевой задачи/С.Г.Дронов // Исследования по современным проблемам суммирования и приближения функций и их приложениям.– Д., 1987 .– С.30-37.
- [3] Завьялов Ю.С. Методы сплайн-функций/Ю.С.Завьялов, В.И.Квасов, В.Л.Мирошниченко .– Москва:Наука, 1980 .– 350 с.
- [4] Зенкевич О. Конечные элементы и аппроксимация/О.Зенкевич, К.Морган .– Москва; Мир, 1986 .– 318 с.
- [5] Калиткин Н.Н. Численные методы/Н.Н.Калиткин .–М.:Наука,1978 .– 512 с.
- [6] Краскевич В.Е. Численные методы в инженерных исследованиях/В.Е.Краскевич, К.Х.Зеленский, В.И.Гречко .– Киев: Вища школа, 1986 .– 262 с.
- [7] Лигун А.А. Асимптотические методы восстановления кривых/А.А.Лигун, А.А.Шумейко .– Киев: Изд. Института математики НАН Украины, 1997 .– 358 с.
- [8] Лигун А.А. Математическая обработка результатов эксперимента/А.А.Лигун, А.Д.Мальшева .– Днепродзержинск: ДИИ, 1992 .– 47 с.
- [9] Лоусон Ч. Численное решение задач метода наименьших квадратов/Ч.Лоусон, Р.Хенсон .– М.: Наука, 1986 .– 230 с.
- [10] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики/Г.И.Марчук .– М.:Наука, 1989 .– 608 с.
- [11] Попов Б.А. Приближение функций для технических приложений/Б.А.Попов, Г.С.Теслер .– Киев: Наукова думка, 1980 .– 350 с.
- [12] Самарский А.А. Теория разностных схем/А.А.Самарский .– М.: Наука, 1977 .– 656 с.
- [13] Хемминг Р.В. Численные методы/Р.В.Хемминг .– М.:Наука, 1972 .– 398 с.
- [14] Farin, G.E. Curves and Surfaces for Computer-Aided Geometric Design. A Practical Guide/G.E.Farin .– Academic Press, 1990 .– 444 p.
- [15] Schumaker Larry L. Spline functions: Basic theory/Larry L.Schumaker .– N.Y.:John Wiley & Sons Inc, 1981 .– 556 p.