

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

С. Ю. ГОГОЛЕВА

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» в качестве практикума для обучающихся по основной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 03.03.01 Прикладные математика и физика

САМАРА
Издательство Самарского университета
2024

© Самарский университет, 2024
ISBN 978-5-7883-2032-8

УДК 519.61(075)
ББК В192.3я7
Г585

Рецензенты: канд. техн. наук, доц. А. А. Дегтярев,
д-р физ.-мат. наук, проф. А. И. Жданов

Гоголева, Софья Юрьевна

Г585 **Численные методы:** практикум / С. Ю. Гоголева; Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Самарский университет. – Самара: Издательство Самарского университета, 2024. – 1 CD-ROM (6,3 Мб). – Загл. с титул. экрана. – Текст: электронный.

ISBN 978-5-7883-2032-8

Практикум содержит теоретические сведения, примеры и варианты лабораторных работ по разделам курса «Введение в численные методы».

Предназначено для обучающихся по направлению подготовки 03.03.01 Прикладные математика и физика в качестве руководства при проведении лабораторных занятий и для самостоятельной работы.

Подготовлено на кафедре прикладных математики и физики.

УДК 519.61(075)
ББК В192.3я7

Минимальные системные требования:

PC, процессор Pentium, 160 МГц;

Microsoft Windows XP; мышь;

дисковод DVD-ROM; Adobe Acrobat Reader.

Редакционно-издательская обработка издательства
Самарского университета

Подписано для тиражирования 03.04.2024.

Объем издания 6,3 Мб.

Количество носителей 1 диск.

Тираж 11 дисков.

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

443086, Самара, Московское шоссе, 34.

Издательство Самарского университета.

443086, Самара, Московское шоссе, 34.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
1. Лабораторная работа № 1. Решение нелинейных уравнений с одним неизвестным	6
1.1. Теоретические сведения	6
1.1.1. Методы решения нелинейного уравнения с одним неизвестным. Постановка задачи. Основные этапы решения	6
1.1.2. Метод дихотомии. Метод хорд	8
1.1.3. Метод Ньютона	10
1.1.4. Применение метода Ньютона к вычислению значений функций	13
1.1.5. Типы сходимостей итерационных последовательностей	13
1.1.6. Модификации метода Ньютона	14
1.1.7. Задача о неподвижной точке	19
1.2. Задание	23
2. Лабораторная работа № 2. Решение систем нелинейных уравнений	24
2.1. Теоретические сведения	24
2.1.1. Постановка задачи. Метод простых итераций	24
2.1.2. Метод Ньютона и его модификации	26
2.2. Задание	28
3. Лабораторная работа № 3. Приближение функций	30
3.1. Теоретические сведения	30
3.1.1. Постановка задачи	30
3.1.2. Интерполяция обобщенными многочленами	32
3.1.3. Полиномиальная интерполяция	33
3.1.4. Минимизация оценки погрешности интерполяции. Многочлены Чебышева	35
3.1.4. Интерполяционный многочлен Ньютона с конечными и разделенными разностями	38
3.1.5. Глобальная полиномиальная интерполяция. Понятие о кусочно-полиномиальной интерполяции	42
3.1.6. Интерполяция сплайнами	44
3.2. Задание	47
4. Лабораторная работа № 4. Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений	49
4.1. Теоретические сведения	49
4.1.1. Постановка задачи	49
4.1.2. Построение одношаговых методов	50
4.1.3. Метод Рунге-Кутты	53
4.1.4. Многошаговые методы. Экстраполяционный и интерполяционный методы Адамса	58
4.1.5. Решение линейных граничных задач	60
4.2. Задание	65
Список литературы	67

ВВЕДЕНИЕ

Данный лабораторный практикум предназначен для приобретения навыков решения задач вычислительной математики и создания хорошо отлаженного, эффективного программного обеспечения.

Практикум «Численные методы» содержит необходимые теоретические сведения по разделам вычислительной математики, касающихся численных методов математического анализа и обыкновенных дифференциальных уравнений. В пособии приведены индивидуальные задания, которые помогут получить навыки решения задач по численным методам рассмотренных разделов.

Важно отметить, что подборка тематики лабораторных работ согласуется с содержанием ряда других дисциплин, включенных в образовательные программы по указанным направлениям. В частности, практические навыки компьютерного решения нелинейных уравнений, а также их систем существенно важны при выполнении студентами курсовой работы по дисциплине «Уравнения математической физики». Практические навыки численного решения задач Коши с использованием методов прогонки требуются при выполнении студентами курсовой работы по дисциплине «Численные методы математической физики». Тематика всех четырех лабораторных работ традиционно востребована в процессе выполнения студентами научно-исследовательских и выпускных квалификационных работ.

1. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1. Решение нелинейных уравнений с одним неизвестным

1.1. Теоретические сведения

1.1.1. Методы решения нелинейного уравнения с одним неизвестным.

Постановка задачи. Основные этапы решения

Рассмотрим задачу приближенного нахождения нулей функции одной переменной или задачу нахождения корней уравнения вида

$$f(x) = 0, \quad (1.1)$$

где $f: \mathbb{R}_1 \rightarrow \mathbb{R}_1$ — алгебраическая или трансцендентная функция. Такие уравнения называют **скалярными** или **числовыми**.

Нелинейная функция $f(x)$ в своей области определения $D(f) \in \mathbb{R}_1$ может иметь конечное или бесконечное количество нулей или не иметь их вовсе. Большинство методов нахождения нулей требует знания промежутков, где заведомо имеется и притом единственный нуль функции. Если такие конкретные промежутки не предоставляются постановщиком задачи, то на первый план выходят: выявление ситуации с наличием корней уравнения (1.1), нахождение области их расположения, получение отрезков, на которых имеется точно по одному корню. Иными словами, ставятся **подзадачи существования и единственности, нахождения границ и локализации корней**. Эти подзадачи обычно решаются в комплексе средствами математического анализа.

Графический способ. Если функция $f(x)$ такова, что без особого труда можно построить ее график, то по нему определяется количество и расположение нулей $f(x)$, выделяя те промежутки оси абсцисс, где график $y = f(x)$ пересекает ось Ox . Может оказаться, что построение графика $y = f(x)$ вызывает затруднения, но исходное уравнение (1.1) представляется в виде

$$f_1(x) = f_2(x).$$

И функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ таковы, что легко строятся графики $y = f_1(x)$ и $y = f_2(x)$. Тогда задача определения количества корней и областей их единственности решается нахождением точек пересечения этих графиков и выделением на оси абсцисс тех промежутков, которым принадлежат проекции таких точек. Описанный прием называется **графическим способом локализации корней**.

Пример 1.1. Найдем промежутки локализации корней уравнения $x^2 - \sin x - 1 = 0$.

Представив это уравнение в виде $x^2 - 1 = \sin x$, строим графики функций $y = x^2 - 1$ и $y = \sin x$ (рис. 1.1).

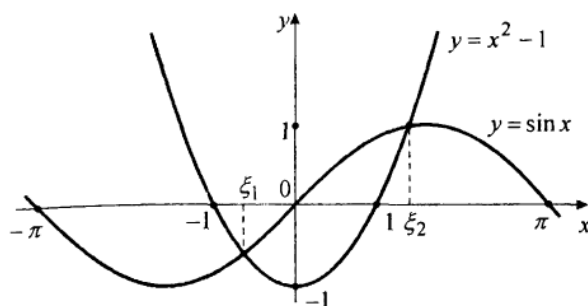


Рис. 1.1. Графики функций $y = x^2 - 1$ и $y = \sin x$

Совместное рассмотрение графиков позволяет сделать заключение, что данное уравнение имеет два корня на отрезках $[-1, 0]$ и $[1, \pi]$ соответственно.

Аналитический способ. Убедиться в том, что на данном отрезке $[a, b]$ (например, грубо определенном графическим способом) действительно имеется нуль непрерывной функции $f(x)$, можно аналитическим способом, в основе которого лежит известное утверждение математического анализа.

Теорема 1.1 (Больцано-Коши). Если непрерывная на отрезке $[a, b]$ функция $f(x)$ на концах его имеет противоположные знаки, т. е.

$$f(a)f(b) < 0, \quad (1.2)$$

то на интервале (a, b) она хотя бы один раз обращается в нуль.

Результат, сформулированный в виде теоремы 1.1, можно значительно усилить, если требование непрерывности функции $f(x)$ на $[a, b]$ дополнить требованием монотонности ее на этом отрезке.

Теорема 1.2. Непрерывная строго монотонная функция $f(x)$ имеет и притом единственный нуль на отрезке $[a, b]$ тогда и только тогда, когда на его концах она принимает значения разных знаков.

Последняя теорема позволяет не только принимать, но и отвергать те или иные промежутки из области определения $D(f)$ данной функции на предмет дальнейшего поиска ее нулей, если известно о ее монотонном поведении на этих промежутках и определены знаки значений функции на их концах.

Пример 1.2. Выясним, сколько корней у уравнения $x^2 e^x = \pi$ и где они расположены. Обозначим $f(x) = x^2 e^x - \pi$ тогда $f'(x) = x(x + 2)e^x$. Очевидно, $f'(x) = 0$ только при $x = 0$ и $x = -2$. Поскольку $f(x)$ и $f'(x)$ определены и непрерывны на всей числовой оси, точки -2 и 0 – единственные на Ox такие, в которых может происходить смена убывания функции $y = f(x)$ на возрастание или наоборот. Поэтому, найдя знаки значений (в том числе, бесконечные) $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x), f(-2), f(0)$ и $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x)$, т.е. заполнив таблицу знаков (табл. 1.1) можно утверждать, что данное уравнение имеет единственный корень, и этот корень положителен. Выяснив еще знаки $f(x)$ в точках $x = 1$ (минус) и $x = 2$ (плюс), область поиска корня данного уравнения с бесконечного промежутка $[0, +\infty)$ сужаем до промежутка единичной длины $[1, 2]$.

Таблица 1.1

$-\infty$	-2	0	$+\infty$
-	-	-	+

Способ перебора. В ситуациях, далеких от рассмотренной, часто поступают следующим образом. Всю область определения (если она конечна) или какую-нибудь ее часть, вызывающую по тем или иным соображениям интерес, разбивают на отрезки точками x_i , расположенными на условно небольшом расстоянии h одна от другой (сюда включаются также граничные точки области определения). Вычислив значения $f(x)$ во всех этих точках (или только определив знаки $f(x_i)$), сравнивают их в соседних точках, т.е. проверяют, не выполнится ли на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ условие $f(x_i)f(x_{i-1}) < 0$. Если заранее известно

количество корней в исследуемой области, то, измельчая шаг поиска h , таким процессом можно либо все их локализовать, либо довести процесс до состояния, позволяющего утверждать, что возможно наличие пар корней, не различимых с точностью $h = \varepsilon$. Этот хорошо приспособленный для вычислительных машин **способ перебора** является дорогим в смысле затрат на получение многочисленных пробных значений функций. Он не дает гарантий выявления количества и локализации всех корней в общем случае и это ограничивает сферу его применения.

1.1.2. Метод дихотомии. Метод хорд

Пусть функция $f(x)$ определена и непрерывна при всех $x \in [a, b]$ и на $[a, b]$ меняет знак, т.е. $f(a)f(b) < 0$. Тогда согласно теореме 3.1 уравнение (3.1) имеет на (a, b) хотя бы один корень. Возьмем произвольную точку $c \in (a, b)$. Будем называть в этом случае отрезок $[a, b]$ **промежутком существования корня**, точку c – **пробной точкой**. Поскольку речь здесь идет лишь о вещественнозначных функциях вещественной переменной, то вычисление значения $f(c)$ приведет к какой-либо одной из следующих взаимоисключающих ситуаций:

$$\text{а) } f(a)f(c) < 0; \quad \text{б) } f(c)f(b) < 0; \quad \text{в) } f(c) = 0.$$

Применительно к рассматриваемой задаче их можно интерпретировать так:

- а) корень находится на интервале (a, c) ;
- б) корень находится на интервале (c, b) ;
- в) точка c является искомым корнем.

Таким образом, одно вычисление значения функции позволяет уменьшить промежуток $[a, b]$ существования корня (ситуация а) или б)) или указать его значение (ситуация в), маловероятная в смысле выполнения приближенного равенства $f(c) \approx 0$, когда длина промежутка существования корня близка к длине промежутка его неопределенности. Ясно, что в зависимости от того, имеет место ситуация а) или б), описанная процедура одного шага сужения промежутка существования нуля непрерывной функции $f(x)$ может быть применена к промежутку $[a, c] \subset [a, b]$ или к $[c, b] \subset [a, b]$ соответственно и далее повторяться циклически. Такой простой и легко программируемый процесс называется **методом дихотомии** (от греческого слова, означающего деление на две части), **методом бисекции**, **методом проб**. Если способ задания пробных точек c определен так, что последовательность длин получающихся в этом процессе промежутков существования корня стремится к нулю, то методом дихотомии можно найти какой-либо корень уравнения (1.1) с наперед заданной точностью.

Наиболее употребительным частным случаем метода дихотомии является **метод половинного деления**, реализующий самый простой способ выбора пробной точки – деление промежутка существования корня пополам. Выполнить приближенное вычисление с точностью ε корня уравнения (1.1) методом половинного деления при условии, что $f(x)$ непрерывна на $[a, b]$ и $f(a)f(b) < 0$, можно, например, по следующей схеме:

Шаг 0. Задать концы отрезка a и b , функцию f , малое число $\varepsilon > 0$ (допустимую абсолютную погрешность корня или полудлину его промежутка неопределенности), малое число $\delta > 0$ (допуск, связанный с реальной точностью вычисления значений данной функции); вычислить (или ввести) $f(a)$.

Шаг 1. Вычислить $c := 0.5(a + b)$.

Шаг 2. Если $b - a < 2\varepsilon$, положить $\xi: \approx c$ (ξ – корень) и остановиться.

Шаг 3. Вычислить $f(c)$.

Шаг 4. Если $|f(c)| < \delta$, положить $\xi: \approx c$ и остановиться.

Шаг 5. Если $f(a)f(c) < 0$, положить $b := c$ и вернуться к шагу 1; иначе положить $a := c; f(a) := f(c)$ и вернуться к шагу 1.

Замечание. В упрощенных вариантах схем реализации метода половинного деления обходятся без введения допуска δ . В таком случае в шаге 4 вместо неравенства $|f(c)| < \delta$ используют равенство $f(c) = 0$. Тогда разветвление алгоритма, диктуемое шагами 4 и 5, можно производить сравнением с нулем (с тремя исходами) произведения $f(a)f(c)$.

За один шаг метода половинного деления промежутков существования корня сокращается ровно вдвое. Поэтому, если за k -е приближение этим методом к корню ξ уравнения (1.1) примем точку x_k , являющуюся серединой полученного на k -м шаге отрезка $[a_k, b_k]$ в результате последовательного сужения данного отрезка $[a, b]$, полагая $a_1 := a, b_1 := b$, то придем к неравенству

$$|\xi - x_k| < \frac{b - a}{2^k} \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (1.3)$$

(априори, ξ – любая точка интервала (a_k, b_k) , и расстояние от нее до середины этого интервала не превосходит половины его длины. Это как раз и видим в (1.3) при $k = 1$).

Неравенство (1.3), с одной стороны, позволяет утверждать, что последовательность $\{x_k\}$ имеет предел – искомый корень ξ уравнения (1.1); с другой стороны, являясь априорной оценкой абсолютной погрешности приближенного равенства $x_k \approx \xi$ дает возможность подсчитать число шагов (итераций) метода половинного деления, достаточное для получения корня ξ с заданной точностью ε , для чего нужно лишь найти наименьшее натуральное k , удовлетворяющее неравенству

$$\frac{b - a}{2^k} < \varepsilon.$$

Используемый в методе половинного деления способ фиксирования пробной точки можно охарактеризовать как пассивный, ибо он осуществляется по заранее жестко заданному плану и никак не учитывает вычисляемые на каждом шаге значения функции. Логично предположить, что в семействе методов дихотомии можно достичь несколько лучших результатов, если отрезок $[a, b]$ делить точкой c на части не пополам, а пропорционально величинам ординат $f(a)$ и $f(b)$ графика данной функции $f(x)$. Это означает, что точку c есть смысл находить как абсциссу точки пересечения оси Ox с прямой, проходящей через точки $A(a, f(a))$ и $B(b, f(b))$, иначе, с хордой AB дуги $A\xi B$ (рис. 1.2).

Запишем уравнение прямой, проходящей через две данные точки A и B :

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

Отсюда, полагая $y = 0$ (уравнение оси Ox), $x = c$ (обозначение искомой точки пересечения прямой AB с осью Ox), находим

$$c = a - \frac{f(a)(b - a)}{f(b) - f(a)}. \quad (1.4)$$

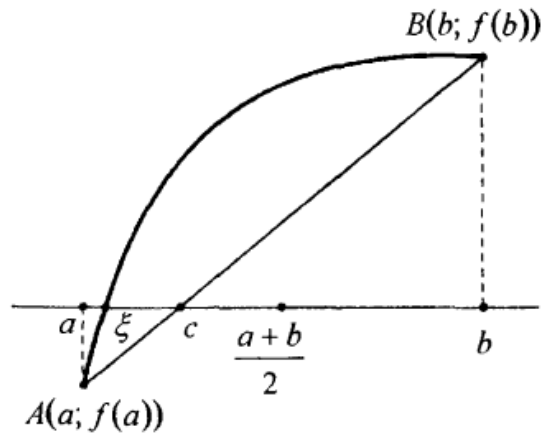


Рис. 1.2. Дуга графика функции $f(x)$ и стягивающая ее хорда

Метод, получающийся в развитие метода дихотомии таким фиксированием пробной точки, называют **методом хорд**, **методом пропорциональных частей** или **методом линейной интерполяции**.

Существует несколько версий реализации метода хорд. Одна из них – подсчет значений c по формуле (1.4) в рамках алгоритма типа рассмотренного выше алгоритма половинного деления, где следует положить $f(b) := f(c)$ при $f(a)f(c) < 0$. Длина промежутка локализации корня при этом может не стремиться к нулю, поэтому обычно счет ведется до совпадения значений c на двух соседних итерациях с точностью ε (лучше, с точностью $\frac{m\varepsilon}{M-m}$ если $0 < m \leq |f'(x)| \leq M \quad \forall x \in [a, b]$).

Так как для *линейной* функции $f(x)$ метод хорд дает корень ξ точно за один шаг при любой длине отрезка $[a, b]$, то можно рассчитывать на его довольно быструю сходимость, если $f(x)$ близка к линейной. При определенных достаточно жестких условиях можно доказать соответствующие утверждения о монотонной сходимости, получить более точные оценки и упростить алгоритм. Однако в общем случае, если на функцию $f(x)$ не накладывать дополнительных ограничений, может оказаться, что метод хорд будет проигрывать в скорости методу половинного деления.

1.1.3. Метод Ньютона

Одним из популярнейших итерационных методов решения нелинейных уравнений, что связано с его идейной простотой и быстрой сходимостью, является **метод Ньютона**.

Правило построения итерационной последовательности $\{x_k\}$ здесь получают или из геометрических соображений, откуда другое название этого метода – **метод касательных**, говорящее само за себя, или аналитическим путем подмены данной нелинейной функции ее линейной моделью на основе формулы конечных приращений Лагранжа или формулы Тейлора, в связи с чем метод Ньютона также называют **методом линеаризации**. В любом случае, говорить о нахождении нуля функции $f(x)$ методом Ньютона можно лишь в предположении, что данная функция обладает достаточной гладкостью.

Для простоты будем считать, что функция $f(x)$ дважды дифференцируема на отрезке $[a, b]$, содержащем корень ξ уравнения (1.1).

Пусть $x_k \in [a, b]$ – уже известный член последовательности приближений к ξ , полученный конструируемым методом (или заданное начальное приближение x_0 при $k = 0$). Для любого $x \in [a, b]$ можно записать формальное представление $f(x)$ по формуле Тейлора

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}f''(\theta_k)(x - x_k)^2, \quad (1.5)$$

где $\theta_k \in [a, b]$ – некоторая точка между x и x_k .

Так как корень ξ – потенциально произвольная точка отрезка $[a, b]$, то разложение (1.5) справедливо и для $x = \xi$, т.е. существует точка $\theta_k = \overline{\theta}_k$ такая, что

$$f(\xi) = f(x_k) + f'(x_k)(\xi - x_k) + \frac{1}{2}f''(\overline{\theta}_k)(\xi - x_k)^2 = 0.$$

Но $f(\xi) = 0$, и если точка $\overline{\theta}_k$ известна, то корень ξ можно точно найти из квадратного уравнения

$$f(x_k) + f'(x_k)(\xi - x_k) + \frac{1}{2}f''(\overline{\theta}_k)(\xi - x_k)^2 = 0. \quad (1.6)$$

Считая, что значение x_k близко к ξ , т.е. разность $\xi - x_k$ по модулю достаточно мала, можно рассчитывать, что величина $(\xi - x_k)^2$ будет тем более малой. На этом основании отбросим в (1.6) последнее слагаемое и подменим квадратное уравнение (1.6) линейным уравнением. Естественно, что при этом будет найден не корень ξ , а некоторая другая точка, которую обозначим x_{k+1} .

Таким образом, итерационный процесс Ньютона определяется линейным уравнением

$$f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \quad (1.7)$$

или в явном виде формулой

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad (1.8)$$

где $k = 0, 1, 2, \dots$ и предполагается, что по крайней мере на элементах последовательности $\{x_k\}$ первая производная данной функции в нуль не обращается. Как видим, процесс вычислений по методу Ньютона не требует знания второй производной. Можно обойтись без нее и при выводе (другим способом), но при этом усложняется изучение метода.

Если в равенстве (1.7) фиксированную точку x_{k+1} заменить переменной x , а 0 в правой части – переменной y , то в полученном легко узнать уравнение касательной к кривой $y = f(x)$, проведенной к ней в точке $(x_k, f(x_k))$. Отсюда **геометрический смысл метода Ньютона**: *приближения к корню ξ совершаются по абсциссам точек пересечения касательных к графику данной функции, проводимых в точках, соответствующих предыдущим приближениям* (рис. 1.3).

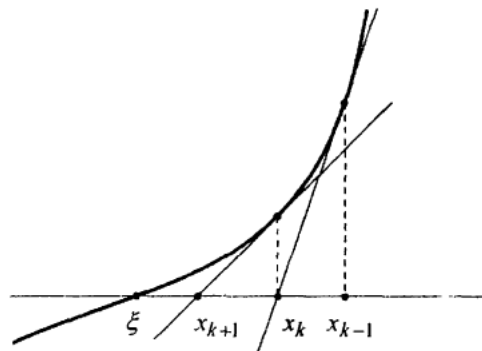


Рис. 1.3. Приближения к корню нелинейного уравнения методом касательных

Изучение сходимости метода Ньютона (осуществимость процесса вычисления элементов последовательности $\{x_k\}$ по формуле (1.8) в пределах заданного отрезка, сходимость к корню ξ данного уравнения, порядок метода, оценки погрешности и критерии окончания процесса построения приближений, условия на выбор начального приближения) проводится при более ограничительных требованиях к данной функции $f(x)$.

Интуитивно ясно (из вида формулы (1.8), ее вывода и геометрического смысла), что сходимость $\{x_k\}$ к ξ будет тем быстрее, чем ближе функция $f(x)$ к линейной и чем круче ее график пересекает ось абсцисс. Поэтому необходимо потребовать от $f(x)$, чтобы по модулю вторая ее производная была ограничена сверху, а первая – снизу. При этих условиях обратимся сначала к исследованию *быстроты* сходимости итерационного метода Ньютона (1.8) в предположении, что факт его осуществимости и сходимости к корню ξ сомнений не вызывает.

Теорема 1.3. Пусть функция $f(x)$ удовлетворяет условиям

$$\begin{cases} |f'(x)| \geq \alpha > 0, \\ |f''(x)| \leq \beta < \infty, \end{cases} \quad \forall x \in [a, b]. \quad (1.9)$$

Тогда, если члены последовательности $\{x_k\}$, определяемые методом Ньютона (1.8), при любом фиксированном $k \in N_0$ принадлежат отрезку $[a, b]$ и эта последовательность сходится на $[a, b]$ к корню ξ уравнения (1.1), то справедливы неравенства ($\forall k \in N_0$):

$$|\xi - x_k| \leq \frac{\beta}{2\alpha} |\xi - x_k|^2, \quad (1.10)$$

$$|\xi - x_{k+1}| \leq \frac{\beta}{2\alpha} |x_{k+1} - x_k|^2. \quad (1.11)$$

Первое из этих неравенств позволяет считать (1.8) *методом второго порядка*, а второе, являясь апостериорной оценкой погрешности, может служить в качестве критерия останова процесса вычислений).

Теорема 1.4. Пусть для функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ выполнены условия (1.9). Тогда, если интервал $J: (\xi - \frac{2\alpha}{\beta}, \xi + \frac{2\alpha}{\beta})$ содержится в $[a, b]$, то при произвольном выборе $x_0 \in J$ для определяемой методом Ньютона (1.8) последовательности $\{x_k\}$:

- 1) $x_k \in J, \forall k \in \mathbb{N}$;
- 2) $\exists \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \xi$ и $f(\xi) = 0$;
- 3) Справедливо утверждение т 1.3 и $|\xi - x_k| \leq \frac{2\alpha}{\beta} (\frac{\beta}{2\alpha} |\xi - x_0|)^{2^k}$.

Слабым местом теоремы 1.4 является то, что точкой отсчета при построении промежутка применимости метода Ньютона служит корень ξ , который как раз и неизвестен. Более естественно за центр такого промежутка принимать конкретную точку x_0 – начальное приближение, полагая по тем или иным соображениям, например, геометрическим, что в ее окрестности должен быть корень. Имеется ряд теорем подобного типа, но им присуща громоздкость и трудная проверяемость условий. Заменяв условия (1.9) на требования знакопостоянства первой и второй производной данной функции, означающих монотонность и определенную выпуклость ее графика, рассмотрим теорему несколько иного плана.

Теорема 1.5. Пусть функция $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ имеет первую и вторую производную постоянного знака и пусть

$$f(a)f(b) < 0.$$

Тогда, если точка x_0 на $[a, b]$ выбрана так, что $f(x_0)f''(x_0) > 0$,

то начиная с нее последовательность $\{x_k\}$, определяемая методом Ньютона (1.8), монотонно сходится к корню $\xi \in (a, b)$ уравнения (1.1).

Как видим, квадратично сходящийся процесс в идеале, т.е. если он реализуется точно, должен давать удвоение числа верных знаков на каждой итерации, начиная с некоторой. Такой высокий темп установления верных цифр искомого корня не только позволяет получить корень с большой точностью сравнительно небольшим количеством вычислений, но и обеспечивает хорошую численную устойчивость метода, а также меньшую критичность к правилу окончания итерационного процесса (часто здесь применяют упрощенное правило останова

$$|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon \Rightarrow \xi \approx x_k.$$

1.1.4. Применение метода Ньютона к вычислению значений функций

Элементарные функции, чаще всего, вычисляются с помощью приближения их подходящими многочленами. В некоторых случаях для этих целей применяют итерационные методы, в частности, базирующиеся на методе Ньютона.

Пусть требуется найти значение заданной функции φ в заданной точке a . Считая a произвольной точкой из области $D(\varphi)$ или какой-либо ее подобласти, функциональное соответствие

$$x = \varphi(a)$$

зададим неявно уравнением

$$F(a, x) = 0 \tag{1.12}$$

таким, чтобы:

- 1) оно было локально эквивалентным (в окрестности точки a) данному;
- 2) функция F была дифференцируема по второму аргументу;
- 3) функции F и F' были легко вычислимы.

При каждом фиксированном a уравнение (1.12) можно считать уравнением типа (1.1) и получать приближенно его корень – требуемое значение $x = \varphi(a)$ – методом Ньютона (1.8). Для уравнения (1.12) формула (1.8) принимает вид

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(a, x_k)}{F'(a, x_k)}, \tag{1.13}$$

где $k = 0, 1, 2, \dots$, а x_0 – задаваемое начальное приближение к $\varphi(a)$.

1.1.5. Типы сходимостей итерационных последовательностей

Чтобы более объективно судить о скорости сходимости тех или иных итерационных методов, введем следующие понятия.

Пусть некоторый итерационный процесс генерирует последовательность $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$, имеющую пределом x_* .

Сходимость последовательности $\{x_k\}$ к x_* называется *линейной* (соответственно, итерационный процесс – *линейно сходящимся*), если существует такая постоянная $C \in (0, 1)$ и такой номер k_0 , что

$$|x_* - x_{k+1}| \leq C |x_* - x_k| \quad \forall k \geq k_0, \tag{1.14}$$

и *сверхлинейной*, если существует такая положительная последовательность $\{C_k\}_{k=0}^{\infty}$, что $C_k \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ и

$$|x_* - x_{k+1}| \leq C_k |x_* - x_k| \quad \forall k \in \mathbb{N}_0. \tag{1.15}$$

Говорят, что последовательность $\{x_k\}$ сходится к x_* *по меньшей мере с p -м порядком*, (соответственно, итерационный процесс *имеет по меньшей мере p -й порядок*), если найдутся такие константы $C > 0$ и $p \geq 1$, что

$$|x_* - x_{k+1}| \leq C |x_* - x_k|^p \quad \forall k \in \mathbb{N}_0, k \geq k_0. \quad (1.16)$$

Фиксируя в этом определении значение $p = 1$, видим, что линейно сходящийся процесс можно называть *процессом первого порядка*. Значению $p = 2$ в (1.16) соответствует *квадратично сходящийся процесс*, $p = 3$ означает кубическую скорость *сходимости*.

К линейной сходимости применяют также термин *сходимость со скоростью геометрической прогрессии*. Объяснение ему можно найти в том, что определяющее линейную сходимость неравенство (1.14) между абсолютными погрешностями $(k + 1)$ -го и k -го приближений в предельной точке x_* означает существование последовательности положительных чисел ε_k , мажорирующих эти погрешности и связанных соотношением $\varepsilon_{k+1} = C \varepsilon_k$, т.е. являющихся членом геометрической прогрессии со знаменателем $C = \frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k}$ ($= \text{const}$). Отсюда также следует естественность в определении условия $C < 1$, чтобы последовательность погрешностей была убывающей, иначе и речи быть не может о сходимости. Если требуемой в неравенстве (1.14) константы C не удастся найти, но установлено неравенство (1.15) с $C_k \rightarrow C \in (0,1)$ при $k \rightarrow \infty$, то в этом случае говорят об *асимптотически линейной сходимости*. Аналогично можно определить *асимптотический порядок сходимости*.

Коснемся еще одного аспекта понятия сходимости итерационного метода. В приведенных выше определениях отождествлялись сходимость итерационного процесса и сходимость итерационной последовательности, порождаемой этим процессом; при этом негласно считалось, что последовательность $\{x_k\}$ уже фиксирована заданием начальной точки x_0 . Большой же интерес представляет сходимость множества всевозможных итерационных последовательностей, генерируемых итерационным методом при варьировании x_0 в границах некоторой области. Итерационные методы, дающие в пределе решение данной задачи при любом начальном приближении x_0 , называются *глобально сходящимися*. Если же сходимость итерационной последовательности $\{x_k\}$ к искомому решению x_* имеет место лишь при задании x_0 из некоторой, вообще говоря, достаточно малой окрестности x_* , то итерационный метод называется *локально сходящимся*. Так, рассмотренные выше методы дихотомии можно отнести к глобально сходящимся методам, а метод Ньютона – к локально сходящимся.

1.1.6. Модификации метода Ньютона

Вновь обратимся к теоремам 1.3 – 1.5 о сходимости метода Ньютона. Их условия предполагают неравенство нулю производной данной функции $f(x)$ на промежутке $[a, b]$, где применяется метод. А это означает, что они регламентируют применение метода Ньютона только для нахождения простых нулей функции $f(x)$, поскольку для кратного корня ξ уравнения (1.1) имеет место равенство $f'(\xi) = 0$. Действительно, пусть ξ – кратный корень ($m \geq 2$), тогда функция представима в виде

$$f(x) = (x - \xi)^m f_1(x)$$

и ее производная $f'(x) = (x - \xi)^{m-1} [m f_1(x) + (x - \xi) f_1'(x)]$ обращается в нуль при $x = \xi$.

Согласно (1.8), формально нужно, чтобы производная не равнялась нулю в точках x_k последовательности приближений, в предельной же точке ξ допустимо обращение производной в нуль. Итерационный процесс Ньютона может сходиться и в случае, когда ξ является кратным корнем уравнения (1.1), но сходимость при этом – только линейная.

Если заведомо известно число m – показатель кратности корня ξ , то для ускорения сходимости метода Ньютона в формулу (1.8) рекомендуется ввести корректирующий множитель m :

$$x_{k+1} = x_k - m \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (1.17)$$

Такую модификацию будем называть *методом Ньютона-Шредера*. Этот метод обладает сверхлинейной скоростью сходимости.

Цель всех последующих видоизменений основной формулы (1.8) метода Ньютона – уменьшение вычислительных затрат, связанных с необходимостью вычисления производной на каждом итерационном шаге.

Самый простой выход – использование на каждом шаге одного и того же множителя $\frac{1}{f'(x_0)}$, т.е. вычисление по формуле

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}. \quad (1.18)$$

Такой метод называют *модифицированным* или *упрощенным методом Ньютона*.

Он имеет очевидную геометрическую интерпретацию: в начальной точке x_0 проводится касательная к графику $y = f(x)$ (первый шаг основного и модифицированного методов Ньютона совпадают), а во всех последующих точках проводятся прямые, параллельные этой касательной (рис. 1.4).

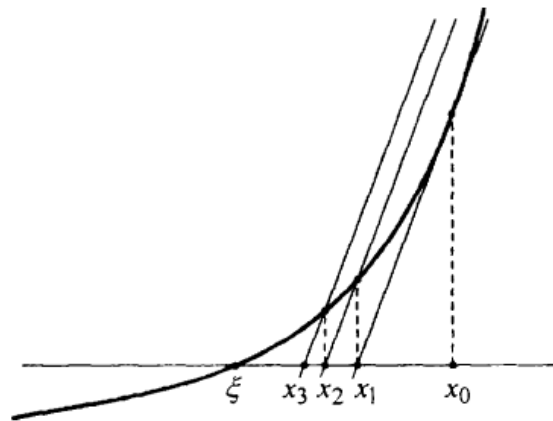


Рис. 1.4. Приближения к корню нелинейного уравнения упрощенным методом Ньютона

При такой модификации метод Ньютона утрачивает высокую скорость сходимости и вместо квадратичной имеет лишь скорость геометрической прогрессии.

На получение сверхлинейной скорости сходимости при видоизменении метода Ньютона можно надеяться в том случае, когда $f'(x_k)$ при каждом $k \in \mathbb{N}$ подменяется не одним и тем же числом $f'(x_0)$, а некоторым близким к $f'(x_k)$ значением, которое может быть найдено через значения данной функции. Для таких аппроксимаций $f'(x_k)$ можно использовать определение производной. Имеем:

$$f'(x_k) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h},$$

и при малых h (произвольного знака) получаем приближенное равенство

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h}. \quad (1.19)$$

Позволяющее производную приближенно подменять так называемым **разностным отношением**. Подстановка (1.19) в (1.8) приводит к итерационной формуле

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)h}{f(x_k + h) - f(x_k)}, \quad (1.20)$$

где $k = 0, 1, 2, \dots$, а h – малый параметр, которым должен распорядиться вычислитель.

Ясно, что при каждом k в формуле (1.19) может быть свое значение h , т.е. в формуле (1.20) вместо постоянного параметра h имеет смысл использовать связанный с номером итерации параметр h_k , т.е. вести вычисление по формуле

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)h_k}{f(x_k + h_k) - f(x_k)}. \quad (1.21)$$

Итерационный метод, определяемый формулами (1.20) или (1.21), назовем **разностным методом Ньютона**.

Так как равенство (1.19) можно сделать сколь угодно точным за счет малости шага h разностного отношения (теоретически; практически это далеко не так из-за потерь точности при вычитании близких чисел), то по непрерывности можно утверждать асимптотически квадратичную скорость сходимости разностного метода Ньютона при определенных условиях.

При задании последовательности параметров h_k в разностном методе Ньютона (1.21) руководствуются тем, что с ростом k значения $|h_k|$ должны убывать, чтобы при приближении x_k к корню ξ производная $f'(x_k)$ все более точно аппроксимировалась разностным отношением $[f(x_k + h_k) - f(x_k)]/h_k$.

Первое, что можно здесь предложить, так это задать какое-либо значение h_0 , а каждое последующее значение параметра получать рекуррентным равенством $h_{k+1} = \delta h_k$, где $\delta \in (0, 1)$ – некоторое фиксированное число. Очевиден недостаток такого подхода – отсутствие связи между скоростью сходимости $\{x_k\}$ к ξ и скоростью убывания $|h_k|$ (может оказаться, что x_k еще не имеет достаточной близости к ξ), а значение $|h_k|$ настолько мало, что значения $f(x_k + h_k)$ и $f(x_k)$ реально не различимы; противоположная ситуация чревата большой потерей скорости сходимости или, еще хуже, нарушением канонического развития итерационного процесса).

Если учесть, что при зафиксированных в теореме 1.3 условиях (1.9) $f(x_k) \rightarrow 0$ с той же скоростью, что и $x_k \rightarrow \xi$, есть смысл полагать в (1.21) $h = f(x_k)$. Разумеется, это можно делать на той стадии итерационного процесса, когда значения $|f(x_k)|$ уже достаточно малы (иначе теряет смысл (1.19)). При таких h_k формула (1.21) примет вид

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)^2}{f(x_k + f(x_k)) - f(x_k)} \quad (1.22)$$

и называется **методом Стеффенсена**. Подчеркнем еще раз его локальный характер сходимости, но зато сходимость эта квадратичная.

При приблизительно равных затратах на вычисление значений данной функции и ее производной ни один из рассмотренных выше вариантов разностного метода Ньютона не дает

выигрыша по сравнению с основным методом (1.8), поскольку каждый из них требует два вычисления функции на каждом итерационном шаге, не увеличивая при этом скорость сходимости. Построим такую модификацию метода Ньютона, развивая его разностный аналог (1.21), в который на один шаг итерации приходилось бы одно вычисление функции.

Опираясь на то, что необходимым условием сходимости некоторой последовательности $\{x_k\}$ к пределу ξ , является сходимость к нулю последовательности разностей $x_k - x_{k-1}$, положим в (1.21) $h_k = x_{k-1} - x_k$, $x_{k-1} = x_k + h_k$. В результате этого из (1.21) получаем итерационный процесс

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_{k-1}) - f(x_k)}, \quad (1.23)$$

где $k = 0, 1, 2, \dots$, а x_0, x_1 должны задаваться.

Формула (1.23) определяет новый метод, как **двухшаговый** (результат последующего шага зависит от результатов двух предыдущих шагов) и на каждой итерации требует вычисления только одного значения функции, другое же значение, фигурирующее в этой формуле, передается с предыдущего шага. Сравнив (1.23) с формулой (1.4), полученной из геометрических соображений, легко понять, что x_{k+1} есть абсцисса точки пересечения с осью Ox прямой, проведенной через точки $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ и $(x_k, f(x_k))$, т.е. секущей. Отсюда название этого метода – **метод секущих**.

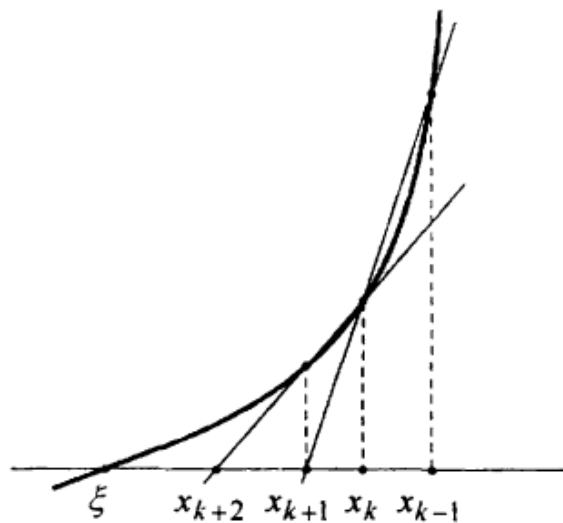


Рис. 1.5. Приближения к корню нелинейного методом секущих

Можно сказать, что метод секущих и метод хорд определяются совершенно однотипными формулами, но порождаются различными идеологиями, что сказывается на свойствах и скорости сходимости генерируемых ими последовательностей приближений. Метод секущих является сверхлинейно сходящимся процессом.

Высокий порядок сходимости метода секущих в сочетании с минимальными вычислительными затратами – одно вычисление значения функции на один итерационный шаг – выводит этот метод на первое место по эффективности решения скалярных уравнений вида (1.1) среди прочих итерационных методов.

При применении метода секущих возникают вопросы, связанные с началом итерационного процесса и с его окончанием. Поскольку касательная к кривой есть предельное положение секущей, выбор начальной точки x_0 в методе секущих нужно осуществлять по тому же принципу, что и в методе касательных; вторая же из начальных точек x_1 , требуемая в двухшаговом методе (1.23) может быть взята в непосредственной близости x_0 (понятие близости здесь, разумеется, условно), желательно между точкой x_0 и искомым корнем ξ .

Окончание счета по методу секущих, учитывая его быструю сходимость, можно контролировать с помощью проверок на малость модулей невязок $|f(x_k)|$ или поправок $|x_k - x_{k-1}|$. Главное здесь – суметь вовремя остановить процесс вычислений, не дожидаясь момента, когда погрешности вычислений начнут превосходить погрешность метода. Это происходит вследствие вычитания приближенно вычисляемых близких значений $f(x_{k-1})$ и $f(x_k)$ в знаменателе расчетной формулы (1.23). Поэтому метод секущих проигрывает методу Ньютона в численной устойчивости.

Почти все рассмотренные выше методы можно отнести к классу методов линеаризации, так как в их основе лежит замена исходной нелинейной модели линейной. Квадратичная модель (парабола) может быть получена, например, по формуле Тейлора или квадратичной интерполяцией. В любом случае соответствующие итерационные формулы, хотя и дают быстро сходящиеся последовательности приближений к корню, либо содержат старшие производные данной функции, либо являются слишком громоздкими и сложными как для исследования, так и для применения.

Более важно обратить внимание на локальную сходимость таких простых и достаточно быстро сходящихся методов, как метод Ньютона и метод секущих, условия которой не так часто удается обеспечить. В связи с этим встает задача построения *гибридных алгоритмов* на базе двух или более методов, соединяя быструю сходимость одних с глобальнойходимостью других. Принципы комбинирования методов в таких алгоритмах могут быть различными. Можно начинать с глобально сходящегося “медленного” метода и подключить быстросходящийся метод на финише для уточнения значения корня. Можно сразу начать процесс вычислений “быстрым” методом, но проводить корректировку получаемых им значений, пользуясь глобально сходящимся методом. Последний подход порождает, например следующий гибридный алгоритм.

Метод Ньютона – метод половинного деления.

Шаг 0. Задать начальное приближение x_0 , положить $k = 0$.

Шаг 1. Вычислить $\tilde{x}_k = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.

Шаг 2. Если $|f(\tilde{x}_k)| < |f(x_k)|$, то $x_{k+1} := \tilde{x}_k$,
иначе $\tilde{x}_k := 0.5(x_k + \tilde{x}_k)$ и возвратиться к началу шага 2.

Шаг 3. Проверить на останов (работа алгоритма либо прекращается с $\xi := x_{k+1}$, либо продолжается переходом к шагу 1 с $k := k + 1$).

Приведенный алгоритм учитывает, что метод Ньютона вырабатывает локально правильное направление (убывания функции), но продвижение в этом направлении может оказаться чрезмерным, что и корректируется с помощью деления отрезка пополам, если не выполняется условие релаксации $|f(\tilde{x}_k)| < |f(x_k)|$ в шаге 2, как показано на рисунке 1.6.

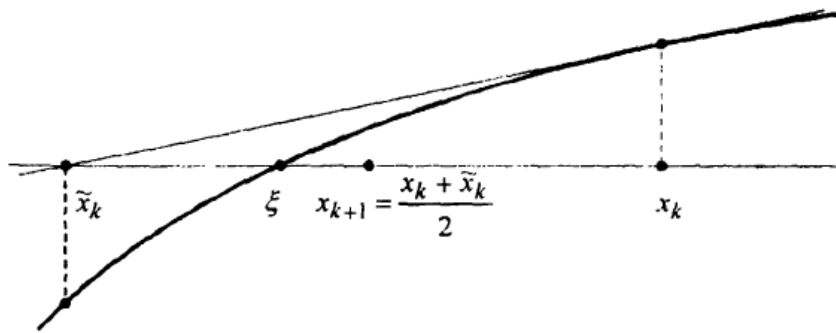


Иллюстрация одного шага гибридного метода Ньютона-половинного деления



Пример поведения гибридного метода Ньютона-половинного деления, когда x_{k+1} дальше от корня ξ , чем x_k

Рис. 1.6. Приближения к корню нелинейного уравнения гибридным методом

Такой гибрид трудно считать глобально сходящимся (см. пример выше, когда x_{k+1} дальше от корня ξ , чем x_k), но он позволяет расширить границы применимости метода Ньютона и вести процесс поиска корня в условиях неопределенности знаков производных. Этот алгоритм является схематичным и требует детализовки. Особенно важно решить, как в тех или иных случаях выполнить шаг 3. Большую роль здесь играет правильное сопряжение задаваемой точности решения задачи с погрешностью метода и с точностью выполнения арифметических операций на используемой ЭВМ (вычислительной погрешностью), а также с точностью вычисления значений функций.

1.1.7. Задача о неподвижной точке

Все расчетные формулы, определяющие уже изученные методы решения скалярных уравнений (1.1), такие как метод Ньютона и его модификации, имеют вид

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.24)$$

где $\varphi(x)$ – некоторая функция, для каждого метода своя, так или иначе связанная с исходной функцией $f(x)$. Процесс построения итерационной последовательности $\{x_k\}$ по формуле (1.24) определяет **метод простых итераций (МПИ)**.

Функцию $\varphi(x)$ будем считать непрерывной в исследуемой области оси Ox . Поэтому, если определяемая формулой (1.24) последовательность $\{x_k\}$ окажется сходящейся к некоторому числу ξ , то переходя к пределу в равенстве (1.24), получаем $\xi = \varphi(\xi)$, т.е. $\xi = \lim_{x \rightarrow \infty} x_k$ – корень уравнения

$$x = \varphi(x). \quad (1.25)$$

Решение уравнений такого вида, наряду с (1.1), представляет самостоятельный интерес; нахождение их корней называется **задачей о неподвижной точке**. Это название связано с тем,

что точка ξ при отображении $\varphi: \mathbb{R}_1 \rightarrow \mathbb{R}_1$ остается на месте (если разумеется, такая существует).

Существование и единственность корня уравнения (1.25) основывается на **принципе сжимающих отображений** или, иначе, **принципе неподвижной точки**.

Непрерывная функция $\varphi(x)$ называется **сжимающей** на отрезке $[a, b]$, если:

- 1) $\varphi(x) \in [a, b], \forall x \in [a, b]$;
- 2) $\exists q \in (0; 1): |\varphi(x_2) - \varphi(x_1)| \leq q|x_2 - x_1| \quad \forall x_1, x_2 \in [a, b]$.

Графическое толкование применения сжимающего отображения φ (как функции множества) к промежутку сжатия $[a, b]$ предоставляет рисунок 1.7.

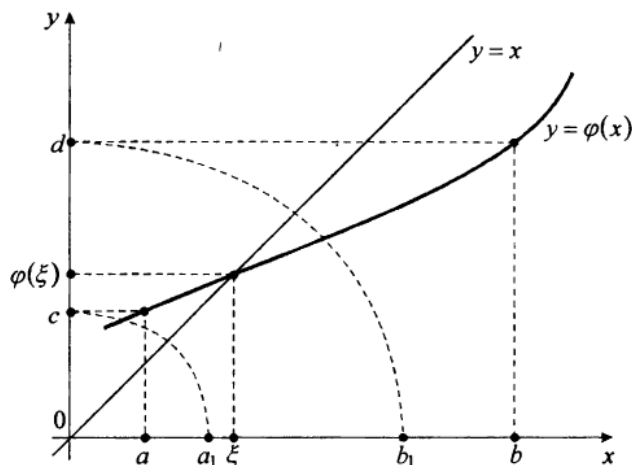


Рис. 1.7. Сжатие отрезка $[a, b]$ возрастающей функции $\varphi(x)$

Как видно из этого рисунка, если $[a, b]$ рассматривать как область определения сжатия $\varphi(x)$, то соответствующая ей область значений $[\varphi(a), \varphi(b)]$ на оси ординат (отрезок $[c, d]$), будучи перенесенным на ось абсцисс (отрезок $[a_1, b_1]$), целиком содержится в $[a, b]$. Применяя к $[a_1, b_1]$ те же рассуждения, что и к $[a, b]$, получим $[a_2, b_2] \subset [a_1, b_1]$ и т.д.

В итоге образуется бесконечная последовательность вложенных отрезков

$$[a, b] \supset [a_1, b_1] \supset [a_2, b_2] \supset \dots \supset [a_k, b_k] \supset \dots,$$

причем их длины убывают по закону

$$b_k - a_k \leq q^k(b - a) \rightarrow 0, \quad \text{при } k \rightarrow \infty.$$

Следовательно, в условиях сжатия эта последовательность имеет единственную точку ξ , которая переходит сама в себя, т.е. является неподвижной точкой отображения φ . При этом, очевидно, последовательность $\{a_k\}$ левых концов этих промежутков монотонно сходится к ξ слева, а последовательность $\{b_k\}$ – правых концов – справа. Так как при условии возрастания $\varphi(x)$, как это показано на рис. 1.7, в этом процессе

$$\begin{aligned} a_1 &= \varphi(a), & a_2 &= \varphi(a_1), & a_3 &= \varphi(a_2), & \dots, \\ b_1 &= \varphi(b), & b_2 &= \varphi(b_1), & b_3 &= \varphi(b_2), & \dots, \end{aligned}$$

то можно утверждать, что МПИ (1.24) будет давать монотонно сходящуюся к ξ последовательность, если ее начинать с $x_0 = a$ или $x_0 = b$. Так же монотонно возрастающая и монотонно убывающая последовательности приближений будут получаться по формуле (1.24) и в случаях, когда за x_0 будет браться любая точка из промежутков $[a, \xi)$ и $(\xi, b]$ соответственно.

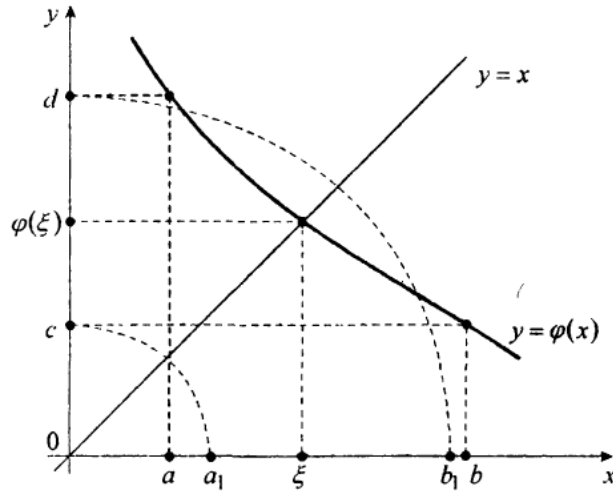


Рис. 1.8. Сжатие отрезка $[a, b]$ убывающей функции $\varphi(x)$

При условии убывания сжимающей функции $\varphi(x)$, т.е. в случае, изображенном на рис. 1.8, начинающиеся с концов a и b промежутка сжатия последовательности выстраиваются следующим образом:

$$a, b_1 = \varphi(a), \quad a_2 = \varphi(b_1), \quad b_3 = \varphi(a_2), \dots \\ b, a_1 = \varphi(b), \quad b_2 = \varphi(a_1), \quad a_3 = \varphi(b_2), \dots$$

Каждая из них сходится к неподвижной точке ξ , и элементы каждой из этих последовательностей с удалением от начала дают все более хорошие приближения то с недостатком, то с избытком. Таковую сходимость к ξ имеет и любая другая последовательность $\{x_k\}$, получаемая по формуле (1.24) при любом $x_0 \in [a, b]$. Отсюда другой термин, применяемый к неподвижной точке ξ , – *центр итерации*.

Более удобно иллюстрировать геометрически поведение итерационной последовательности $\{x_k\}$, определяемой МПИ (1.24), не отмечая значения $\varphi(x_k)$ на оси ординат, а отражая их на ось абсцисс с помощью биссектрисы координатного угла $y = x$. Такие иллюстрации для случаев монотонного возрастания (ломаная “ступеньки”) и монотонного убывания (ломаная “спираль”) сжимающей функции $\varphi(x)$ показаны на рис. 1.9, 1.10 соответственно.

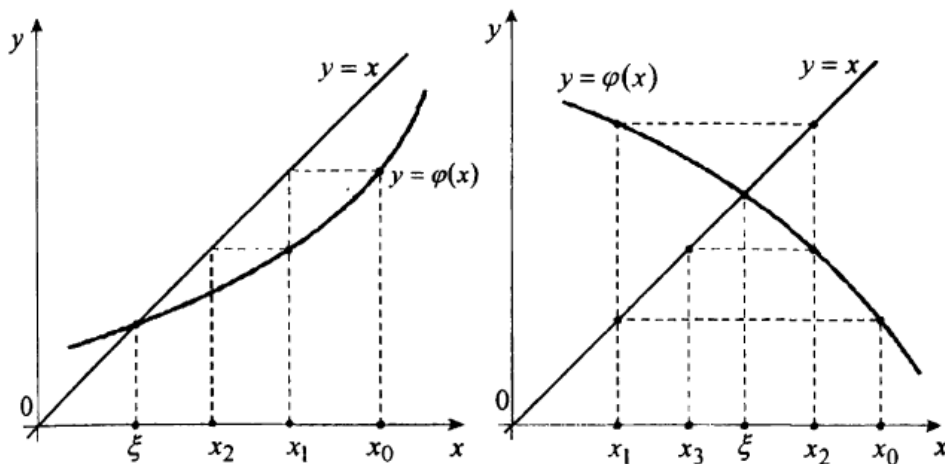


Рис. 1.9, 1.10. Монотонные и двусторонние приближения к корню методом простых итераций

Итогом проведения выше рассуждений является следующий вывод: если на промежутке $[a, b]$ функция $\varphi(x)$ удовлетворяет условиям сжатия, то:

- 1) уравнение (1.24) имеет и при том единственный корень $\xi \in [a, b]$;
- 2) к этому корню со скоростью геометрической прогрессии сходится определяемая МПИ (1.24) последовательность $\{x_k\}$, начинающаяся с любого $x_0 \in [a, b]$, причем скорость сходимости тем выше, чем меньше *коэффициент сжатия* $q \in (0; 1)$;
- 3) если функция $\varphi(x)$ монотонно возрастает на $[a, b]$, то приближения x_k к ξ также будут монотонными, если же $\varphi(x)$ убывает, то процесс (1.24) порождает двусторонние приближения к корню ξ .

Теорема 1.6. Пусть функция $\varphi(x)$ определена и дифференцируема на отрезке $[a, b]$. Тогда, если выполняются условия:

- 1) $\varphi(x) \in [a, b] \quad \forall x \in [a, b]$,
- 2) $\exists q: |\varphi'(x)| \leq q < 1 \quad \forall x \in (a, b)$,

то уравнение (1.24) имеет и при том единственный на $[a, b]$ корень ξ ; к этому корню сходится определяемая методом простых итераций (1.24) последовательность $\{x_k\}$, начинающаяся с любого $x_0 \in [a, b]$; при этом справедливы оценки погрешности $\forall k \in \mathbb{N}$:

$$|\xi - x_k| \leq \frac{q}{1 - q} |x_k - x_{k-1}|, \quad (1.26)$$

$$|\xi - x_k| \leq \frac{q^k}{1 - q} |x_1 - x_0|. \quad (1.27)$$

Полученные для МПИ оценки погрешности (1.26) и (1.27) можно использовать в практических вычислениях как для завершения итерационного процесса (1.24) по правилу:

$$|x_k - x_{k-1}| \leq \frac{1 - q}{q} \varepsilon,$$

так и для предварительного подсчета числа итераций, достаточного для получения корня с заданной точностью ε :

$$\frac{q^k}{1 - q} |x_1 - x_0| \leq \varepsilon.$$

Рассмотрим связь уравнения (1.1) и задачей о неподвижной точке – уравнением (1.25). Переписав (1.25) в виде $x - \varphi(x) = 0$, можно сказать, что уравнение (1.1) с $f(x) = x - \varphi(x)$, и применять все рассмотренные в предыдущих пунктах рассуждения и методы.

Приведение уравнения (1.1) к виду (1.25) можно осуществлять множеством способов, но при этом всегда следует помнить, что это приведение нужно выполнять так, чтобы полученное уравнение соответствующего вида было не только эквивалентным (1.1), но и удовлетворяло условиям в теореме 1.6. Кроме того могут учитываться такие требования к получающемуся методу итераций, как простота расчетной формулы, быстрота сходимости (малость q), характер сходимости (монотонность или двусторонность приближений). Если уравнение (1.1) имеет несколько корней, то для каждого из них формируется своя задача о неподвижной точке.

В общем случае переход от (1.1) к (1.25) осуществляют так: умножают левую и правую части уравнения (1.1) на отличный от нуля параметр – λ и к обеим частям прибавляют по x ; в результате получается равносильное (1.1) уравнение

$$x = x - \lambda f(x). \quad (1.28)$$

Которое имеет вид (1.25) с $\varphi(x) = x - \lambda f(x)$. Далее параметр λ подбирается таким образом, чтобы производная $\varphi'(x) = 1 - \lambda f'(x)$ в нужной области была малой по модулю (а если надо, то чтобы имела и определенный знак).

1.2. Задание

Используя метод половинного деления и метод, указанный в варианте, вычислить с точностью до 10^{-3} действительные корни заданного уравнения.

1. $x^3 - 2.8x^2 - 6.2x + 3.7 = 0$, метод Ньютона;
2. $x^3 - 9.9x^2 + 31.5x - 31.9 = 0$, метод секущих;
3. $x^3 + 0.3x^2 - 5.7x + 2.2 = 0$, конечно-разностный метод Ньютона;
4. $x^3 - 0.8x^2 - 6.8x + 0.7 = 0$, гибридный метод;
5. $x^3 - 0.9x^2 - 22.0x - 30.8 = 0$, упрощенный метод Ньютона;
6. $x^3 - 5.4x^2 - 2.5x + 12.5 = 0$, метод Ньютона;
7. $x^3 - 4.7x^2 + 4.1x + 0.5 = 0$, метод секущих;
8. $x^3 - 7.5x^2 + 15.9x - 7.8 = 0$, конечно-разностный метод Ньютона;
9. $x^3 - 4.4x^2 + 4.7x - 1.1 = 0$, гибридный метод;
10. $x^3 - 4.8x^2 + 3.3x + 5 = 0$, упрощенный метод Ньютона;
11. $x^3 - 2.7x^2 - 3.5x + 0.8 = 0$, метод Ньютона;
12. $x^3 - 3.9x^2 + 4.4x - 1.4 = 0$, метод секущих;
13. $x^3 - 4.2x^2 + 3.1x + 2.7 = 0$, конечно-разностный метод Ньютона;
14. $x^3 + 8.5x^2 + 21.8x + 15.6 = 0$, гибридный метод;
15. $x^3 - 1.6x^2 - 2.4x + 0.3 = 0$, упрощенный метод Ньютона;
16. $x^3 - 0.9x^2 - 22.0x - 30.8 = 0$, метод Ньютона;
17. $x^3 - 5.9x^2 + 11.1x - 6.7 = 0$, метод секущих;
18. $x^3 - 7.2x^2 + 16.5x - 11.9 = 0$, конечно-разностный метод Ньютона;
19. $x^3 + 4.1x^2 + 3.6x - 0.4 = 0$, гибридный метод;
20. $x^3 - 7.3x^2 + 13.5x - 5 = 0$, упрощенный метод Ньютона;
21. $x^3 - 6.7x^2 + 11.6x - 2 = 0$, метод Ньютона;
22. $x^3 - 3.3x^2 - 1.6x + 1.7 = 0$, метод секущих;
23. $x^3 - 2.1x^2 - 2.6x + 1.7 = 0$, конечно-разностный метод Ньютона;
24. $x^3 - 3.6x^2 + 3.3x - 0.5 = 0$, гибридный метод;
25. $x^3 - 0.5x^2 - 2.2x - 1.1 = 0$, упрощенный метод Ньютона.

Программа, реализующая данное задание, должна включать в себя:

- вывод графика(ов) функции(ий);
- ввод границ интервалов, в которых находятся корни уравнения (для метода половинного деления);
- ввод начального приближения;
- подсчет числа итераций;
- определение того, насколько вычисленные корни являются точными.

или иначе, в компактной записи,

$$x = \Phi(x), \quad (2.2a)$$

где

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \\ \dots \\ \varphi_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}.$$

Для этой **задачи о неподвижной точке** нелинейного отображения $\Phi: \mathbb{R}_n \rightarrow \mathbb{R}_n$ запишем формальное рекуррентное равенство:

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}), k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.3)$$

которое определяет **метод простых итераций (МПИ)** (или **метод последовательных приближений**) для задачи (2.2).

Если начать процесс построения последовательности $\{x^{(k)}\}$ некоторого вектора $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T$ и продолжить по формуле (2.3), то при определенных условиях эта последовательность со скоростью геометрической прогрессии будет приближаться к вектору x^* – неподвижной точке отображения $\Phi(x)$. А именно, справедлива следующая теорема.

Теорема 2.1. Пусть функция $\Phi(x)$ и замкнутое множество $M \subseteq D(\Phi) \subseteq \mathbb{R}_n$ таковы, что:

- 1) $\Phi(x) \in M \forall x \in M$;
- 2) $\exists q < 1: \|\Phi(x) - \Phi(\tilde{x})\| \leq q\|x - \tilde{x}\|, \forall x, \tilde{x} \in M$.

Тогда $\Phi(x)$ имеет в M единственную неподвижную точку ξ ; последовательность $\{x^{(k)}\}$, определяемая МПИ (2.3), при любом $x^{(0)}$, сходится к ξ и справедливы оценки

$$\|\xi - x^{(k)}\| \leq \frac{q}{1-q} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Вместо (2.3) можно реализовать следующий **метод покоординатных итераций**:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \varphi_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{n-1}^{(k)}, x_n^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} = \varphi_2(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{n-1}^{(k)}, x_n^{(k)}), \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = \varphi_n(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{n-1}^{(k+1)}, x_n^{(k)}). \end{cases} \quad (2.4)$$

Заметим, что как и для линейных систем, отдельные уравнения в методе (2.4) неравноправны, т.е. перемена местами уравнений системы (2.2) может изменить в каких-то пределах число итераций и вообще ситуацию со сходимостью последовательности итераций. Чтобы применить метод простых итераций (2.3) и его зейделеву модификацию (2.4) к исходной системе (2.1), нужно, как и в скалярном случае, сначала тем или иным способом привести ее к виду (2.2). Это можно сделать, например, умножив (2.1a) на некоторую неособенную $n \times n$ – матрицу – A и прибавив к обеим частям уравнения $-AF(x) = 0$ вектор неизвестных.

Полученная система

$$x = x - AF(x)$$

эквивалентна данной и имеет вид задачи о неподвижной точке (2.2a). Проблема теперь состоит лишь в подборе матричного параметра A такого, при котором вектор-функция

$$x = x - AF(x)$$

обладала бы нужными свойствами.

2.1.2. Метод Ньютона и его модификации

Пусть $\{A_k\}$ – некоторая последовательность невырожденных вещественных $n \times n$ – матриц. Тогда, очевидно, последовательность задач

$$x = x - A_k F(x), \quad k = 0, 1, \dots$$

имеет те же решения, что и исходное уравнение (2.1a), и для приближенного нахождения этих решений можно формально задействовать итерационный процесс

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - A_k F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (2.5)$$

имеющий вид метода простых итераций (2.3) при $\Phi(x) = x - A_k F(x)$.

В случае $A_k \equiv A$ это, как показано в конце предыдущего параграфа, – действительно МПИ с линейной сходимостью последовательности $\{x^{(k)}\}$. Если же A_k различны при разных k , то формула (2.5) определяет большое семейство итерационных методов с матричными параметрами A_k . Рассмотрим некоторые из методов этого семейства.

Положим $A_k = [F'(x^{(k)})]^{-1}$, где

$$F'(x) = J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

– матрица Якоби вектор-функции $F(x)$. Подставив A_k это в (2.5), получаем явную формулу **метода Ньютона**

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [F'(x^{(k)})]^{-1} F(x^{(k)}), \quad (2.6)$$

обобщающего на многомерный случай скалярный метод Ньютона (1.8). Эту формулу, требующую обращения матриц на каждой итерации, можно переписать в неявном виде:

$$F'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = -F(x^{(k)}). \quad (2.7)$$

Применение (2.7) предполагает при каждом $k = 0, 1, \dots$ решение линейной алгебраической системы

$$F'(x^{(k)})p^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

относительно **векторной поправки** $p^k = (p_1^{(k)}, p_2^{(k)}, \dots, p_n^{(k)})^T$, а затем прибавление этой поправки к текущему приближению для получения следующего:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}.$$

К решению таких линейных систем можно привлекать самые разные методы как прямые, так и итерационные в зависимости от размерности n решаемой задачи и специфики матриц Якоби $J(x^{(k)})$ (например, можно учитывать их симметрию, разреженность и т.п.).

Сравнивая (2.7) с формальным разложением $F(x)$ в ряд Тейлора

$$F(x) = F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) + \frac{1}{2!} F''(x^{(k)})(x - x^{(k)})^2 + \dots,$$

видим, что последовательность $\{x^{(k)}\}$ в методе Ньютона получается в результате подмены при каждом $k = 0, 1, \dots$ нелинейного уравнения $F(x) = 0$ или, что тоже (при достаточной гладкости $F(x)$), уравнения

$$F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) + \frac{1}{2!}F''(x^{(k)})(x - x^{(k)})^2 + \dots = 0$$

линейным уравнением

$$F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0,$$

т.е. с пошаговой линеаризацией. Можно рассчитывать, что при достаточной гладкости $F(x)$ и достаточно хорошем детальном приближении $x^{(0)}$ сходимость порождаемой методом Ньютона последовательности $\{x^{(k)}\}$ к решению ξ будет квадратичной и в многомерном случае. Новым, по сравнению со скалярным случаем, фактором, осуществляющим применение метода Ньютона к решению n -мерных систем является необходимость решения n -мерных линейных уравнений на каждой итерации (обращения матриц в (2.6) или решение СЛАУ в (2.7)), вычислительные затраты на которые растут с ростом n , вообще говоря, непропорционально быстро. Уменьшение таких затрат – одно из направлений модификации метода Ньютона. Если матрицу Якоби $F'(x)$ вычислить и обратить один раз в начальной точке $x^{(0)}$, то от метода Ньютона (2.6) перейдем к **модифицированному методу Ньютона**

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [F'(x^{(0)})]^{-1}F(x^{(k)}). \quad (2.8)$$

Этот метод требует значительно меньших вычислительных затрат на один итерационный шаг, но итераций при этом может потребоваться значительно больше для достижения заданной точности по сравнению с основным методом Ньютона, поскольку, он имеет скорость сходимости геометрической прогрессии.

На базе метода Ньютона (2.6) можно построить близкий к нему по поведению итерационный процесс, не требующий вычисления производных. Сделаем это, заменив частные производные в матрице Якоби $J(x)$ разностными отношениями, т.е. подставив в формулу (2.5) вместо A_k матрицу $[J(x^{(k)}, h^{(k)})]^{-1}$, где

$$J(x, h) = \frac{f_i(x_1, \dots, x_j + h_j, \dots, x_n) - f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_n)}{h_j}, i, j = 1, 2, \dots, n.$$

При удачном задании последовательности малых векторов $h^{(k)} = (h_1^{(k)}, h_2^{(k)}, \dots, h_n^{(k)})^T$ (постоянной или сходящейся к нулю) полученный таким путем **разностный метод Ньютона**

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [J(x^{(k)}, h^{(k)})]^{-1}F(x^{(k)}) \quad (2.9)$$

имеет сверхлинейную, вплоть до квадратичной, скорость сходимости и обобщает на многомерный случай метод (1.20). При задании векторного параметра h – шага дискретизации – следует учитывать точность машинных вычислений, точность вычисления значений функции f_i .

Можно связать задание последовательности $\{h^{(k)}\}$ с какой-либо сходящейся к нулю векторной последовательностью, например, с последовательностью невязок $\{F(x^{(k)})\}$ или поправок $\{p^{(k)}\}$. Так, полагая $h_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - x_j^{(k)}$, где $j = 1, 2, \dots, n$, $k = 1, 2, \dots$, приходим к **методу секущих** – обобщение скалярного метода секущих (3.23):

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [B(x^{(k)}, h^{(k-1)})]^{-1}F(x^{(k)}), \quad (2.10)$$

где

$$B(x^{(k)}, h^{(k-1)}) = \frac{f_i(x_1^{(k)}, \dots, x_j^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k)}) - f_i(x_1^{(k)}, \dots, x_j^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{x_j^{(k-1)} - x_j^{(k)}}, i, j = 1, 2, \dots, n, \\ k = 1, 2, \dots$$

Этот метод является двухшаговым и требует задания двух начальных приближений $x^{(0)}$ и $x^{(1)}$.

Для останова процесса вычислений в быстросходящихся методах таких, как метод Ньютона, методы секущих и т.п., часто вполне успешно применяют критерий:

$$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| < \varepsilon.$$

Отслеживать факт сходимости в процессе итераций для того, чтобы реагировать на возможную расходимость в случаях, когда заранее не обеспечены условия сходимости применяемого метода, можно с помощью текущих проверок на уменьшение от шага к шагу поправок и невязок, т.е. выполнение неравенств

$$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| < \|x^{(k-1)} - x^{(k-2)}\| \text{ и } \|F(x^{(k)})\| < \|F(x^{(k-1)})\|.$$

2.2. Задание

Используя метод Ньютона и любую его модификацию (для сравнения) найти с точностью до 5 значащих цифр решение системы нелинейных уравнений. Для определения начального приближения использовать графический метод решения задачи.

$$1. \begin{cases} \sin(x + 1) - y = 1.2; \\ 2x + \cos y = 2. \end{cases}$$

$$2. \begin{cases} \sin(x) + 2y = 2; \\ 2x + \cos(y - 1) = 0.7. \end{cases}$$

$$3. \begin{cases} \sin(x + 0.5) - y = 1; \\ x + \cos(y - 2) = 0. \end{cases}$$

$$4. \begin{cases} \cos(x + 0.5) - y = 2; \\ \sin y - 2x = 1. \end{cases}$$

$$5. \begin{cases} \sin(y + 1) - x = 1.2; \\ 2y + \cos x = 2. \end{cases}$$

$$6. \begin{cases} \sin(x + 1) - y = 1.2; \\ 2x + \cos y = 2. \end{cases}$$

$$7. \begin{cases} \sin(x) + 2y = 2; \\ 2x + \cos(y - 1) = 0.7. \end{cases}$$

$$8. \begin{cases} \sin(x + 0.5) - y = 1; \\ x + \cos(y - 2) = 0. \end{cases}$$

$$9. \begin{cases} \cos(x + 0.5) - y = 2; \\ \sin y - 2x = 1. \end{cases}$$

$$10. \begin{cases} \sin(y + 1) - x = 1.2; \\ 2y + \cos x = 2. \end{cases}$$

$$11. \begin{cases} \sin(x + 1) - y = 1.2; \\ 2x + \cos y = 2. \end{cases}$$

$$12. \begin{cases} \sin(x) + 2y = 2; \\ 2x + \cos(y - 1) = 0.7. \end{cases}$$

$$13. \begin{cases} \sin(x + 0.5) - y = 1; \\ x + \cos(y - 2) = 0. \end{cases}$$

$$14. \begin{cases} \cos(x + 0.5) - y = 2; \\ \sin y - 2x = 1. \end{cases}$$

$$15. \begin{cases} \sin(y + 1) - x = 1.2; \\ 2y + \cos x = 2. \end{cases}$$

$$16. \begin{cases} \sin(x + 1) - y = 1.2; \\ 2x + \cos y = 2. \end{cases}$$

$$17. \begin{cases} \sin(x) + 2y = 2; \\ 2x + \cos(y - 1) = 0.7. \end{cases}$$

$$18. \begin{cases} \sin(x + 0.5) - y = 1; \\ x + \cos(y - 2) = 0. \end{cases}$$

$$19. \begin{cases} \cos(x + 0.5) - y = 2; \\ \sin y - 2x = 1. \end{cases}$$

$$20. \begin{cases} \sin(y + 1) - x = 1.2; \\ 2y + \cos x = 2. \end{cases}$$

$$21. \begin{cases} \sin(x + 1) - y = 1.2; \\ 2x + \cos y = 2. \end{cases}$$

$$22. \begin{cases} \sin(x) + 2y = 2; \\ 2x + \cos(y - 1) = 0.7. \end{cases}$$

$$23. \begin{cases} \sin(x + 0.5) - y = 1; \\ x + \cos(y - 2) = 0. \end{cases}$$

$$24. \begin{cases} \cos(x + 0.5) - y = 2; \\ \sin y - 2x = 1. \end{cases}$$

$$25. \begin{cases} \sin(y + 1) - x = 1.2; \\ 2y + \cos x = 2. \end{cases}$$

Программа, реализующая данное задание, должна включать в себя:

- вывод графика(ов) функции(ий);
- ввод начального приближения;
- подсчет числа итераций;
- определение того, насколько вычисленные корни являются точными.

3. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3. Приближение функций

3.1. Теоретические сведения

3.1.1. Постановка задачи

Вычисление значения функции $y = f(x)$ – одна из тех задач, с которой постоянно на практике приходится сталкиваться. Естественно, что при решении на ЭВМ серьезных задач, желательно иметь быстрые и надежные алгоритмы вычисления значений используемых функций. На практике часто используются функции, непосредственное вычисление которых затруднено либо приводит к слишком большим затратам машинного времени. Рассмотрим типичные случаи.

1. Функция f задана таблицей своих значений:

$$y_i = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

а вычисления производятся в точках x , не совпадающих с табличными.

2. Непосредственное вычисление значения $y = f(x)$ связано с проведением сложных расчетов и приводит к значительным затратам машинного времени, которые могут оказаться неприемлемыми, если функция f вычисляется многократно.

3. При заданном значении x значение $f(x)$ может быть найдено из эксперимента. Ясно, что такой способ "вычисления" в большинстве случаев нельзя использовать в вычислительных алгоритмах, так как он связан с необходимостью прерывания вычислительного процесса для проведения эксперимента. Правда, в некоторых алгоритмах такое прерывание естественно, например, если ЭВМ используется для управления технологическим процессом, сложной технической системой или включена в систему обработки и планирования физического эксперимента. В этой ситуации экспериментальные данные получают до начала вычислений на ЭВМ. Нередко они представляют собой таблицу типа (3.1) с тем отличием, что табличные значения y_i^* отличаются от "истинных" значений y_i , так как заведомо содержат ошибки эксперимента.

Возникающие проблемы нередко удается решить следующим образом. Функцию $f(x)$ приближенно заменяют другой функцией $g(x)$, вычисляемые значения которой и принимают за приближенные значения функции f . Рассмотрим вопросы, с которыми в каждом конкретном случае приходится сталкиваться при выборе постановки задачи приближения и метода ее решения.

1. Необходимо решить, какую информацию о функции f можно использовать как входные данные для вычисления приближения g . Например, часто известна или может быть получена таблица значений функции вида (3.1), а иногда – таблица ее производных. В некоторых случаях можно использовать информацию о значениях функции на всем отрезке $[a, b]$.

2. Полезно иметь некоторую дополнительную априорную информацию об аппроксимируемой функции. Часто она бывает качественного характера, например, известно, что функция f "достаточно гладкая" ("плавно меняющаяся"), периодическая, монотонная, четная и т. п. Иногда удается получить некоторые количественные характеристики функции f , например, бывают известны верхние оценки для максимума модуля некоторых ее производных, величина периода, оценка уровня погрешности в заданных значениях.

3. Значение свойств функции f позволяет осознанно выбрать класс G аппроксимирующих функций. Часто такой класс представляет собой параметрическое семейство функций вида $y = g(x, a) = (x, \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m)$ и выбор аппроксимирующей функции g осуществляется с помощью выбора параметров $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m$. Широко используются классы функций вида

$$\Phi_m(x) = \alpha_0 \varphi_0(x) + \alpha_1 \varphi_1(x) + \dots + \alpha_m \varphi_m(x), \quad (3.2)$$

являющихся линейными комбинациями фиксированного набора некоторых функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$. Функцию $\Phi_m(x)$ часто называют **обобщенным многочленом** по системе функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$, а число m – его **степенью**.

Если в качестве базисных функций берутся степенные функции $\varphi_k(x) = x^k$, то возникает задача приближения алгебраическими многочленами

$$P_m(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_m x^m. \quad (3.3)$$

Отметим, что методы приближения функций алгебраическими многочленами играют важную роль в численном анализе и наиболее глубоко разработаны. Одна из причин этого состоит в том, что многочлены (3.3) легко вычисляются, без труда дифференцируются и интегрируются.

Тригонометрические многочлены

$$S_m(x) = \alpha_0 + \sum_{1 \leq k \leq m/2} (\alpha_k \cos 2\pi kx + \beta_k \sin 2\pi kx) \quad (3.4)$$

часто используемые для аппроксимации периодических на отрезке $[0, 1]$ функций, также могут быть записаны в виде (3.2), если в качестве базисных функций выбрать функции $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = \cos 2\pi x, \varphi_2(x) = \sin 2\pi x, \varphi_3(x) = \cos 4\pi x, \varphi_4(x) = \sin 4\pi x, \dots$

Используя формулу Эйлера $e^{iy} = \cos y + i \sin y$, можно записать тригонометрический многочлен (3.4) в виде

$$S_m(x) = \alpha_0 + \sum_{-m/2 \leq k \leq m/2} \alpha_k e^{2\pi i kx}, \quad (3.5)$$

что соответствует выбору базисных функций $\varphi_k(x) = e^{2\pi i kx}, -m/2 \leq k \leq m/2$.

Используются также и некоторые нелинейные комбинации функций, отличные от (3.2). Например, в ряде случаев эффективным является использование класса дробно-рациональных функций

$$\frac{\alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_m x^m}{1 + b_1 x + \dots + b_k x^k}.$$

Выбор класса G аппроксимирующих функций осуществляется с учетом того, насколько хорошо может быть приближена функция f функциями из этого класса.

4. Необходим критерий выбора в классе G конкретной аппроксимирующей функции g , влияющей в смысле этого критерия наилучшим приближением к f . Например, требование совпадения функции g с функцией f в некоторых фиксированных точках приводит к задаче интерполяции. Другой распространенный критерий – требование минимизации среднеквадратичного отклонения – лежит в основе метода наименьших квадратов. Существует большое число других критериев, естественных в конкретных прикладных проблемах.

5. Важно понимать, что решение указанных выше вопросов тесно связано с тем, как мы собираемся использовать приближение g и какая точность нам нужна.

3.1.2. Интерполяция обобщенными многочленами

Пусть в точках x_0, x_1, \dots, x_n , расположенных на отрезке $[a, b]$ и попарно различных, задана таблица (3.1) значений некоторой функции f . Задача интерполяции состоит в построении функции g , удовлетворяющей условию

$$g(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, \dots, n). \quad (3.6)$$

Другими словами, ставится задача о построении функции g , график которой проходит через заданные точки (x_i, y_i) . Указанный способ приближения функций принято называть **интерполяцией** (или **интерполированием**), а точки x_i – **узлами интерполяции**.

Нетрудно видеть, что выбор функции g неоднозначен, так как по заданной таблице можно построить бесконечно много интерполирующих функций. На практике, как правило, функцию g выбирают из достаточно узкого класса G функций, в котором единственность выбора гарантируется.

Пусть x_{min} и x_{max} – минимальный и максимальный из узлов интерполяции. В случае, когда интерполяция используется для вычисления приближенного значения функции f в точке x , не принадлежащей отрезку $[x_{min}, x_{max}]$ (**отрезку наблюдения**), принято говорить о том, что осуществлять **экстраполяцию**. Этот метод приближения часто используют с целью прогнозирования характера протекания тех или иных процессов при значениях параметров x , выходящих за пределы отрезка наблюдения. Заметим, что надежность такого прогноза при значениях x , удаленных на значительное расстояние от отрезка $[x_{min}, x_{max}]$, как правило, невелика.

Рассмотрим более подробно задачу интерполяции обобщенными многочленами $\Phi_m(x)$ вида (3.2). Назовем обобщенный многочлен $\Phi_m(x)$ **интерполяционным**, если он удовлетворяет условию

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

или, что то же самое, системе линейных алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \varphi_0(x_0)\alpha_0 + \varphi_1(x_0)\alpha_1 + \dots + \varphi_m(x_0)\alpha_m &= y_0, \\ \varphi_0(x_1)\alpha_0 + \varphi_1(x_1)\alpha_1 + \dots + \varphi_m(x_1)\alpha_m &= y_1, \\ \dots & \dots \dots \dots, \\ \varphi_0(x_n)\alpha_0 + \varphi_1(x_n)\alpha_1 + \dots + \varphi_m(x_n)\alpha_m &= y_n \end{aligned} \quad (3.7)$$

относительно коэффициентов $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$.

Заметим, что систему уравнений (3.7) можно записать в следующем виде:

$$Pa = y, \quad (3.8)$$

где

$$P = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \dots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \dots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}, \quad a = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}.$$

Решая данную систему линейных уравнений, мы находим коэффициенты $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$, а затем и вид обобщенного многочлена.

3.1.3. Полиномиальная интерполяция

Интерполяционный многочлен.

Начнем с рассмотрения задачи интерполяции в наиболее простом и полном исследованном случае интерполирования алгебраическими многочленами. Для заданной таблицы (3.1) многочлен $P_n(x) = \sum_{k=0}^n \alpha_k x^k$ степени n называется **интерполяционным многочленом**, если он удовлетворяет условиям

$$P_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (3.9)$$

Равенство (3.9) можно записать аналогично (3.7) в виде системы уравнений

$$\begin{aligned} \alpha_0 + \alpha_1 x_0 + \alpha_2 x_0^2 + \dots + \alpha_n x_0^n &= y_0 \\ \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_1^2 + \dots + \alpha_n x_1^n &= y_1 \\ \dots & \dots \dots \\ \alpha_0 + \alpha_1 x_n + \alpha_2 x_n^2 + \dots + \alpha_n x_n^n &= y_n \end{aligned} \quad (3.10)$$

относительно коэффициентов многочлена. Эта система однозначно разрешима, так как система функций $1, x, x^2, \dots, x^n$ линейно независима в точках x_0, x_1, \dots, x_n . Однозначная разрешимость системы (3.10) следует и из того хорошо известного факта, что определитель этой системы определитель Вандермонда

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

отличен от нуля, если узлы интерполяции попарно различны. Таким образом, верна следующая теорема.

Теорема 3.1. *Существует единственный интерполяционный многочлен степени n , удовлетворяющий условиям (3.9).*

Замечание. На практике система (3.10) никогда не используется для вычисления коэффициентов интерполяционного многочлена. Дело в том, что часто она является плохо обусловленной. Кроме того, существуют различные удобные явные формы записи интерполяционного многочлена, которые и принимаются при интерполяции. Наконец, в большинстве приложений интерполяционного многочлена явное вычисление коэффициентов α_k не нужно.

Многочлен Лагранжа. Приведем одну из форм записи интерполяционного многочлена – **многочлен Лагранжа**

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j l_{nj}(x). \quad (3.11)$$

Здесь

$$l_{nj}(x) = \prod_{\substack{k=0, \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k} = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \dots (x - x_n)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \dots (x_j - x_n)}.$$

Как нетрудно видеть, $l_{nj}(x)$ представляет собой многочлен степени n , удовлетворяющий условию $l_{nj}(x) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$

Таким образом, степень многочлена L_n равна n и при $x = x_i$ в сумме (3.11) обращаются в ноль все слагаемые, кроме слагаемого с номером $j = i$, равного y_i . Поэтому многочлен Лагранжа (3.11) действительно является интерполяционным.

Замечание 1. Запись интерполяционного многочлена в форме Лагранжа (3.11) можно рассматривать как его запись в виде обобщенного многочлена (3.2) по системе функций $\varphi_k(x) = l_{nk}(x)$, $k = 0, 1, \dots, n$.

Замечание 2. Как правило, интерполяционный многочлен Лагранжа используется так, что нет необходимости его преобразования к каноническому виду

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k.$$

Более того, часто такое преобразование нежелательно.

В инженерной практике наиболее часто используется интерполяция многочленами первой, второй и третьей степени (*линейная, квадратичная и кубическая интерполяции*). Приведем соответствующие формулы для записи многочленов Лагранжа первой и второй степени:

$$L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}, \quad (3.12)$$

$$L_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}. \quad (3.13)$$

Погрешность интерполяции.

Приведем без доказательства наиболее известную теорему о погрешности интерполяции.

Теорема 3.2. Пусть функция f дифференцируема $n + 1$ раз на отрезке $[a, b]$, содержащем узлы интерполяции $i = 0, 1, \dots, n$. Тогда для погрешности интерполяции в точке $x \in [a, b]$ справедливо равенство

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x), \quad (3.14)$$

в котором $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$, а ξ — некоторая точка, принадлежащая интервалу (a, b) .

Основное неудобство в использовании этой теоремы состоит в том, что входящая в формулу (3.14) для погрешности точка ξ неизвестна. Поэтому чаще используется не сама теорема, а ее следствие.

Следствие. В условиях теоремы справедлива оценка погрешности интерполяции в точке $x \in [a, b]$, имеющая вид

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)|, \quad (3.15)$$

а также оценка максимума модуля погрешности интерполяции на отрезке $\omega_{n+1}(x)$.

$$\max_{[a,b]} |f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \max_{[a,b]} |\omega_{n+1}(x)|. \quad (3.16)$$

Здесь $M_{n+1} = \max_{[a,b]} |f^{(n+1)}(x)|$. Предполагается, что производная $f^{(n+1)}(x)$ непрерывна.

Если на отрезке $[a, b]$ производная $f^{(n+1)}(x)$ меняется слабо, то величина абсолютной погрешности $|f(x) - P_n(x)|$ почти полностью определяется значением функции $\omega_{n+1}(x)$.

Пусть теперь $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ и пусть $h_i = x_i - x_{i-1}$ — i -й шаг таблицы, а $h_{\max} = \max_{1 \leq i \leq n} h_i$. Несколько огрубив оценку (3.16), можно получить следующее неравенство:

$$\max_{[x_0, x_n]} |f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} h_{\max}^{n+1}. \quad (3.17)$$

Оно позволяет утверждать, что для достаточно гладкой функции f при фиксированной степени интерполяционного многочлена погрешность интерполяции на отрезке $[x_0, x_n]$ при $h_{\max} \rightarrow 0$ стремится к нулю не медленнее, чем некоторая величина, пропорциональная h_{\max}^{n+1} . Этот факт принято формулировать так: интерполяция многочленом степени n имеет $n+1$ -й порядок точности относительно h_{\max} . В частности, линейная и квадратичная интерполяции имеют второй и третий порядок точности соответственно.

3.1.4. Минимизация оценки погрешности интерполяции. Многочлены Чебышева

Предположим, что значение заданной на отрезке $[a, b]$ функции f можно вычислить в произвольной точке x . Однако по некоторым причинам целесообразнее заменить прямое вычисление функции f вычислением значений ее интерполяционного многочлена $P_n(x)$. Для такой замены необходимо один раз получить таблицу значений функции f в выбранных на отрезке $[a, b]$ x_0, x_1, \dots, x_n точках. При этом естественно стремиться к такому выбору узлов интерполяции, который позволит сделать минимальной величину $\Delta(P_n) = \max_{[a, b]} |f(x) - P_n(x)|$ — погрешность интерполяции на отрезке $[a, b]$.

Пусть о функции f известно лишь то, что она непрерывно дифференцируема $n+1$ раз на отрезке $[a, b]$. Тогда неравенство (3.16) дает верхнюю границу погрешности интерполяции:

$$\bar{\Delta}(P_n(x)) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \max_{[a, b]} |\omega_{n+1}(x)|. \quad (3.18)$$

Поставим теперь задачу: определить набор узлов интерполяции x_0, x_1, \dots, x_n , при котором величина $\bar{\Delta}(P_n(x))$ минимальна. Для решения этой задачи нам потребуются некоторые сведения о многочленах Чебышева.

Замечание. Формула (3.18) остается справедливой и в случае, когда некоторые из узлов x_0, x_1, \dots, x_n совпадают, т.е. имеет место интерполяция с кратными узлами.

Введенные П.Л. Чебышевым многочлены $T_n(x)$ широко используются в вычислительной математике. При $n=0$ и $n=1$ они определяются явными формулами

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad (3.19)$$

а при $n \geq 2$ рекуррентной формулой

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x). \quad (3.20)$$

Запишем явные формулы для многочленов Чебышева $T_n(x)$ при $n=2, 3, 4, 5$:

$$\begin{aligned} T_2(x) &= 2xT_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1, \\ T_3(x) &= 2xT_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x, \\ T_4(x) &= 2xT_3(x) - T_2(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1, \\ T_5(x) &= 2xT_4(x) - T_3(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x. \end{aligned}$$

Аналогично можно записать явные формулы и при $n \geq 6$.

Приведем некоторые свойства многочленов Чебышева.

1. При четном n многочлен $T_n(x)$ содержит только четные степени x и является четной функцией, а при нечетном n многочлен $T_n(x)$ содержит только нечетные степени n и является нечетной функцией.

2. При $n \geq 1$ старший коэффициент многочлена равен $T_n(x)$ 2^{n-1} , т.е.

$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \dots$$

Справедливость свойств 1 и 2 следует непосредственно из определения (3.19), (3.20).

3. Для $x \in [-1, 1]$ справедлива формула

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x). \quad (3.21)$$

При $n = 0$ и $n = 1$ формула (3.21) верна, так как $\cos(0 \cdot \arccos x) = 1$, $\cos(1 \cdot \arccos x) = x$. Для того чтобы доказать справедливость формулы для всех $n \geq 0$, достаточно показать, что функции $C_n(x) = \cos(n \arccos x)$ удовлетворяют такому же, как и многочлены Чебышева, рекуррентному соотношению

$$C_n(x) = 2xC_{n-1}(x) - C_{n-2}(x). \quad (3.22)$$

Соотношение (3.22) получится, если в легко проверяемом тригонометрическом тождестве

$$\cos[(m+1)\varphi] + \cos[(m-1)\varphi] = 2 \cos \varphi \cos m\varphi.$$

Положить $m = n - 1$ и $\varphi = \arccos x$.

4. При $n \geq 0$ многочлен $T_n(x)$ имеет ровно n действительных корней, расположенных на отрезке $[-1, 1]$ и вычисляемых по формуле

$$x_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \quad (3.23)$$

5. При $n \geq 0$ справедливо равенство $\max_{[-1, 1]} |T_n(x)| = 1$. Если $n \geq 1$, то этот максимум достигается ровно в $n + 1$ точках, которые находятся по формуле

$$x_m = \cos \frac{\pi m}{n}, \quad m = 0, 1, \dots, n. \quad (3.24)$$

При этом $T_n(x_m) = (-1)^m$, т.е. максимумы и минимумы многочлена Чебышева чередуются.

Доказательство свойств 4 и 5 основано на применении (3.21). Например, в силу этой формулы корни многочлена $T_n(x)$, расположенные на отрезке $[-1, 1]$, совпадают с корнями уравнения $\cos(n \arccos x) = 0$. Эквивалентное преобразование этого уравнения дает $n \arccos x = \pi/2 + \pi k, k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Так как $0 \leq \arccos x \leq \pi$, то заключаем, что имеется ровно n корней x_k , отвечающих значениям $k = 0, 1, \dots, n-1$ и удовлетворяющих равенствам $\arccos x_k = \frac{(2k+1)\pi}{2n}$, эквивалентным формуле (3.23).

Назовем величину $\max_{[-1, 1]} |P_n(x)|$ **уклоением многочлена $P_n(x)$ от нуля**. Эта величина характеризует максимальное отклонение (уклонение) графика многочлена P_n от графика функции $y = 0$ на отрезке $[-1, 1]$.

6. Среди всех многочленов фиксированной степени $n \geq 1$ со старшим коэффициентом a_n , равным 1, наименьшее отклонение от нуля (равное 2^{n-1}) имеет многочлен

$$\bar{T}_n(x) = 2^{1-n} T_n(x).$$

Благодаря этому свойству, имеющему особую ценность для приложений, многочлены Чебышева иногда называют **наименее уклоняющимися от нуля**. Свойство 6 иначе можно сформулировать так: для любого многочлена вида

$$P_n(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0, \text{ отличного от } T_n(x), \text{ справедливо неравенство}$$

$$2^{1-n} = \max_{[-1,1]} |\bar{T}_n(x)| < \max_{[-1,1]} |P_n(x)|.$$

Замечание. Из свойства 6 следует, что среди всех многочленов $P_n(x)$ фиксированной степени $n \geq 1$ со старшим коэффициентом $a_n \neq 0$ наименьшее уклонение от нуля (равное $|a_n|2^{1-n}$) имеет многочлен $a_n \bar{T}_n(x)$.

Приведем графики многочленов $T_n(x)$ для $n = 1, 2, 3, 4, 5$.

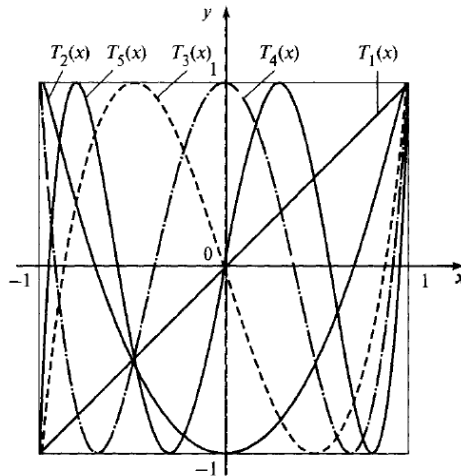


Рис. 3.1. Графики многочленов $T_n(x)$ для $n = 1, 2, 3, 4, 5$

Формулы (3.23) и (3.24) позволяют дать следующую геометрическую интерпретацию построения корней и точек экстремума многочлена $T_n(x)$. Разделим полуокружность $[-1, 1]$ как на диаметр, на $2n$ равных частей и спроецируем полученные точки на отрезок $[-1, 1]$. На рис. 3.2 изображен случай $n = 5$.

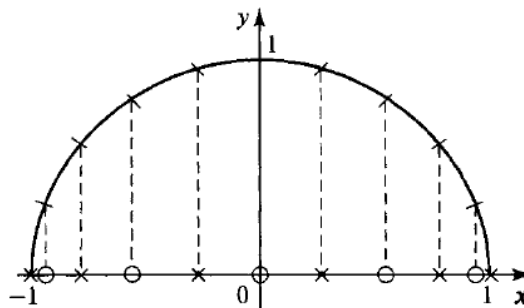


Рис. 3.2. Геометрическая интерпретация построения корней и точек экстремума многочлена $T_n(x)$

Нумеруя проекции справа налево, получим, что все проекции с нечетными номерами являются корнями многочлена $T_n(x)$ (на рис. 3.2 они помечены кружочками), а все проекции с четными номерами – точками экстремума (они помечены крестиками). Заметим, что корни и точки экстремума сгущаются к концам отрезка $[-1, 1]$.

Решение задачи минимизации оценки погрешности. Найдем сначала решение задачи в предложении, что отрезок интерполяции $[a, b]$ совпадает с отрезком $[-1, 1]$. В этом случае величина (11.34) будет минимальной при таком выборе узлов x_0, x_1, \dots, x_n при котором минимальна величина $\max_{[-1,1]} |\omega_{n+1}(x)|$, т.е. минимально уклонение многочлена

$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$ от нуля. В силу свойств 4 и 6 многочленов Чебышева решение задачи дает набор узлов

$$x_k = \cos \left[\frac{2k+1}{2n+2} \pi \right], k = 0, 1, \dots, n,$$

являющихся нулями многочлена T_{n+1} , так как в этом случае $\omega_{n+1} = \bar{T}_{n+1}$.

Заметим, что при таком выборе

$$\bar{\Delta}(P_n) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)! 2^n}, \quad (3.25)$$

причем в силу свойства 6 любой выбор узлов дает большее значение верхней границы погрешности. Для сравнения укажем, что при использовании для приближения функции f отрезка ряда Тейлора $P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k$ верхняя граница оценки погрешности такова:

$$\bar{\Delta}(P_n) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}.$$

Следовательно, она в 2^n раз хуже, чем при интерполяции с оптимальным выбором узлов.

Пусть теперь отрезок интерполяции $[a, b]$ произволен. Приведем его к стандартному отрезку $[-1, 1]$ заменой

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t, \quad (3.26)$$

где $t \in [-1, 1]$. Как нетрудно увидеть, в этом случае $\omega_{n+1}(x) = \left[\frac{b-a}{2} \right]^{n+1} \bar{\omega}_{n+1}(t)$, где $\bar{\omega}_{n+1}(t) = (t - t_0)(t - t_1) \dots (t - t_n)$ и $x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t_k$ для $k = 0, 1, \dots, n$. Следовательно,

$$\bar{\Delta}(P_n) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \left[\frac{b-a}{2} \right]^{n+1} \max_{[-1,1]} |\bar{\omega}_{n+1}(t)|$$

и минимум этой величины достигается при значениях t_0, t_1, \dots, t_n совпадающих с нулями многочлена T_{n+1} . Значит, решение поставленной задачи дает выбор узлов

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos \left[\frac{2k+1}{2n+2} \pi \right], k = 0, 1, \dots, n, \quad (3.27)$$

которому отвечает минимальное значение верхней границы погрешности интерполяции, равное

$$\bar{\Delta}(P_n) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)! 2^n} \left[\frac{b-a}{2} \right]^{n+1}.$$

3.1.4. Интерполяционный многочлен Ньютона с конечными и разделенными разностями

Таблица конечных разностей. Пусть функция $y = f(x)$ задана таблицей своих значений, причем $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ и расстояние $h = x_i - x_{i-1}$ между соседними узлами таблицы значений аргумента постоянно. В этом случае величину h называют *шагом таблицы*, а узлы – *равноотстоящими*.

Величину $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ принято называть *конечной разностью первого порядка* функции $y = f(x)$ в точке x_i (с шагом h). *Конечная разность второго порядка* определяется формулой $\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$. Аналогично определяются конечные разности третьего и более высоких порядков. Общее определение *конечной разности порядка k* таково:

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i.$$

Здесь $k \geq 1$ и $\Delta^0 y_i = y_i$.

Таблицу конечных разностей (которые называют еще конечными разностями вперед) обычно располагают следующим образом:

Таблица 3.1

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$...	$\Delta^n y$
x_0	y_0					
x_1	y_1	Δy_0				
x_2	y_2	Δy_1	$\Delta^2 y_0$			
x_3	y_3	Δy_2	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_0$		
...	
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-2}	$\Delta^2 y_{n-2}$	$\Delta^3 y_{n-3}$		$\Delta^n y_0$
x_n	y_n	Δy_{n-1}				

Свойства конечных разностей. Можно показать, что конечные разности порядка k выражаются через значения функции в $k + 1$ точке по формуле

$$\Delta^k y_i = \sum_{l=0}^k (-1)^{k-l} C_k^l y_{i+l}, \quad (3.28)$$

где $C_k^l = \frac{k!}{l!(k-l)!}$ – биномиальные коэффициенты. В частности,

$$\begin{aligned} \Delta^2 y &= y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i, \\ \Delta^3 y &= y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i, \\ \Delta^4 y &= y_{i+4} - 4y_{i+3} + 6y_{i+2} - 4y_{i+1} + y_i. \end{aligned}$$

Приведем без доказательства важное утверждение, указывающее на тесную связь между производными гладких функций и их конечными разностями.

Теорема 3.3. Пусть функция f дифференцируема k раз на отрезке $[x_i, x_{i+k}]$. Тогда справедливо равенство

$$\Delta^k y_i = h^k f^{(k)}(\xi), \quad (3.29)$$

в котором ξ – некоторая точка из интервала (x_i, x_{i+k}) .

Следствие. Для многочлена $y = P_n(x) = \sum_{m=0}^n a_m x^m$ конечная разность порядка n является постоянной величиной, равной $h^n n! a_n$. Разности порядка $k > n$ тождественно равны нулю.

Конечные разности имеют разнообразные практические применения. Например, если производная k -го порядка $f^{(k)}$ слабо меняется на отрезке $[x_i, x_{i+k}]$, то в силу равенства (3.29) для $x \in [x_i, x_{i+k}]$ справедлива следующая формула численного дифференцирования:

$$f^{(k)}(x) \approx \frac{\Delta^k y_i}{h^k}. \quad (3.30)$$

Таблица разделенных разностей. Пусть функция f задана на таблице x_0, x_1, \dots, x_n значений аргумента с произвольным (не обязательно постоянным) шагом, причем точки таблицы занумерованы в произвольном (не обязательно возрастающем) порядке. Величины

$$f(x_i; x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

принято называть **разделенными разностями первого порядка** функции f . **Разделенные разности второго порядка** определяются формулой

$$f(x_i; x_{i+1}; x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1}; x_{i+2}) - f(x_i; x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}.$$

Аналогично определяются разделенные разности третьего и более высоких порядков. Общее определение **разделенной разности порядка $k \geq 2$** таково:

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}; \dots; x_{i+k}) - f(x_i; \dots; x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i}.$$

Таблицу разделенных разностей обычно располагают следующим образом:

Таблица 3.2

x_0	$f(x_0)$				
		$f(x_0; x_1)$			
x_1	$f(x_1)$		$f(x_0; x_1; x_2)$		
		$f(x_1; x_2)$	$f(x_0; x_1; \dots; x_n)$
x_2	$f(x_2)$		
...	$f(x_{n-2}; x_{n-1}; x_n)$		
...	...	$f(x_{n-1}; x_n)$			
x_n	$f(x_n)$				

Свойства разделенных разностей. Разделенные разности обладают рядом свойств. Перечислим без доказательства некоторые из них.

1. Разделенная разность $f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k})$ является симметричной функцией своих аргументов $x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}$ (т.е. ее значение не меняется при любой их перестановке).

2. Пусть функция f имеет на отрезке $[a, b]$, содержащем точки $x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}$ производную порядка k . Тогда справедливо равенство

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k}) = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}, \quad (3.31)$$

где ξ – некоторая точка, расположенная на интервале (a, b) .

3. В случае, когда таблица значений аргумента имеет постоянный шаг h , разделенная и конечная разности связаны равенством

$$f(x_i; x_{i+1}; \dots; x_{i+k}) = \frac{\Delta^k y_i}{h^k k!}. \quad (3.32)$$

Интерполяционный многочлен Ньютона с разделенными разностями. Используя разделенные разности, интерполяционный многочлен можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= f(x_0) + f(x_0; x_1)(x - x_0) + f(x_0; x_1; x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &+ f(x_0; x_1; \dots; x_n)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) = \\ &= \sum_{k=0}^n f(x_0; x_1; \dots; x_k) \omega_k(x). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Здесь $\omega_0(x) \equiv 1$, $\omega_k(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})$ при $k \geq 1$. Записанный в таком виде интерполяционный многочлен называют **интерполяционным многочленом Ньютона с разделенными разностями**.

В практическом плане формула (3.33) обладает рядом преимуществ перед формулой Лагранжа. Пусть, например, по каким-либо причинам необходимо увеличить степень интерполяционного многочлена на единицу, добавив в таблицу еще один узел x_{n+1} . При использовании формулы Лагранжа это приводит не только к увеличению числа слагаемых, но и к необходимости вычислять каждое из них заново. В то же время для вычисления $P_{n+1}(x)$ по формуле Ньютона (3.33) достаточно добавить к $P_n(x)$ лишь одно очередное слагаемое, так как

$$P_{n+1}(x) - P_n(x) = f(x_0; \dots; x_n; x_{n+1})\omega_{n+1}(x). \quad (3.34)$$

Заметим, что в случае, когда величина $|x_n - x|$ мала, а функция f достаточно гладкая, справедливо приближенное равенство

$$f(x_0; \dots; x_n; x) \approx f(x_0; \dots; x_n; x_{n+1}),$$

из которого с учетом равенств (3.33) и (3.34) следует, что

$$f(x) - P_n(x) \approx P_{n+1}(x) - P_n(x).$$

Таким образом, величину

$$\varepsilon_n = |P_{n+1}(x) - P_n(x)| \quad (3.35)$$

можно использовать для практической оценки погрешности интерполяции.

Интерполяционный многочлен Ньютона с конечными разностями.

Пусть интерполируемая функция задана на таблице с постоянным шагом h (т. е. $x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \dots, n$). В этом случае, используя формулу (3.32) связи между разделенными и конечными разностями и вводя безразмерную переменную $t = (x - x_0)/h$, многочлен Ньютона (3.33) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} P_n(x) = P_n(x_0 + ht) = & y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!}t + \frac{\Delta^2 y_0}{2!}t(t-1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!}t(t-1)(t-2) + \dots \\ & + \frac{\Delta^n y_0}{n!}t(t-1) \dots (t-n+1). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Многочлен (3.36) называется **интерполяционным многочленом Ньютона с конечными разностями для интерполяции вперед**.

Заметим, что в формуле (3.36) используются только конечные разности, расположенные в верхней кривой строке таблицы. Можно использовать конечные разности, расположенные и в нижней кривой строке таблицы, записав многочлен в виде **интерполяционного многочлена Ньютона с конечными разностями для интерполяции назад**:

$$\begin{aligned} P_n(x) = P_n(x_n + hq) = & \\ = y_n + \frac{\Delta y_n}{1!}q + \frac{\Delta^2 y_n}{2!}q(q+1) + \frac{\Delta^3 y_n}{3!}q(q+1)(q+2) + \dots \\ & + \frac{\Delta^n y_n}{n!}q(q+1) \dots (q+n-1), \end{aligned} \quad (3.37)$$

где $q = (x - x_n)/h$.

3.1.5. Глобальная полиномиальная интерполяция. Понятие о кусочно-полиномиальной интерполяции

Пусть функция интерполируется на отрезке $[a, b]$. Метод решения этой задачи с помощью интерполяции единым для всего отрезка многочленом $P_n(x)$ называют **глобальной полиномиальной интерполяцией**.

Всегда ли можно добиться повышения точности интерполяции благодаря увеличению числа узлов (и соответственно степени n интерполяционного многочлена)? Для того чтобы реализовать процесс интерполяции функции f многочленами возрастающей степени n , необходимо указать стратегию выбора при каждом n набора узлов интерполяции $x_0^{(n)}, x_1^{(n)}, \dots, x_n^{(n)}$. Такая стратегия задается указанием интерполяционного массива – треугольной таблицы

$$\begin{array}{c} x_0^{(0)} \\ x_0^{(1)}, x_1^{(1)} \\ x_0^{(2)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)} \\ \dots \\ x_0^{(n)}, x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, \dots, x_n^{(n)}, \end{array}$$

в каждой строке которой все $x_i^{(n)}$ различны и $x_i^{(n)} \in [a, b]$. Будем говорить, что при заданной стратегии выбора узлов **метод интерполяции сходится**, если $\max_{[a,b]} |f(x) - P_n(x)| \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Рассмотрим сначала простейшую стратегию, состоящую в равномерном распределении на отрезке $[a, b]$ узлов интерполяции, т.е. в выборе $x_i^{(n)} = a + ih$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), где $h = (b - a)/n$. Следующий пример показывает, что такая стратегия не может обеспечить сходимость интерполяции даже для очень гладких функций.

Пример (пример Рунге). Используем глобальную полиномиальную интерполяцию с равномерным распределением узлов для приближения на отрезке $[-1, 1]$ следующей функции:

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}.$$

Вычисления показывают, что при больших n интерполяция дает превосходные результаты в центральной части отрезка. В то же время вопреки ожиданиям последовательность $P_n(x)$ расходится при $n \rightarrow \infty$ для $0.73 \lesssim |x| \leq 1$. Соответствующая иллюстрация приведена на рис. 3.3.

Равномерное распределение узлов интерполяции для функции Рунге оказалось неудачным. Однако проблема сходимости для этой функции исчезает, если в качестве узлов интерполяции брать корни многочлена Чебышева $T_{n+1}(x)$. Существует ли единая для всех непрерывных на отрезке $[a, b]$ функций f стратегия выбора узлов интерполяции, гарантирующая ее сходимость? Отрицательный ответ на этот вопрос дает следующая теорема.

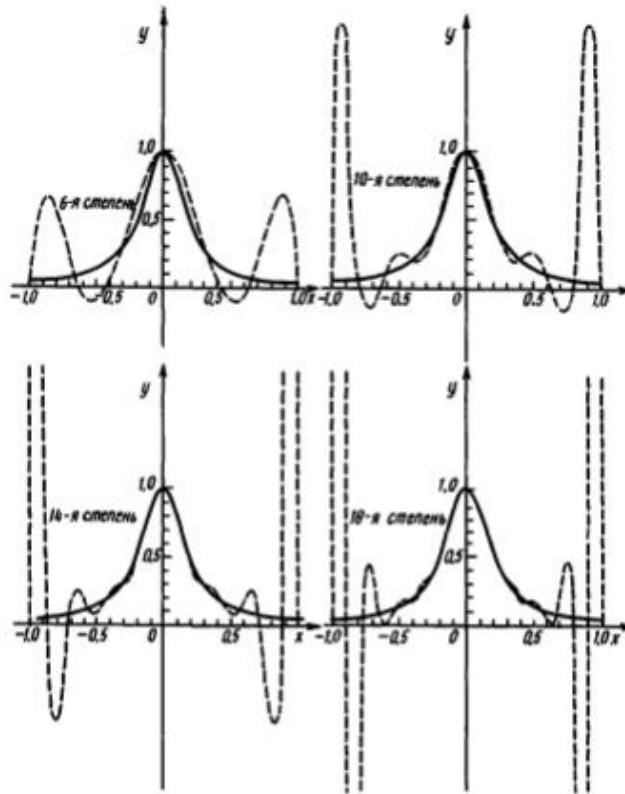


Рис. 3.3. Функция Рунге

Теорема 3.3 (Теорема Фабера). *Какова бы ни была стратегия выбора узлов интерполяции, найдется непрерывная на отрезке $[a, b]$ функция f , для которой $\max_{[a,b]} |f(x) - P_n(x)| \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$.*

Теорема Фабера отрицает существование единой для всех непрерывных функций стратегии выбора узлов интерполяции. Однако для гладких функций (а именно такие функции чаще всего интерполируются) такая стратегия существует, о чем говорит следующая теорема.

Теорема 3.4. *Пусть в качестве узлов интерполяции на отрезке $[a, b]$ выбираются чебышевские узлы. Тогда для любой непрерывно дифференцируемой на отрезке $[a, b]$ функции f метод интерполяции сходится.*

Замечание. Практическая реализация стратегии выбора чебышевских узлов интерполяции возможна и оправдана в довольно редких случаях и просто невозможна тогда, когда приходится иметь дело с заданной таблицей значений функции.

Итак, глобальная полиномиальная интерполяция многочленом высокой степени может привести к неудаче или оказаться неэффективной. Альтернативный подход состоит в **локальной интерполяции**, когда функция f аппроксимируется интерполяционным многочленом $P_n(x)$ невысокой степени m на содержащемся в $[a, b]$ отрезке $[\alpha, \beta]$ малой длины. Естественно, что при этом используется лишь часть табличных значений. Рассмотрим два подхода к приближению функции, основанные на локальной интерполяции.

Интерполяция с помощью движущегося полинома.

Строят набор полиномов $P_{(0,1,\dots,m)}, P_{(1,2,\dots,m+1)}, \dots, P_{(n-m,n-m+1,\dots,n)}$ фиксированной степени m , каждый из которых совпадает с табличными значениями в $m+1$ последовательных

точках. Каждый такой полином используют для приближения функции в тех точках x из отрезка $[a, b]$, для которых выбранные узлы таблицы являются ближайшими.

Кусочно-полиномиальная интерполяция. Исходный отрезок $[a, b]$ разбивают на несколько отрезков меньшей длины, на каждом из которых функция интерполируется своим многочленом.

Обусловленность задачи вычисления многочлена с приближенно заданными коэффициентами.

Пусть многочлен вычисляется на отрезке $[a, b]$, причем предварительно он представлен в виде

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x),$$

где $\varphi_k(x)$ – базисные функции.

При вычислении коэффициентов a_k неизбежны погрешности, приводящие к приближенным значениям a_k^* . Поэтому в действительности будет вычисляться многочлен

$$P_n^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x).$$

Примем за относительную погрешность вектора $a^* = (a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*)^T$ величину

$$\delta(a^*) = \max_{0 \leq i \leq n} |a_i - a_i^*| / \max_{0 \leq i \leq n} |a_i|.$$

А за относительную погрешность многочлена $P_n^*(x)$ – величину

$$\delta(P_n^*) = \max_{[a,b]} |P_n(x) - P_n^*(x)| / \max_{[a,b]} |P_n(x)|.$$

Число обусловленности задачи вычисления многочлена с приближенно заданными коэффициентами назовем величину $cond_n$, равную минимальной из постоянных K_n , для которых выполняется неравенство

$$\delta(P_n^*) \leq K_n \delta(a^*).$$

Величина $cond_n$ характеризует чувствительность вычисляемых значений многочлена к погрешностям в коэффициентах a_k и существенно зависит от выбора базисных функций $\varphi_k(x)$. Неудачный выбор базисных функций может сделать эту задачу плохо обусловленной. Доказано, например, что даже для степенного базиса число обусловленности оценивается снизу величиной $T_n(3)$.

Отметим, что для чебышевского базиса $cond_n \leq \sqrt{2}(n+1)$. Для лагранжева базиса число обусловленности $\approx \frac{2}{\pi} \ln(n+1) + 1$.

3.1.6. Интерполяция сплайнами

Повышение точности приближения гладкой функции благодаря увеличению степени интерполяционного многочлена возможно, но связано с существенным повышением сложности вычислений. К тому же использование многочленов высокой степени требует специальных мер предосторожности уже при выборе форм их записи, и вычисления сопровождаются накоплением погрешности округления. Поэтому на практике предпочитают кусочно-полиномиальную интерполяцию с использованием многочленов невысокой степени. Однако этот способ приближения имеет недостаток: в точках «стыка» двух соседних многочленов производная, как правило, имеет разрыв. Часто это обстоятельство не играет

существенной роли. Вместе с тем нередко требуется, чтобы аппроксимирующая функция была гладкой и тогда простейшая кусочно-полиномиальная интерполяция становится неприемлемой.

Естественная потребность в наличии аппроксимирующих функций, которые сочетали бы в себе локальную простоту многочлена невысокой степени и глобальную на всем отрезке $[a, b]$ гладкость, привела к появлению в 1946 г. так называемых сплайн-функций или сплайнов – специальным образом построенных гладких кусочно-многочленных функций. Получив в 60-х годах XX в. распространение как средство интерполяции сложных кривых, сплайны стали важной составной частью самых различных вычислительных методов и нашли широчайшее применение в решении разнообразных научно-технических и инженерных задач.

Пусть отрезок $[a, b]$ разбит точками $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ на n и частичных отрезков $[x_i - x_{i-1}]$. **Сплайном степени m** называется функция $S_m(x)$, обладающая следующими свойствами:

- 1) функция $S_m(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ вместе со своими производными $S_m^{(1)}(x), S_m^{(2)}(x), \dots, S_m^{(p)}(x)$ до некоторого порядка p ;
- 2) на каждом частичном отрезке $[x_i - x_{i-1}]$ функция $S_m(x)$ совпадает с некоторым алгебраическим многочленом $P_{m,i}(x)$ степени m .

Разность $m - p$ между степенью сплайна и наивысшим порядком непрерывной на отрезке $[a, b]$ производной называется **дефектом сплайна**.

Наиболее широкое распространение на практике получили сплайны $S_3(x)$ третьей степени (**кубические сплайны**) с дефектом, равным 1 или 2.

Такие сплайны на каждом из частичных отрезков $[x_i - x_{i-1}]$ совпадают с кубическим многочленом:

$$S_3(x) = P_{3,i}(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3 \quad (3.38)$$

и имеют на отрезке $[a, b]$ по крайней мере одну непрерывную производную $S'_3(x)$.

Термин «сплайн» происходит от английского слова «spline» (гибкая линейка, стержень) – название приспособления, которое использовалось чертежниками для проведения гладких кривых через заданные точки. Если гибкую стальную линейку поставить на ребро и, изогнув, зафиксировать ее положение в узловых точках, то получится механический аналог кубического сплайна.

Пусть функция $y = f(x)$ задана таблицей своих значений $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$. Сплайн $S_m(x)$ называется **интерполяционным**, если $S_m(x_i) = y_i$ для всех $i = 0, 1, \dots, n$. Значение $s_i = S'_m(x_i)$ называется **наклоном сплайна** в точке x_i .

Локальный сплайн. Если в точках x_i известны значения производной $y'_i = f'(x_i)$, то естественно положить $s_i = y'_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Тогда на каждом частичном отрезке $[x_i - x_{i-1}]$ в соответствии с формулой (3.38) сплайн однозначно определяется значениями $y_{i-1}, y_i, y'_{i-1}, y'_i$ (поэтому и называют **локальным сплайном**).

Оценка погрешности интерполяции локальным кубическим сплайном:

$$\max_{[a,b]} |f(x) - S_3(x)| \leq \frac{M_4}{384} h_{\max}^4, \quad (3.39)$$

где $h_{\max} = \max_{1 \leq i \leq n} h_i$ – максимальная из длин частичных отрезков.

Заметим, что для построения указанным образом сплайна можно гарантировать непрерывность на отрезке $[a, b]$ только функции $S_3(x)$ и ее первой производной $S'_3(x)$, т.е. его дефект равен 2.

Глобальные способы построения кубических сплайнов. Для того, чтобы сплайн $S_3(x)$ имел непрерывную на отрезке $[a, b]$ вторую производную $S''_3(x)$, необходимо выбирать наклоны s_i так, что в точках s_i «стыка» многочленов $P_{3,i}(x)$ и $P_{3,i+1}(x)$ совпадали значения их вторых производных:

$$P''_{3,i}(x_i) = P''_{3,i+1}(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (3.40)$$

Пользуясь формулой (3.38), найдем значения

$$P''_{3,i}(x_i) = 2c_i + 6d_i h,$$

$$P''_{3,i+1}(x_i) = 2c_{i+1}.$$

Таким образом, получаем следующую систему уравнений с учетом

$$P'_{3,i}(x_i) = P'_{3,i+1}(x_i), \quad P''_{3,i}(x_i) = P''_{3,i+1}(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1:$$

$$\begin{cases} y_{i-1} = P_{3,i}(x_{i-1}) = a_i, \\ y_i = P_{3,i}(x_i) = a_i + b_i h + c_i h^2 + d_i h^3, \\ b_i + 2c_i h + 3d_i h^2 = b_{i+1}, \\ c_i + 3d_i h = c_{i+1}. \end{cases} \quad (3.41)$$

Заметим, что эта система уравнений недоопределена, так как число уравнений системы $4n - 2$ меньше числа неизвестных $4n$. Выбор двух оставшихся уравнений обычно связывают с некоторыми дополнительными условиями, накладываемыми на сплайн в граничных точках a и b (*граничными условиями*). Укажем некоторые из наиболее известных граничных условий.

1. Если в граничных точках известны значения первой производной

$$s_0 = f'(a), \quad s_n = f'(b). \quad (3.42)$$

Дополняя систему (3.41) уравнениями (3.42), приходим к системе уравнений с трехдиагональной матрицей, которая легко решается методом прогонки. Полученный таким образом сплайн называется **фундаментальным кубическим сплайном**.

2. Если в граничных точках известны значения второй производной $f''(a)$ и $f''(b)$, то можно наложить на сплайн граничные условия

$$S''_3(a) = P''_{3,1}(x_0) = f''(a), \quad S''_3(b) = P''_{3,n}(x_n) = f''(b),$$

что приводит к следующим уравнениям:

$$2c_1 + 6d_1 h = f''(a), \quad (3.43)$$

$$2c_n + 6d_n h = f''(b). \quad (3.44)$$

3. Полагая в уравнениях (3.43), (3.44) $f''(a) = 0$, $f''(b) = 0$ (независимо от того, выполнены ли эти условия для интерполируемой функции), приходим к системе уравнений, определяющих так называемый **естественный кубический сплайн**.

4. Часто нет никакой дополнительной информации о значениях производной на концах отрезка. Один из применяемых в этой ситуации подходов состоит в использовании условия «отсутствия узла». Выбор наклонов s_i производят таким образом, чтобы для получаемого сплайна выполнялись условия

$$P_{3,1}(x) \equiv P_{3,2}(x), \quad P_{3,n-1}(x) \equiv P_{3,n}(x).$$

Для этого достаточно потребовать совпадения в точках x_1 и x_{n-1} соответствующих третьих производных:

$$P^{(3)}_{3,1}(x_1) \equiv P^{(3)}_{3,2}(x_1), \quad P^{(3)}_{3,n-1}(x_{n-1}) \equiv P^{(3)}_{3,n}(x_{n-1}).$$

5. Если f – периодическая функция с периодом, равным $b - a$, то систему (3.41) следует дополнить условием $s_0 = s_n$.

Существуют и другие подходы к заданию граничных условий.

3.2. Задание

1. Произвести табуляцию функции $f(x)$ на $[a, b]$. Шаг табуляции функции выбрать из соображений достижения заданной точности для интерполяционного многочлена Лагранжа не выше третьего порядка. На любом участке отрезка построить интерполяционный многочлен, вычисляющий функцию для $\forall x \in [a, b]$ с четырьмя верными значащими цифрами.

2. Используя интерполяционную сетку полинома Лагранжа, построить интерполяционный многочлен Ньютона.

3. Для табличной функции, полученной в пункте 2, построить параболический и кубический интерполяционные сплайны (при построении параболического и кубического сплайнов в качестве дополнительных условий использовать $f''(a) = 0$ и $f''(b) = 0$). Сравнить величины абсолютных погрешностей при интерполировании функции $f(x)$ сплайнами и полиномом между собой. Построить графики ошибок интерполирования функций.

1. $f(x) = 4x^2\sqrt{(3\pi - 2x)}$, $[0; 4.5]$.

2. $f(x) = 5x(5\pi + 2x)^{-\frac{1}{4}}$, $[0; 6]$.

3. $f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{\frac{1}{2}}$, $[0; 3.5]$.

4. $f(x) = \pi x(x/2 + 10)^{-1}$, $[0; 3]$.

5. $f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{-3}$, $[2; 3.5]$.

6. $f(x) = \pi x^2 e^{5x + \frac{1}{x}}$, $[2; 3.5]$.

7. $f(x) = \frac{x}{10\pi \sin x}$, $[1, 3]$.

8. $f(x) = \pi(\pi x + 10)^{-2} + x^2$, $[0; 3]$.

9. $f(x) = \frac{\pi x - 3}{(x-1)^2}$, $[2; 5]$.

10. $f(x) = \pi \frac{\sin 3x}{x} + x^2$ $[2; 3.5]$.

11. $f(x) = 4x^2\sqrt{(3\pi - 2x)}$, $[0; 4.5]$.

12. $f(x) = 5x(5\pi + 2x)^{-\frac{1}{4}}$, $[0; 6]$.

13. $f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{\frac{1}{2}}$, $[0; 3.5]$.

14. $f(x) = \pi x(x/2 + 10)^{-1}$, $[0; 3]$.

15. $f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{-3}$, $[2; 3.5]$.

16. $f(x) = \pi x^2 e^{5x + \frac{1}{x}}$, $[2; 3.5]$.

17. $f(x) = \frac{x}{10\pi \sin x}$, $[1, 3]$.

$$18. f(x) = \pi(\pi x + 10)^{-2} + x^2, \quad [0; 3].$$

$$19. f(x) = \frac{\pi x - 3}{(x-1)^2}, \quad [2; 5].$$

$$20. f(x) = \pi \frac{\sin 3x}{x} + x^2 \quad [2; 3.5].$$

$$21. f(x) = 4x^2 \sqrt{(3\pi - 2x)}, \quad [0; 4.5].$$

$$22. f(x) = 5x(5\pi + 2x)^{-\frac{1}{4}}, \quad [0; 6].$$

$$23. f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{\frac{1}{2}}, \quad [0; 3.5].$$

$$24. f(x) = \pi x(x/2 + 10)^{-1}, \quad [0; 3].$$

$$25. f(x) = 8\pi(\pi x + 12)^{-3}, \quad [2; 3.5].$$

4. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4. Численные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений

4.1. Теоретические сведения

4.1.1. Постановка задачи

Для простоты изложения основных идей вычислительных методов решения задач с начальными условиями будем рассматривать, как правило, случай одного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка. Обычно эти идеи легко переносятся на системы уравнений первого порядка и сравнительно просто обобщаются на случай уравнений высших порядков.

Пусть на отрезке $x_0 \leq x \leq X$ требуется найти решение $y(x)$ дифференциального уравнения

$$y' = f(x, y), \quad (4.1)$$

удовлетворяющее при $x = x_0$ начальному условию

$$y(x_0) = y_0. \quad (4.2)$$

Условия существования и единственности решения поставленной задачи Коши будем считать выполненными. Будем предполагать также, что функция $f(x, y)$ в некоторой области изменения ее аргументов обладает необходимой по ходу изложения дополнительной гладкостью. Основной нашей целью на данном этапе будет построение вычислительных правил нахождения приближенного решения рассматриваемой задачи.

В вычислительной практике иногда используют аналитический метод, основанный на идее разложения в ряд решения рассматриваемой задачи Коши. Особенно часто для этих целей используют ряд Тейлора. В этом случае вычислительные правила строятся особенно просто. Приближенное решение $y_m(x)$ исходной задачи ищут в виде

$$y_m(x) = \sum_{i=0}^m \frac{(x - x_0)^i}{i!} y^{(i)}(x_0), \quad x_0 \leq x \leq X, \quad (4.3)$$

где $y^{(0)}(x_0) = y(x_0) = y_0$, $y^{(1)}(x_0) = y'(x_0) = f(x_0, y_0)$,

а значения $y^{(i)}(x_0)$, находят по формулам, полученным последовательным дифференцированием уравнения (4.1):

$$\begin{aligned} y^{(2)}(x_0) &= y''(x_0) = f_x(x_0, y_0) + f(x_0, y_0)f_y(x_0, y_0), \\ y^{(3)}(x_0) &= y'''(x_0) = f_{xx}(x_0, y_0) + 2f(x_0, y_0)f_{xy}(x_0, y_0) + f^2(x_0, y_0)f_{yy}(x_0, y_0) + \\ &+ f_y(x_0, y_0)[f_x(x_0, y_0) + f(x_0, y_0)f_y(x_0, y_0)], \end{aligned} \quad (4.4)$$

... ..

$$F_m(f, f_x, f_y, f_{x^2}, f_{xy}, f_{y^2}, \dots, f_{x^{m-1}}, \dots, f_{y^{m-1}})_{x=x_0, y=y_0}$$

(конкретный вид многочлена F_m не приведен из-за громоздкой записи). Для значений x , близких к x_0 , **метод рядов** (4.3) при достаточно большом m дает обычно хорошее приближение к точному решению $y(x)$ задачи (4.1), (4.2).

Однако с увеличением расстояния $|x - x_0|$ погрешность приближенного равенства $y(x) \approx y_m(x)$, вообще говоря, возрастает по абсолютной величине и правило (4.3) становится вовсе неприемлемым, когда x выходит из области сходимости соответствующего (4.3) ряда Тейлора.

Предпочтительными в таких случаях будут, например, численные методы решения задачи Коши, позволяющие в некоторых попарно близких друг другу фиксированных точках (узлах)

$$x_0 < x_1 < \dots < x_N = X \quad (4.5)$$

последовательно находить значения $y_n \approx y(x_n)$, $n = 1, 2, \dots, N$, приближенного решения.

Сходимость методов подобного типа не так жестко связана с длиной отрезка $[x_0, X]$, и их чаще кладут в основу стандартных программ для ЭВМ. Таким методам ниже будет уделено основное внимание.

Большинство численных методов решения рассматриваемой задачи Коши можно привести к виду

$$y_{n+1} = F(y_{n-q}, y_{n-q+1}, \dots, y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+s}), \quad (4.6)$$

где F – некоторая известная функция указанных аргументов, определяемая способом построения метода и зависящая от вида уравнения (4.1) и избранной сетки (4.5). При $q = 0$, $0 \leq s \leq 1$ такие вычислительные правила обычно называют **одношаговыми**, а при $q = 1$ или $s > 1$ – **многошаговыми**. Как одношаговые, так и многошаговые методы вида (4.6) называют **явными** в случае $s = 0$ и **неявными** при $s = 1$.

В случае $s > 1$ многошаговые правила часто называют методами **с забеганием вперед**.

4.1.2. Построение одношаговых методов

Будем считать, что процесс решения задачи (4.1), (4.2) доведен до точки x_n ($0 \leq n < N$), и известно (точно или приближенно) соответствующее значение $y(x_n)$ искомого решения. Построим вычислительное правило для нахождения значения решения в очередной узловой точке $x_{n+1} = x_n + h_n$ сетки (4.5). Поскольку при построении одношаговых методов используется информация о решаемой задаче лишь в пределах одного шага интегрирования, то можно без ущерба для понимания не писать индекс, означающий номер шага процесса.

Чтобы по известному значению $y(x)$ соответствующего решения дифференциального уравнения (4.1) в узловой точке $x \geq x_0$ найти значение этого решения в очередной точке $x + h$ сетки (4.5), можно, очевидно, воспользоваться вычислительным правилом типа (4.3), положив там x_0 и взяв вместо текущей точки x отрезка $[x_0, X]$ узловую точку $x + h$. Это позволит записать приближенное равенство

$$y_m(x) \approx \sum_{i=0}^m \frac{h^i}{i!} y^{(i)}(x), \quad (4.7)$$

которое может быть положено в основу соответствующего одношагового метода, если для вычисления значений $y^{(i)}(x)$, $i = 2, 3, \dots, m$, использовать формулы типа (4.4). При условии, что данное решение уравнения (4.1) имеет на рассматриваемом отрезке непрерывную производную порядка $m + 1$, погрешность приближенного равенства (4.7) будет, очевидно, величиной порядка h^{m+1} и при малых $h > 0$ и больших m построенный пошаговый вариант метода рядов будет давать, как правило, достаточно хорошее приближение к искомому значению решения. Привлекательной чертой полученного вычислительного метода является то обстоятельство, что искомое значение приближенного решения разложено по последовательным главным частям. Это позволяет в процессе решения задачи без

дополнительных вычислительных затрат по величине последних слагаемых суммы (4.7) составить представление о локальной погрешности приближенного решения (погрешности нахождения значения $y(x+h)$ в предположении, что значение $y(x)$ известно точно). Однако такой одношаговый метод интегрирования дифференциальных уравнений при $m > 1$ все же редко используется в практике вычислений, так как его применение требует на каждом шаге нахождения значений $\frac{m(m+1)}{2}$ различных функций $f, f_x, f_y, f_{x^2}, f_{xy}, f_{y^2}, \dots, f_{x^{m-1}}, \dots, f_{y^{m-1}}$. При использовании ЭВМ это сопряжено с написанием большого числа блоков вычисления значений указанных функций, что осложняет связь пользователя с машиной и увеличивает, как правило, время решения задачи. Поэтому данный метод редко кладут в основу стандартных программ решения задач Коши, хотя в специальных частных случаях (например, когда приходится многократно решать задачи, отличающиеся лишь начальными данными или мало отличающиеся правыми частями уравнений) использование метода может быть оправданным.

Естественно поставить задачу о таком усовершенствовании приведенного выше одношагового метода, которое сохраняло бы основные его достоинства, но не было связано с нахождением значений производных правой части уравнения (4.1). Чтобы выполнить последнее условие, производные, $y^{(i)}(x), i = 2, 3, \dots, m$, входящие в правую часть равенства (4.1), можно заменить по формулам численного дифференцирования их приближенными выражениями через значения функции y' и учесть, что $y'(x) = f[x, y(x)]$. Требование одношаговости конструируемых правил накладывает при этом свои условия на такую замену. Ниже на конкретных примерах будет рассмотрен один из возможных подходов к решению поставленной задачи.

В случае $m = 1$ приближенное равенство (4.7) не требует вычисления производных правой части уравнения (4.1) и позволяет с погрешностью порядка h^2 находить значение $y(x_n + h)$ решения этого уравнения по известному его значению $y(x_n)$. Соответствующее одношаговое правило можно записать в виде

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n). \quad (4.8)$$

Правило (4.8) впервые было построено Эйлером и носит его имя. Иногда его называют также **правилом ломаных** или методом **касательных**, чем подчеркивают простой геометрический смысл формулы. Геометрическая интерпретация одного шага метода Эйлера заключается в аппроксимации решения на отрезке $[x_n, x_{n+1}]$ касательной

$$y = y(x_n) + y'(x_n)(x - x_n),$$

проведенной в точке (x_n, y_n) , к интегральной кривой, проходящей через эту точку. Таким образом, после выполнения N шагов интегральная кривая заменяется ломаной линией (ломаной Эйлера).

Погрешность r_{n+1} этой формулы можно, очевидно, записать в виде

$$r_{n+1} = \frac{h^2}{2} y''(x_n + \theta h), \quad 0 < \theta < 1.$$

При $m = 2$ приближенное равенство (4.7) требует вычисления производной $y''(x_n)$ и дает возможность находить значение $y(x_n + h)$ с локальной ошибкой порядка h^3 . Чтобы не понизить порядок погрешности приближенного равенства

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2} y''(x_n), \quad (4.9)$$

значение производной $y''(x_n)$ необходимо найти по крайней мере не хуже, чем с ошибкой порядка h , для чего, очевидно, достаточно иметь два значения функции

$$y'(x) = f[x, y(x)] \text{ из отрезка } x_n \leq x \leq x_n + h \quad (0 < h < 1).$$

В точке x_n значением f_n этой функции мы уже располагаем, так как по предположению, на предыдущем шаге процесса было найдено y_n . Найдем теперь еще значение функции y' в точке $x_n + h^i$ ($i \geq 1$). Для этого с учетом уравнения (4.1) достаточно указать правило вычисления $y(x_n + h^i)$.

Очевидно, $y(x_n + h^i) = y(x_n) + h^i y'(x_n) + O(h^{2i})$. Поэтому справедлива следующая расчетная формула

$$y(x_n + h^i) = y(x_n) + h^i f(x_n, y_n). \quad (4.10)$$

Так как

$$y''(x_n) = \frac{y'(x_n + h^i) - y'(x_n)}{h^i} + O(h^i),$$

$$y'(x_n + h^i) = f[x_n + h^i, y(x_n + h^i)],$$

то на основании (4.9) можно записать

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h^{2-i}}{2} (f[x_n + h^i, y(x_n + h^i)] - f(x_n, y_n)). \quad (4.11)$$

Формулы (4.10), (4.11) можно рассматривать как семейство (зависящих от параметра $i \geq 1$) одношаговых методов решения задачи Коши (4.1), (4.2) с локальной погрешностью порядка h^3 .

При $i = 1$ эти формулы принимают вид

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + O(h^2). \quad (4.12)$$

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{h}{2} (f[x_n + h, y(x_n + h)] - f(x_n, y_n)) + O(h^3). \quad (4.13)$$

Они имеют предсказывающе-исправляющий характер: формула (4.12) служит для получения грубого приближения искомой величины $y(x_n + h)$, а по формуле (4.13) производится уточнение полученного значения. Сравнение $y(x_n + h)$ формул (4.12) и (4.13), дает возможность судить о локальной погрешности результата.

Заметим, что иногда на основе формулы (4.13) бывает полезным сделать одну итерацию. Это может (при сохранении порядка погрешности) несколько повысить точность приближения величины $y(x_n + h)$. К существенному увеличению объема вычислений эта итерация не приведет, так как значение f_{n+1} , которое при этом необходимо будет вычислить, можно использовать в качестве f_n на следующем этапе вычислений.

В случае $i = 2$ формулы (4.10), (4.11) имеют вид

$$y(x_n + h^2) = y(x_n) + h^2 f(x_n, y_n) + O(h^4). \quad (4.14)$$

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y_n) + \frac{1}{2} (f[x_n + h^2, y(x_n + h^2)] - f(x_n, y_n)) + O(h^4). \quad (4.15)$$

Увеличение значения i на единицу позволило, вообще говоря, несколько улучшить структуру остаточного члена вычислительного правила. Если в случае правила (4.12), (4.13) погрешность складывалась из одного слагаемого вида $\frac{h^3}{6} y'''(x_n + \theta h)$, $0 < \theta < 1$, представляющего собой ошибку приближенного равенства (4.9), и еще двух слагаемых также порядка h^3 , порождаемых соответственно неточностью замены производной

y'' и ошибкой формулы Эйлера (4.10). То в случае (4.14), (4.15) два последних слагаемых остаточного члена будут уже, очевидно, величинами порядка h^4 . При $i = 3$ соответствующие слагаемые остатка станут величинами порядка h^5 и т. д. Однако, увеличение значения i , улучшая структурные свойства остаточного члена вычислительного правила, предъявляет повышенные требования к выполнению вычислений, так как в этом случае в силу ограниченности разрядной сетки ЭВМ возможна потеря точности результата за счет операций вычитания близких величин и деления на малые по абсолютному значению числа.

Описанным способом можно строить вычислительные методы более высокого порядка точности. Следует, однако, заметить что при больших значениях m построение таких методов связано с приближенной заменой производных высоких порядков по интерполяционным формулам численного дифференцирования. Эта процедура, как известно сопряжена обычно с повышенными требованиями к точности выполнения вычислений.

Рассмотрим другие способы получения одношаговых методов, которые непосредственно не связаны с подобной аппроксимацией производных.

4.1.3 Метод Рунге-Кутты

Изложим основную идею этого способа на примере задачи (4.1), (4.2). Интегрируя уравнение (4.1) в пределах от x до $x + h$ ($0 < h < 1$), получим равенство

$$y(x + h) = y(x) + \int_x^{x+h} f[t, y(t)] dt, \quad (4.16)$$

которое посредством последнего интеграла связывает значения решения рассматриваемого уравнения в двух точках, удаленных друг от друга на расстояние шага h . Указав эффективный метод приближенного вычисления интеграла в (4.16), мы получим тем самым одно из правил численного интегрирования уравнения (4.1).

Чтобы построить методы более высокого порядка точности, не связанные с вычислением производных функции $f[x; y(x)]$, нужно привлечь дополнительную информацию по значениям интегрируемой функции. Поскольку эта функция, как функция одного аргумента x , в случае задачи Коши (4.1), (4.2), в отличие от ее частного случая – рассмотренной уже нами ранее задачи вычисления неопределенного интеграла, – вообще говоря, неизвестна внутри отрезка интегрирования $[x; x + h]$, то использовать непосредственно квадратурные формулы с числом узлов $N > 2$ не удастся. Поэтому в способе Рунге-Кутты применяют следующий специальный метод приближенного вычисления интеграла в (4.16).

Для удобства записи используем обозначение $\Delta y = y(x + h) - y(x)$ и равенству (4.16) придадим новый вид, произведя замену переменной интегрирования $t = x + \alpha h$

$$\Delta y = h \int_0^1 f[x + \alpha h, y(x + \alpha h)] d\alpha, \quad (4.17)$$

Чтобы на основе (4.17) построить одношаговый метод численного интегрирования уравнения (4.1), введем три набора параметров:

$$\begin{aligned} &\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q; \\ &\beta_{10}, \end{aligned} \quad (\alpha)$$

$$\beta_{20}, \beta_{21},$$

$$\dots \dots \dots \quad (\beta)$$

$$\beta_{q0}, \beta_{q1}, \dots, \beta_{q,q-1};$$

$$A_0, A_1, \dots, A_q, \quad (A)$$

выбором которых распорядимся в дальнейшем. При помощи двух первых наборов составим величины

$$\varphi_0 = hf(x, y),$$

$$\varphi_1 = hf(x + \alpha_1 h, y + \beta_{10} \varphi_0),$$

$$\varphi_2 = hf(x + \alpha_2 h, y + \beta_{20} \varphi_0 + \beta_{21} \varphi_1),$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\varphi_q = hf(x + \alpha_q h, y + \beta_{q0} \varphi_0 + \beta_{q1} \varphi_1 + \dots + \beta_{q,q-1} \varphi_{q-1}),$$

которые при заданных (α) и (β) могут быть вычислены последовательно. Хотя

$$\varphi_i = hf(x + \alpha_i h, y + \beta_{i0} \varphi_0 + \dots + \beta_{i,i-1} \varphi_{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, q,$$

вообще говоря, не равны значениям $hf[x + \alpha_i h, y(x + \alpha_i h)]$, однако при соответствующем выборе параметров (β) их можно трактовать как приближенные значения интегрируемой функции $f[x + ah, y(x + ah)]$, умноженные на h . Это дает основание надеяться при помощи параметров (A) составить такую линейную комбинацию величин $\varphi_i, i = 1, 2, \dots, q$, которая будет являться аналогом квадратурной суммы и позволит вычислить приближенное значение приращения Δy :

$$\Delta y \approx \sum_{i=0}^q A_i \varphi_i. \quad (4.18)$$

Тем самым параметрам $(\alpha), (\beta)$ и (A) можно придать некоторый квадратурный смысл.

Рассмотрим теперь задачу выбора этих параметров. Введем величину

$$r_q(h) = \Delta y - \sum_{i=0}^q A_i \varphi_i. \quad (4.19)$$

представляющую собой погрешность приближенного равенства (4.18). В предположении, что правая часть уравнения (4.1) является достаточно гладкой функцией, запишем следующее разложение этой величины:

$$r_q(h) = \sum_{j=0}^k \frac{h^j}{j!} r_q^{(j)}(0) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} r_q^{(k+1)}(\theta h), \quad 0 < \theta < 1.$$

На основании этого разложения можно утверждать, что если параметры $(\alpha), (\beta)$ и (A) подобрать так, чтобы выполнялись условия

$$r_q^{(j)}(0) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k, \quad (4.20)$$

то погрешность (4.19) приближенного равенства (4.18) будет величиной порядка не ниже h^{k+1} :

$$r_q(h) = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} r_q^{(k+1)}(\theta h). \quad (4.21)$$

Число k при этом обычно называют **порядком точности** соответствующего метода. Такому определению порядка точности метода можно дать следующее объяснение. В случае рассматриваемой задачи Коши (4.1), (4.2), как и в случае изученной ранее задачи неопределенного интегрирования, оказывается, что, если погрешность типа (4.19) расчетной формулы данного метода является величиной порядка h^{k+1} в достаточно широкой окрестности

решения, то погрешность метода (та часть погрешности приближенного решения, которая определяется лишь неточностью самой формулы) для случая конечного отрезка интегрирования будет величиной порядка h^k . Доказательство этого факта будет приведено несколько позже, а сейчас продолжим рассмотрение вопроса о построении вычислительных правил по способу Рунге-Кутты.

Для выполнения условий (4.20) при возможно большем значении k величины $r_q^{(j)}(0)$, $j = 0, 1, \dots, k$ выражают через значения функции $f(x, y)$ и ее частных производных и требуют обращения в нуль возможно большего числа этих величин для любой достаточно гладкой функции f . Иными словами, выбор параметров (α) , (β) и (A) осуществляют на основании требования, чтобы разложение

$$\Delta y = y(x+h) - y(x) = \frac{h}{1!} y'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) + \frac{h^3}{3!} y'''(x) + \dots \quad (4.22)$$

и разложение по степеням h линейной комбинации $\sum_{i=0}^q A_i \varphi_i$ совпадали до членов с возможно более высокими степенями h в случае любой правой части уравнения (4.1).

При произвольном q систему уравнений для определения параметров (α) , (β) и (A) записать очень трудно. Поэтому мы ограничимся здесь рассмотрением лишь нескольких конкретных примеров построения одношаговых правил указанным способом.

Метод первого порядка точности. Зададимся минимальным значением $q = 0$, что равнозначно введению лишь одного параметра A_0 . Приближенное равенство (4.18) в этом случае принимает вид

$$\Delta y \approx A_0 \varphi_0 = h A_0 f(x, y).$$

И погрешность (4.19) может быть записана следующим образом:

$$r_0(h) = y(x+h) - y(x) - h A_0 f(x, y).$$

Тогда

$$\begin{aligned} r_0'(h) &= y'(x+h) - A_0 f(x, y), \\ r_0''(h) &= y''(x+h). \end{aligned}$$

Так как $r_0''(h)$ не зависит от A_0 , то уже при $j = 2$ условие (4.20) в случае произвольной функции f удовлетворено быть не может. Поэтому $k = 1$ и система (4.20) принимает вид $(1 - A_0)f(x, y) = 0$.

Отсюда находим, что $A_0 = 1$. Следовательно,

$$\Delta y \approx h f(x, y)$$

$$\text{и } r_0(h) = \frac{h^2}{2} r_0''(\theta h) = \frac{h^2}{2} y_0''(x + \theta h), \quad 0 < \theta < 1.$$

В простейшем случае $q = 0$, таким образом, способ Рунге-Кутты приводит известному методу Эйлера (4.8). Квадратурный смысл этого вычислительного правила был уже выяснен.

Методы второго порядка точности. При $q = 1$ имеем

$$\Delta y \approx A_0 \varphi_0 + A_1 \varphi_1 = h A_0 f(x, y) + h A_1 f(x + \alpha_1 h, y + \beta_{10} f(x, y)).$$

С целью выбора введенных параметров α_1 , β_{10} , A_0 , A_1 , разложим Δy и $A_0 \varphi_0 + A_1 \varphi_1$ по степеням h .

Разложение (4.22) для Δy с учетом (4.1) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Delta y &\approx y(x+h) - y(x) = \\ &= h f + \frac{h^2}{2} (f_x + f f_y) + \frac{h^3}{6} [f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy} + f_y (f_x + f f_y)] + O(h^4). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Используя формулу Тейлора, для линейной комбинации $A_0\varphi_0 + A_1\varphi_1$ можно дать следующее представление:

$$A_0\varphi_0 + A_1\varphi_1 = h(A_0 + A_1)f + h^2 A_1(\alpha_1 f_x + \beta_{10} f f_y) + \frac{h^3}{2} A_1[\alpha_1^2 f_{xx} + 2\alpha_1 \beta_{10} f f_{xy} + \beta_{10}^2 f^2 f_{yy}] + O(h^4). \quad (4.24)$$

Сравним в разложениях (4.23), (4.24) коэффициенты при $hf, h^2 f_x, h^2 f f_y$. Тем самым на выбор четырех параметров $\alpha_1, \beta_{10}, A_0, A_1$ будут наложены три условия:

$$A_0 + A_1 = 1, \quad A_1 \alpha_1 = \frac{1}{2}, \quad A_1 \beta_{10} = \frac{1}{2}.$$

Непосредственно из (4.23), (4.24) следует, что в случае $q = 1$ для произвольных f нельзя добиться совпадения всех членов с множителем h^3 за счет выбора введенных параметров. Поэтому при $q = 1$ вычислительные правила типа Рунге-Кутты будут иметь лишь второй порядок точности. Параметры $\alpha_1, \beta_{10}, A_0$ могут быть выражены через коэффициент A_1 по формулам

$$A_1 = \beta_{10} = \frac{1}{2A_1}, \quad A_0 = 1 - A_1.$$

В качестве A_1 может быть взято, вообще говоря, произвольное отличное от нуля число. Например, при $A_1 = \frac{1}{2}$ будем иметь

$$\Delta y = \frac{1}{2}(\varphi_0 + \varphi_1) + O(h^3), \quad (4.25)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf(x + h, y + \varphi_0).$$

Вычислительное правило, построенное на основе равенства (4.25), имеет следующий квадратурный смысл. Так как $\varphi_1 = hf(x + h, y + h y') \approx hf(x + h, y(x + h))$, то линейная комбинация $\frac{1}{2}(\varphi_0 + \varphi_1)$ является аналогом квадратурной суммы формулы трапеций при вычислении интеграла в правой части равенства (4.17).

Выбрав $A_1 = 1$, получим еще одно из широко известных вычислительных правил типа Рунге-Кутты второго порядка точности:

$$\Delta y \approx \varphi_1, \quad (4.26)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf(x + h/2, y + \varphi_0/2).$$

Формула (4.26) является, очевидно, аналогом односточной квадратурной формулы средних прямоугольников.

Локальная погрешность любого из методов типа Рунге - Кутты второго порядка точности, как следует из разложений (4.23), (4.24), может быть представлена в виде

$$r_1(h) = \frac{h^3}{6} [f_{xx}(1 - 3\alpha_1^2 A_1) + f f_{xy}(1 - 3\alpha_1 \beta_{10} A_1) + f^2 f_{yy}(1 - 3\beta_{10}^2 A_1) + f_y(f_x + f f_y)] + O(h^4). \quad (4.27)$$

Иногда свободный параметр A_1 выбирают так, чтобы в этом представлении можно было обратить в нуль хотя бы часть членов. Например, если учесть, что $A_1 = \beta_{10} = \frac{1}{2A_1}$ и положить $A_1 = \frac{3}{4}$, то правая часть равенства (4.27) существенно упростится:

$$r_1(h) = \frac{h^3}{6} f_y(f_x + f f_y) + O(h^4). \quad (4.28)$$

При таком выборе A_1 будем иметь

$$\Delta y \approx \frac{1}{4}(\varphi_0 + 3\varphi_1), \quad (4.29)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf(x + 2h/3, y + 2\varphi_0/3).$$

Методы третьего порядка точности. С повышением требований к точности вычислительных правил типа Рунге-Кутты очень быстро возрастает громоздкость необходимых построений, хотя общая схема таких построений и не претерпевает существенных изменений. Поэтому в случае $q = 2$ мы не станем здесь воспроизводить все выкладки и выпишем лишь ту систему уравнений, которым должны удовлетворять параметры (α) , (β) и (A) в методах типа Рунге-Кутты третьего порядка точности:

$$A_0 + A_1 + A_2 = 1, \quad A_1\alpha_1 + A_2\alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad A_1\alpha_1^2 + A_2\alpha_2^2 = \frac{1}{3}, \quad (4.30)$$

$$A_2\alpha_2\beta_{21} = \frac{1}{6}, \quad \beta_{20} + \beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{10} = \alpha_1.$$

Одно из решений этой системы шести уравнений с восемью неизвестными приводит к следующему формулам:

$$\Delta y \approx \frac{1}{6}(\varphi_0 + 4\varphi_1 + \varphi_2), \quad (4.31)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf(x + h/2, y + \varphi_0/2), \quad \varphi_2 = hf(x + h, y - \varphi_0 + 2\varphi_1).$$

Это вычислительное правило является, очевидно, аналогом трехточечной квадратурной формулы Симпсона. Часто встречается в практике вычислений и такой метод типа Рунге-Кутты третьего порядка точности:

$$\Delta y \approx \frac{1}{4}(\varphi_0 + 3\varphi_2), \quad (4.32)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf(x + h/3, y + \varphi_0/3), \quad \varphi_2 = hf\left(x + \frac{2}{3}h, y + \frac{2}{3}\varphi_1\right).$$

По квадратурному смыслу приведенное вычислительное правило сходно с методом (4.29) второго порядка точности и еще раз косвенно подчеркивает достоинства последнего.

Методы четвертого порядка точности. В случае $q = 3$ одним из методов будет аналог четырехточечной квадратурной формулы «трех восьмых»:

$$\Delta y \approx \frac{1}{8}(\varphi_0 + 3\varphi_1 + 3\varphi_2 + \varphi_3), \quad (4.33)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf\left(x + \frac{h}{3}, y + \frac{\varphi_0}{3}\right),$$

$$\varphi_2 = hf\left(x + \frac{2}{3}h, y - \frac{\varphi_0}{3} + \varphi_1\right), \quad \varphi_3 = hf(x + h, y - \varphi_0 - \varphi_1 + \varphi_2).$$

Особенно широко известно другое вычислительное правило типа Рунге-Кутты четвертого порядка точности:

$$\Delta y \approx \frac{1}{6}(\varphi_0 + 2\varphi_1 + 2\varphi_2 + \varphi_3), \quad (4.34)$$

$$\varphi_0 = hf(x, y), \quad \varphi_1 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{\varphi_0}{2}\right),$$

$$\varphi_2 = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{\varphi_1}{3}\right), \quad \varphi_3 = hf(x + h, y + \varphi_2).$$

4.1.4. Многошаговые методы. Экстраполяционный и интерполяционный методы Адамса

Методы, использующие информацию о решаемой задаче на отрезке длиной более одного шага, называются **многошаговыми**. Эти методы имеют вычислительное правило вида

$$y_{n+1} = \sum_{i=0}^p a_i y_{n-i} + h \sum_{j=-s}^q A_j f(x_{n-j}, y_{n-j}), \quad (4.35)$$

позволяющие искать приближенное значение y_{n+1} решения рассматриваемой задачи в точке x_{n+1} сетки $x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N$ в виде линейной комбинации нескольких известных значений y_{n-i} решения в точках x_{n-i} этой сетки с коэффициентами a_i и нескольких приближенных значений $f(x_{n-j}, y_{n-j})$ производной $y'(x) = f(x, y(x))$ искомого решения в точках x_{n-j} с коэффициентами hA_j . При этом среди указанных значений производной могут быть и неизвестные (при $s \geq 1$).

Если $s < 1$, то вычислительные **методы** вида (4.35) обычно называют **явными**,

при $s = 1$ – **неявными** ($A_{-1} \neq 0$),

при $s > 1$ – **методы с забеганием вперед**.

Наиболее применимыми в вычислительной практике являются правила вида

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=-s}^q A_i f(x_{n-i}, y_{n-i}). \quad (4.36)$$

При $s = 0$ – экстраполяционный метод Адамса.

При $s = 1$ – интерполяционный метод Адамса.

Экстраполяционные методы Адамса.

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^q A_i f(x_{n-i}, y_{n-i}). \quad (4.37)$$

Если

$$h \int_0^1 f(x_n + \alpha h, y(x_n + \alpha h)) d\alpha \quad (4.38)$$

заменить на $h \sum_{i=0}^q A_i f(x_n + \alpha_i h, y(x_n + \alpha_i h))$, то коэффициенты A_i, α_i необходимо выбирать следующим образом

$$\sum_{i=0}^q A_i = 1, \quad \sum_{i=0}^q A_i \alpha_i^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, k-1.$$

Для (4.37) $\alpha_i = -i, \quad i = 0, 1, \dots, q$.

$$\sum_{i=0}^q A_i = 1, \quad \sum_{i=0}^q A_i (-i)^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, q. \quad (4.39)$$

Так как определитель этой системы есть определитель Вандермонда, а все $\alpha_i = -i, \quad i = 0, 1, \dots, q$ различны, то значения параметров $A_i, \quad i = 0, 1, \dots, q$ могут быть выбраны для любого $q \geq 0$ и притом единственным образом.

При заданном q тем самым будет построен соответствующий экстраполяционный метод Адамса (4.37).

Формула локальной погрешности:

$$r_{n+1} = y(x_n + h) - y(x_n) - h \sum_{i=0}^q A_i f(x_n + \alpha_i h, y(x_n + \alpha_i h)),$$

$$r_{n+1} = h^{k+1} y^{(k+1)}(x_n) \left[\frac{1}{(k+1)!} - \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^q A_i \alpha_i^k \right] + O(h^{k+2}).$$

Так как для нашего метода $k = q + 1$

$$r_{n+1} = h^{q+2} y^{(q+2)}(x_n) \left[\frac{1}{(q+2)!} - \frac{1}{(q+1)!} \sum_{i=0}^q A_i \alpha_i^{q+1} \right] + O(h^{q+3}).$$

$$q = 0: r_{n+1} = \frac{1}{2} h^2 y''(x_n) + O(h^3);$$

$$q = 1: r_{n+1} = \frac{5}{12} h^3 y'''(x_n) + O(h^4).$$

Замена уравнения задачи Коши уравнением экстраполяционного метода Адамса приводит к некорректной задаче, так как задание лишь одного начального данного y_0 при $q > 0$ не выделяет единственного решения этого разностного уравнения порядка $q + 1$. Поэтому достаточно задать дополнительно к y_0 значения y_1, y_2, \dots, y_q .

Для их нахождения можно использовать любой из рассматриваемых выше одношаговых методов. Часто, чтобы не нарушать однородность вычислительного процесса, конструируют специальные вычислительные алгоритмы, стараясь по возможности более тесно привязать их к методу основного счета.

Интерполяционные методы Адамса.

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=-1}^q A_i f(x_{n-i}, y_{n-i}). \quad (4.40)$$

Аналогично случаю экстраполяционных формул положив $\alpha_i = -i$, $i = -1, 0, 1, \dots, q$, получим систему уравнений

$$\sum_{i=-1}^q A_i = 1, \quad \sum_{i=-1}^q A_i (-i)^j = \frac{1}{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, q+1. \quad (4.41)$$

Формула локальной погрешности для (4.40)

$$r_{n+1} = h^{q+3} y^{(q+3)}(x_n) \left[\frac{1}{(q+3)!} - \frac{1}{(q+2)!} \sum_{i=0}^q A_i \alpha_i^{q+2} \right] + O(h^{q+4}). \quad (4.42)$$

Приведем интерполяционных методов Адамса (4.40)

$$q = -1: y_{n+1} = y_n + h f(x_{n+1}, y_{n+1}),$$

$$r_{n+1} = -\frac{1}{2} h^2 y''(x_n) + O(h^3),$$

$$q = 0: y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f(x_{n+1}, y_{n+1}) + f(x_n, y_n)),$$

$$r_{n+1} = -\frac{1}{12} h^3 y'''(x_n) + O(h^4).$$

Заметим, что построенные интерполяционные методы Адамса не дают явных выражений для нахождения y_{n+1} , а представляют собой уравнение относительно этой неизвестной.

Обычно в качестве начального приближения к y_{n+1} берут соответствующее значение, полученное экстраполяционным методом Адамса. При этом часто ограничиваются лишь одной итерацией. В этом случае процесс приобретает предсказывающе-исправляющий характер. По формуле экстраполяционного метода Адамса находят приближенное значение y_{n+1} с локальной погрешностью h^{q+2} , которое затем уточняется на порядок с помощью интерполяционной формулы Адамса. Такая организация вычислений применяется наиболее часто.

4.1.5. Решение линейных граничных задач

Наряду с задачами Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений рассматриваются также граничные задачи. В этих задачах дополнительные условия, присоединенные к дифференциальным уравнениям, задаются в виде уравнений, содержащих комбинации значений решения и его производных, взятых в нескольких точках отрезка, на котором ищется решение.

Рассмотрим линейные граничные задачи для дифференциальных уравнений 2-го порядка.

Пусть при $a \leq x \leq b$ рассматривается граничная задача для дифференциального уравнения

$$L(y) \equiv y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x) \quad (4.43)$$

с условиями

$$l_a(y) \equiv \alpha_0 y(a) + \alpha_1 y'(a) = A, \quad (4.44)$$

$$l_b(y) \equiv \beta_0 y(b) + \beta_1 y'(b) = B. \quad (4.45)$$

Будем считать, что граничная задача (4.43 - 4.45) имеет единственное решение, это решение непрерывно на $[a, b]$ и имеет непрерывные производные на этом отрезке до четвертого порядка включительно.

Метод сеток.

1. Область задания дифференциального уравнения (4.43) – отрезок $[a, b]$ заменяется некоторой дискретной сеточной областью. Это означает, что на отрезке $[a, b]$ выбирается некоторая система точек. Совокупность этих точек называется **сеткой**. Если положение каждой точки определяется по правилу $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, N$, $h = \frac{b-a}{N}$, N – целое число, то сетку называют **равномерной**. Точки x_k называют **узлами сетки**.

2. Граничная задача (4.43 – 4.45) на множестве узлов, принадлежащих сетке, заменяется некоторой сеточной задачей. Под термином сеточная задача мы будем понимать некоторые соотношения между приближенными значениями решения граничной задачи (4.43 – 4.45) в узлах сетки. В рассматриваемом случае это будет система линейных алгебраических уравнений.

3. Полученная сеточная задача решается по какому-либо численному методу и тем самым находят приближенные значения решения граничной задачи в узлах сетки. Это и является конечной целью метода сеток.

Методы замены обыкновенных дифференциальных уравнений и граничных условий системой алгебраических уравнений.

Возвратимся к краевой задаче (4.43 – 4.45). Выберем равномерную сетку: $x_k = a + kh$,

$$k = 0, 1, \dots, N, h = \frac{b-a}{N}.$$

Дифференциальное уравнение (4.43) будем рассматривать только во внутренних узлах сетки, т.е. будем полагать, что $x = x_k, k = 1, 2, \dots, N - 1$. Граничные условия (4.44 – 4.45) рассмотрим при $x_0 = a, x_N = b$.

Положим в (4.43) $x = x_k$:

$$L(y)|_{x=x_k} \equiv y''(x_k) + p(x_k)y'(x_k) + q(x_k)y(x_k) = f(x_k), \quad k = 1, 2, \dots, N - 1. \quad (4.46)$$

Выразим $y'(x_k), y''(x_k)$ через значения функции $y(x)$ в узлах x_{k-1}, x_k, x_{k+1} , т.е. через значения $y(x_{k-1}), y(x_k), y(x_{k+1})$. Для этой цели воспользуемся формулами численного дифференцирования.

Имеем

$$y'(x_k) = \frac{y(x_k) - y(x_{k-1}))}{h} + r_k^{(1)}(h), \quad r_k^{(1)}(h) = \frac{h}{2}y''(x_k^{(1)}), \quad x_{k-1} < x_k^{(1)} < x_k; \quad (4.47)$$

$$y'(x_k) = \frac{y(x_{k+1}) - y(x_k)}{h} + r_k^{(2)}(h), \quad r_k^{(2)}(h) = -\frac{h}{2}y''(x_k^{(2)}), \quad x_{k-1} < x_k^{(2)} < x_k; \quad (4.48)$$

$$y'(x_k) = \frac{y(x_{k+1}) - y(x_{k-1}))}{2h} + r_k^{(3)}(h), \quad r_k^{(3)}(h) = -\frac{h^2}{6}y'''(x_k^{(3)}), \quad x_{k-1} < x_k^{(3)} < x_k; \quad (4.49)$$

$$y''(x_k) = \frac{y(x_{k+1}) - 2y(x_k) + y(x_{k-1}))}{h^2} + r_k^{(4)}(h),$$

$$r_k^{(4)}(h) = -\frac{h^2}{12}y^{IV}(x_k^{(4)}), \quad x_{k-1} < x_k^{(4)} < x_k. \quad (4.50)$$

Подставив в (4.46) выражения (4.49) и (4.50) для $y'(x_k), y''(x_k)$, получим

$$L(y)|_{x=x_k} \equiv L_h(y(x_k)) + R_k(h) = f(x_k), \quad (4.51)$$

$$L_h(y(x_k)) = \frac{y(x_{k+1}) - 2y(x_k) + y(x_{k-1}))}{h^2} + p(x_k)\frac{y(x_{k+1}) - y(x_{k-1}))}{2h} + q(x_k)y(x_k),$$

$$R_k(h) = r_k^{(4)}(h) + p(x_k)r_k^{(3)}(h).$$

Выражение $L_h(y(x_k))$ называется **разностным оператором** второго порядка, а величина $R_k(h)$ – **погрешностью аппроксимации** дифференциального оператора $L(y)$ разностным оператором $L_h(y(x_k))$ на решении. Если для $R_k(h)$ выполняется условие

$$|R_k(h)| \leq Mh^2, \quad k = 1, 2, \dots, N - 1,$$

где $M = \text{const}$, не зависящая от h , то говорят, что разностный оператор L_h аппроксимирует на решении дифференциальный оператор L с погрешностью второго порядка относительно h .

Пусть h достаточно мало, тогда в формуле (4.51) величиной $R_k(h)$ можно пренебречь и мы получим

$$L_h(y_k) = f(x_k), \quad k = 1, 2, \dots, N - 1, \quad (4.52)$$

где при выполнении некоторых условий можно предположить, что $y_i \approx y(x_i), i = 0, 1, \dots, N$. Равенство (4.52) будем называть **разностной схемой**, аппроксимирующей уравнение $L(y) = f(x)$.

Отметим еще, что (4.52) есть система линейных алгебраических уравнений, число таких уравнений $N - 1$, а матрица этой системы – трехдиагональная. Неизвестными являются y_0, y_1, \dots, y_N . Число этих неизвестных в системе равно $N + 1$.

Обратимся к граничным условиям (4.44), (4.45). Используя (4.48) при $k = 0$, из (4.44) получим

$$l_a(y) \equiv l_a^{(h)}(y(x_0)) + R_0(h) = A, \quad (4.53)$$

$$l_a^{(h)}(y(x_0)) \equiv \alpha_0 y(x_0) + \alpha_1 \left(\frac{y(x_1) - y(x_0)}{h} \right),$$

$$R_0(h) = \alpha_1 r_0^{(2)}(h).$$

Аналогично, используя (4.47) при $k = N$, из (4.45) получим

$$l_b(y) \equiv l_b^{(h)}(y(x_N)) + R_N(h) = B, \quad (4.54)$$

где

$$l_b^{(h)}(y(x_N)) \equiv \beta_0 y(x_N) + \beta_1 \left(\frac{y(x_N) - y(x_{N-1})}{h} \right),$$

$$R_N(h) = \beta_1 r_N^{(1)}(h).$$

При достаточно малом h величинами $R_0(h)$, $R_N(h)$, имеющими первый порядок малости относительно h , в выражениях (4.53), (4.54) можно пренебречь. Тогда вместо (4.53), (4.54) будем иметь

$$l_a^{(h)}(y_0) = A, \quad (4.55)$$

$$l_b^{(h)}(y_N) = B. \quad (4.56)$$

Операторы $l_a^{(h)}(y_0)$ и $l_b^{(h)}(y_N)$ аппроксимируют соответственно граничные операторы $l_a(y)$ и $l_b(y)$ с погрешностью $O(h)$.

Формулы (4.52), (4.55), (4.56) образуют в совокупности систему $N + 1$ линейных алгебраических уравнений с неизвестными y_0, y_1, \dots, y_N . В методе сеток эту систему решают обычно методом прогонки и после этого полагают что $y_k \approx y(x_k)$, $k = 0, 1, \dots, N$.

Обратим внимание на то, что граничные условия (4.44), (4.45) при необходимости можно аппроксимировать разностными условиями с погрешностью второго порядка малости относительно h . Для этого достаточно, например, воспользоваться вместо (4.47), (4.48) следующими формулами:

$$y'(x_0) = \frac{-y(x_2) + 4y(x_1) - 3y(x_0)}{2h} + O(h^2),$$

$$y'(x_N) = \frac{3y(x_N) - 4y(x_{N-1}) + y(x_{N-2})}{2h} + O(h^2).$$

В этом случае соответствующая методу прогонки структура матрицы коэффициентов СЛАУ еще должна быть создана. Усложнения, сопутствующие второму варианту, могут быть оправданы тем, что в этом случае исходная дифференциальная краевая задача полностью аппроксимируется алгебраической системой относительно компонент каркаса решения с точностью $O(h^2)$, в то время как о первом варианте такого сказать нельзя (если, конечно, речь не идет о первой краевой задаче, т.е. о случае $\alpha_1 = \beta_1 = 0$, когда в аппроксимации краевых условий вообще нет нужды). Однако в поисках компромисса между качеством аппроксимации и численной устойчивостью при решении конкретных задач первый вариант может оказаться и более предпочтительным.

Устойчивость конечно-разностной схемы решения краевой задачи.

Рассмотрим построенные разностные уравнения относительно приближенных значений решения $y_i \approx y(x_i)$, $i = 1, \dots, N - 1$:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q_i y_i = f_i. \quad (4.57)$$

После приведения подобных слагаемых в (4.57) получаем стандартное трехточечное разностное уравнение второго порядка

$$\left(1 + \frac{h}{2}p_i\right)y_{i+1} - (2 - h^2q_i)y_i + \left(1 - \frac{h}{2}p_i\right)y_{i-1} = h^2f_i, \quad (4.58)$$

где $i = 1, 2, \dots, N - 1$.

Остановимся теперь на вопросе устойчивости построенной конечноразностной схемы решения краевой задачи (4.43 – 4.45). Эту устойчивость можно связать с устойчивостью метода прогонки, что в свою очередь, можно гарантировать, когда матрица коэффициентов имеет свойство диагонального преобладания. Посмотрим с этой точки зрения на i -е «внутреннее» уравнение системы, т.е. на уравнение (4.58).

Условие диагонального преобладания для (4.58) означает, что должно выполняться неравенство

$$|2 - h^2q_i| > \left|1 + \frac{h}{2}p_i\right| + \left|1 - \frac{h}{2}p_i\right| \quad \forall i = 1, 2, \dots, N - 1. \quad (4.59)$$

Рассмотрим, что представляет собой правая часть этого неравенства. Раскрывая модули, имеем

$$\left|1 + \frac{h}{2}p_i\right| + \left|1 - \frac{h}{2}p_i\right| = \begin{cases} -hp_i, & \text{если } hp_i < -2, \\ 2, & \text{если } |hp_i| \leq 2, \\ hp_i, & \text{если } hp_i > 2. \end{cases}$$

Следовательно, правую часть неравенства (4.59) как функцию переменной hp_i (считая ее изменяющейся непрерывно) в условных координатах можно представить в виде графика, изображенного на рис. 4.1.

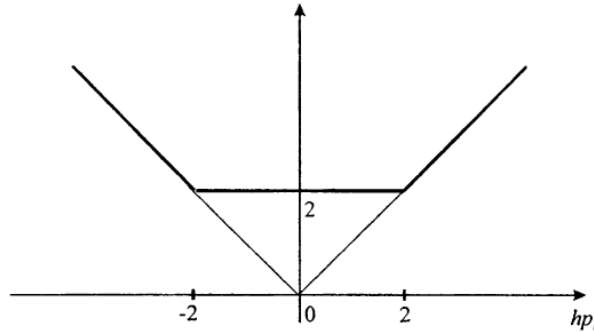


Рис. 4.1. Условный график правой части неравенства (4.59)

Так как левая часть неравенства (4.59) при $q_i > 0$ и малых $h > 0$ (малость h нужна из требований аппроксимации) меньше 2, то на устойчивость прогонки можно рассчитывать лишь в случае, когда $q(x) < 0$. При этом имеет место

$$|2 - h^2q_i| = 2 - h^2q_i > 2 \quad \forall h.$$

Чтобы в таком случае неравенство (4.59) выполнялось при любых $p(x)$, для правой части его считаем допустимым только значение 2 (т.е. используем горизонтальную часть графика на рис. 4.1). Отсюда получаем ограничение

$$|hp_i| \leq 2.$$

Означающее, что устойчивость прогонки можно гарантировать при условии, что шаг дискретизации h удовлетворяет неравенству

$$h \leq \frac{2}{|p_i|}, \quad \forall i = 1, 2, \dots, N - 1.$$

Усиливая это неравенство и используя утверждение «Аппроксимация плюс устойчивость дает сходимость», приходим к заключению, что если в дифференциальном уравнении (4.43)

$$q(x) < 0 \quad \forall x \in [a, b]. \quad (4.60)$$

А в определяющем методе конечных разностей разностном уравнении (4.58)

$$h \leq \frac{2}{\max_{x \in [a, b]} |p(x)|},$$

то метод конечных разностей сходится (по крайней мере, к решению первой краевой задачи, т.е. когда в (4.44), (4.45) $\alpha_1 = \beta_1 = 0$; в других случаях требуется более детальный анализ).

Наличие ограничения на шаг h в методе конечных разностей второго порядка (4.57) характеризует его как условно устойчивый метод. Если отказаться от аппроксимации все производных с порядком $O(h^2)$ и использовать в роли $y'(x_i)$ правые или левые разностные отношения первого порядка точности, связывая их выбор со знаком p_i , а именно, рассматривая вместо (4.58) разностное уравнение

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + p_i \left[\begin{array}{l} \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad \text{если } p_i > 0 \\ \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, \quad \text{если } p_i < 0 \end{array} \right] + q_i y_i = f_i,$$

при $i = 1, 2, \dots, N - 1$, придем к конечно-разностному методу

$$\left[\begin{array}{l} y_{i-1} - (2 + hp_i - h^2 q_i) y_i + (1 + hp_i) y_{i+1} = h^2 f_i, \quad \text{если } p_i > 0, \\ (1 - hp_i) y_{i-1} - (2 - hp_i - h^2 q_i) y_i + y_{i+1} = h^2 f_i, \quad \text{если } p_i < 0, \end{array} \right. \quad (4.61)$$

имеющему первый порядок точности независимо от точности аппроксимации краевых условий.

Легко видеть, что при условии (4.60) диагональное преобладание будет при любой величине шага $h > 0$. Отсюда следует его **безусловная устойчивость**, правда в ущерб точности; последнее означает необходимость проведения вычислений с более мелким шагом для доведения погрешности решения до некоторой фиксированной величины, чем это требует метод второго порядка (4.58), если он оба одновременно применимы.

Правило Рунге.

Укажем практический прием, позволяющий на основе вычислений судить о том, с какой точностью получены приближенные сеточные значения решения.

Пусть $y(x)$ – точное решение некоторой граничной задачи;

А $y_h(x)$ – приближенное решение этой задачи, полученное по методу сеток с шагом h .

$$\varepsilon_h = \frac{y_h(x) - y_{2h}(x)}{2^p - 1}, \quad (4.62)$$

где $p > 0$ – порядок аппроксимации.

Формула (4.62) называется **правилом Рунге**.

Формирование системы линейных уравнений и решение ее методом прогонки

$$\begin{cases} b_0 y_0 + c_0 y_1 = d_0, \\ a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = d_i, \quad i = 1, \dots, N-1, \\ a_N y_{N-1} + b_N y_N = d_N. \end{cases}$$

где $a_i = 1 - \frac{h}{2} p_i$, $b_i = h^2 q_i - 2$, $c_i = 1 + \frac{h}{2} p_i$, $d_i = h^2 f_i$,

$$b_0 = h\alpha_0 - \alpha_1, \quad c_0 = \alpha_1, \quad d_0 = Ah,$$

$$a_N = -\beta_1, \quad b_N = h\beta_0 + \beta_1, \quad d_N = Bh.$$

Прогоночные коэффициенты в прямом ходе определяются с помощью выражений:

$$A_0 = -\frac{c_0}{b_0}, \quad B_0 = \frac{d_0}{b_0}.$$

$$A_i = \frac{-c_i}{b_i + a_i A_{i-1}}, \quad B_i = \frac{d_i - a_i B_{i-1}}{b_i + a_i A_{i-1}}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$A_N = 0, \quad B_N = \frac{d_N - a_N B_{N-1}}{b_N + a_N A_{N-1}} = y_N.$$

Обратный ход метода прогонки: $y_i = A_i y_{i+1} + B_i$, $i = N-1, \dots, 0$.

4.2. Задание

Решается задача Коши: $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ на отрезке $[a, b]$.

1. Найти шаг интегрирования для решения задачи Коши методом Рунге-Кутты 4-го порядка с точностью 10^{-4} .
2. Решить методами: Рунге-Кутты 4-го порядка, Эйлера.
3. Найти точное решение задачи Коши аналитическим методом, сравнить его с приближенными. Найти максимум модуля отклонений в узловых точках приближенного решения от точного.
4. Построить на одном графике интегральные кривые точного решения и решений, полученных в п.2.
5. Записать результаты расчетов в сводную таблицу 4.1.

Таблица 4.1

x	y	$U_{\text{Эйлера}}$	$\Delta U_{\text{Эйлера}}$	$U_{\text{Рунге-Кутты}}$	$\Delta U_{\text{Рунге-Кутты}}$

1. $y' + xy = (1+x)e^{-x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
2. $xy' + y = 2y^2 \ln x$, $y(1) = \frac{1}{2}$, $[1, 2]$.
3. $2(xy' + y) = xy^2$, $y(1) = 2$, $[1, 2]$.

4. $y' + 4x^3y = 4(x^3 + 1)e^{-4x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
5. $xy' - y = -y^2(\ln x + 2) \ln x$, $y(1) = 1$, $[1, 2]$.
6. $y' + xy = (1 + x)e^{-x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
7. $xy' + y = 2y^2 \ln x$, $y(1) = \frac{1}{2}$, $[1, 2]$.
8. $2(xy' + y) = xy^2$, $y(1) = 2$, $[1, 2]$.
9. $y' + 4x^3y = 4(x^3 + 1)e^{-4x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
10. $xy' - y = -y^2(\ln x + 2) \ln x$, $y(1) = 1$, $[1, 2]$.
11. $y' + xy = (1 + x)e^{-x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
12. $xy' + y = 2y^2 \ln x$, $y(1) = \frac{1}{2}$, $[1, 2]$.
13. $2(xy' + y) = xy^2$, $y(1) = 2$, $[1, 2]$.
14. $y' + 4x^3y = 4(x^3 + 1)e^{-4x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
15. $xy' - y = -y^2(\ln x + 2) \ln x$, $y(1) = 1$, $[1, 2]$.
16. $y' + xy = (1 + x)e^{-x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
17. $xy' + y = 2y^2 \ln x$, $y(1) = \frac{1}{2}$, $[1, 2]$.
18. $2(xy' + y) = xy^2$, $y(1) = 2$, $[1, 2]$.
19. $y' + 4x^3y = 4(x^3 + 1)e^{-4x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
20. $xy' - y = -y^2(\ln x + 2) \ln x$, $y(1) = 1$, $[1, 2]$.
21. $y' + xy = (1 + x)e^{-x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
22. $xy' + y = 2y^2 \ln x$, $y(1) = \frac{1}{2}$, $[1, 2]$.
23. $2(xy' + y) = xy^2$, $y(1) = 2$, $[1, 2]$.
24. $y' + 4x^3y = 4(x^3 + 1)e^{-4x}y^2$, $y(0) = 1$, $[0, 1]$.
25. $xy' - y = -y^2(\ln x + 2) \ln x$, $y(1) = 1$, $[1, 2]$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 636 с. – [http://initkms.ru/umk/etf/d/NumericalMethods\(Bahvalov\).pdf](http://initkms.ru/umk/etf/d/NumericalMethods(Bahvalov).pdf)
2. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. – М.: Издательство Лань, 2014. – 672 с.
3. Вержбицкий В.М. Основы численных методов. – М.: Высш. шк., 2002. – 840 с.
4. Бахвалов Н.С., Лапин А.В., Чижонков Е.В. Численные методы в задачах и упражнениях. – М.: Высш. шк., 2000. – 190 с.