

Введение (Т10)

Решение любой практической задачи с использованием численных методов предполагает наличие нескольких этапов, цель и последовательность которых можно сформулировать следующим образом.

Последовательность решения задач на компьютере.

1. *Постановка задачи. Физическая модель и цели решения.* На этом этапе предполагается выбор адекватной физической модели, отвечающей поставленным целям. Любой процесс или явление являются в принципе очень сложными и многопараметрическими, поэтому необходимо выделить основные параметры влияющими на конечный результат в наибольшей степени.
2. *Математическая модель.* Математическая модель должна адекватно описывать физические свойства выбранной физической модели. В качестве простого примера можно рассмотреть падение со стола металлического и пенопластового шариков, двигающихся с одной скоростью. Совершенно очевидно, физические и математические модели должны быть разными. При рассмотрении движения пенопластового шарика нужно учитывать сопротивление среды, что для металлического шарика будет избыточным условием. В то же самое время программу по расчёту движения пенопластового шарика можно применять и для анализа движения металлического шарика.
3. *Численный метод решения.* Сформулированную на предшествующем этапе математическую модель задачи можно решить различными уже известными в литературе способами. Необходимо выбрать метод решения обеспечивающий нужную точность и приемлемое время расчётов.
4. *Разработка алгоритма решения.* Алгоритм решения – это последовательность простейших действий, приводящая к получению конкретных результатов. При решении сложных задач от разработанного алгоритма может существенно зависеть время расчёта.
5. *Программирование.* Выбранный алгоритм решения задачи записывается на каком-либо языке программирования (как правило, удобном для программиста).
6. *Отладка программы.* Важный этап позволяющий выявить чисто технические ошибки в написании программы, а также проверить эффективность работы выбранного алгоритма на основе численного эксперимента.
7. *Проведение расчётов (численный эксперимент).* Накапливание фактического материала для проверки работоспособности выбранной физической и математической модели задачи, а также численного метода решения.
8. *Тестирование и анализ результатов.*
 - Проверка полученных результатов по размерности.
 - Сравнение с аналитическими решениями.
 - Сравнение с предшествующей версией решения задачи.
 - Проверка на выполнение законов сохранения.
 - Сравнение с натурным экспериментом.Наиболее надёжной проверкой является натурный эксперимент, проведение которого, к сожалению, не всегда возможно.

По результатам тестирования оценивается пригодность разработанной программы для практического применения или выявляется необходимость коррекции какого-либо этапа процесса создания программы (возможно даже с выбора физической модели).

Глава 1. Точность вычислений.

Приближённые числа.

Запись чисел производится в двух формах:

- С фиксированной десятичной точкой
- С плавающей десятичной точкой

123 .075 , 0.00023

Пример: $0.123075 * 10^3$, $0.23 * 10^{-3}$
(нормализованная форма)

Устойчивость, корректность, сходимость. (Т26)

Если исходная величина имеет погрешность Δx , то результат имеет погрешность Δy . Задача называется *устойчивой*, если решение y непрерывно зависит от x , т.е. малое приращение Δx вызывает малое приращение Δy . Неустойчивость проявляется в том, что незначительные погрешности в начальных данных приводят к ошибочному решению задачи.

Пример:

$$x^2 - 2x + \text{sign}(a) = 0$$

$$\text{sign}(a) = \begin{cases} 1 & a > 0 \\ -1 & a < 0 \end{cases}$$

При $a \geq 0$, решение $x_1 = x_2 = 1$. При $a < 0$, решение $x_{1,2} = 1 \pm \sqrt{2}$.

Малое изменение параметра a приводит к различным результатам.

Задача называется *поставленной корректно*, если для любых значений исходных данных из некоторого класса решение существует, единственно и устойчиво по исходным данным.

При анализе точности вычислительного процесса одним из важнейших критериев является его *сходимость*, т.е. близость полученного численного решения к истинному значению.

Абсолютная и относительная погрешности.

В вычисления часто используются приближенные значения величин, что позволяет упростить сам процесс вычислений. Например, вместо числа $\sqrt{2}$ используются значения 1,41 или 1,42. Эти числа будут *приближенными* значениями $\sqrt{2}$: первое – *по недостатку*, второе – *по избытку*.

Погрешностью Δa приближенного числа a называется разность между точным числом A и данным его приближением a .

$$\Delta a = A - a . \quad (1.1)$$

Абсолютной погрешностью Δ приближенного числа a называется абсолютная величина разности между точным числом A и данным его приближением a .

$$\Delta = |A - a| \quad (1.2)$$

Абсолютной погрешности недостаточно для определения точности вычислений или измерений.

Относительной погрешностью δ приближенного числа a называется отношение абсолютной погрешности Δ к модулю соответствующего точного числа $A (A \neq 0)$.

$$\delta = \frac{\Delta}{|A|} \quad (1.3)$$

Из (1.3) видно, что для одинаковых значений Δ и разных A_1 и A_2 , (при значениях $A_1 > A_2$) , качество приближения числа A_1 выше, чем A_2 .

Как правило, точное значение величины A неизвестно, следовательно, неизвестно и значение Δ . Под предельной абсолютной погрешностью Δ_a приближенного числа принимается всякое число, которое не меньше абсолютной погрешности этого числа.

$$y \quad (1.4)$$

Отсюда следует, что точное число A заключено в границах

$$a - \Delta_a \leq A \leq a + \Delta_a \quad (1.5)$$

Рассмотрим два примера:

1. Пусть число $a = 3.14$ заменяет число π . В то же время выполняется условие $3.14 < \pi < 3.15$ и, следовательно, $(a - \pi) < 0.01$. В этом случае можно принять $\Delta_a = 0.01$.

2. Если проводятся какие-либо измерения, то за предельную абсолютную погрешность можно принять цену деления измерительного прибора или устройства.

Предельной относительной погрешностью δ_a данного приближенного числа a называется всякое число не меньшее относительной погрешности этого числа.

$$\delta \leq \delta_a \quad (1.6)$$

т.е. $\frac{\Delta}{|A|} \leq \delta_a$, отсюда, $\Delta \leq |A| * \delta_a$.

В этом случае за предельную абсолютную погрешность можно принять

$$\Delta_a \leq |A| * \delta_a \quad (1.7)$$

На практике считаем, что $A \approx a$, тогда (1.7) заменяется соотношением

$$\Delta_a \leq |a| * \delta_a \quad (1.8)$$

Зная предельную относительную погрешность δ_a можно определить границы для точного числа – оно лежит в пределах между величинами $a(1 - \delta_a)$ и $a(1 + \delta_a)$.

Пусть $A > 0$, $a > 0$ и $\Delta_a < a$. Тогда

$$\delta = \Delta / A \leq \Delta_a / (a - \Delta_a) \quad (1.9)$$

и за предельную абсолютную погрешность можно принять

$$\delta_a = \Delta_a / (a - \Delta_a) \quad (1.10)$$

Аналогично для абсолютной предельной погрешности получаем

$$\Delta_a = a * \delta_a / (1 - \delta_a) \quad (1.11)$$

Обычно $\Delta_a \ll a$ и $\delta_a \ll 1$, тогда приближенно $\delta_a \approx \Delta_a / a$ и $\Delta_a \approx a * \delta_a$.

Значащая цифра и т.д!!!!

Основные источники погрешностей.

1. Погрешности, связанные с самой постановкой задачи. Любой реальный процесс или явления бесконечно сложны по своей сути. Поэтому для их исследования или изучения выбирается достаточно простая физическая модель, отражающая интересующие нас свойства объекта. Физической модели ставится в соответствие некая математическая модель, обеспечивающая возможность как качественного, так и количественного анализа объекта. Сделанные допущения и упрощения составляют **погрешности задачи**.

2. В математическом анализе многие процессы бесконечны – например, функции, заданные бесконечными рядами. В реальных расчетах приходится ограничиваться неким конечным приближением. Такой обрыв процесса приводит к возникновению **остаточной погрешности**.

3. В математических расчетах используются числовые параметры, которые могут быть определены только приближенно. Таковыми являются все физические константы. Этот тип погрешности является **начальной погрешностью**.

4. В любых вычислениях рациональные числа записываются десятичной дробью с ограниченным количеством значащих цифр. Эти ограничения приводят к появлению **погрешности округления**.

5. Проводя вычисления с использованием приближенных чисел, мы переносим эти неточности на результаты расчетов. Этот тип погрешностей относится к **погрешности действий**.

6. Некоторые из перечисленных погрешностей (погрешность задачи, начальной погрешностью, погрешности действий) являются **неустраняемыми погрешностями**.

Погрешность суммы.

Абсолютная погрешность алгебраической суммы нескольких приближенных чисел не превышает суммы абсолютных погрешностей этих чисел.

$$u = x_1 * x_2 * x_3 \dots * x_n$$

Очевидно, что

$$\Delta u = \pm \Delta x_1 \pm \Delta x_2 \pm \Delta x_3 \pm \dots \pm \Delta x_n$$

и, следовательно

$$|\Delta u| = \pm |\Delta x_1| \pm |\Delta x_2| \pm |\Delta x_3| \pm \dots \pm |\Delta x_n| \quad (1.12)$$

За предельную абсолютную погрешность алгебраической суммы можно принять сумму предельных абсолютных погрешностей этих слагаемых.

$$\Delta_u = \Delta_{x_1} + \Delta_{x_2} + \Delta_{x_3} + \dots + \Delta_{x_n} \quad (1.13)$$

Погрешность разности.

Предельная абсолютная погрешность разности можно равна сумме предельных абсолютных погрешностей уменьшаемого и вычитаемого.

$$\Delta_u = \Delta_{x_1} + \Delta_{x_2}$$

Предельная относительная погрешность разности

$$\delta_u = \frac{\Delta_{x_1} + \Delta_{x_2}}{A}, \quad (1.14)$$

где A точное значение абсолютной величины разности двух чисел x_1 и x_2 .

При вычитании двух приближенных чисел x_1 и x_2 достаточно близких друг к другу предельная относительная погрешность разности может быть весьма большой, в то время как относительные погрешности уменьшаемого и вычитаемого остаются малыми. Происходит **потеря точности**.

Погрешность произведения.

Относительная погрешность произведения нескольких приближенных чисел, отличных от нуля, не превышает суммы относительных погрешностей этих чисел.

$$u = x_1 * x_2 * x_3 \dots * x_n$$

Пусть все сомножители положительные, тогда

$$\ln(u) = \ln(x_1) + \ln(x_2) + \dots + \ln(x_n)$$

Используя приближенную формулу $\Delta \ln(x) \approx d(\ln(x)) = \Delta/x$, находим

$$\Delta u / u = \Delta x_1 / x_1 + \Delta x_2 / x_2 + \dots \Delta x_n / x_n$$

По абсолютной величине

$$|\Delta u / u| = |\Delta x_1 / x_1| + |\Delta x_2 / x_2| + \dots |\Delta x_n / x_n| \quad (1.15)$$

Погрешность частного.

Относительная погрешность частного приближенных чисел, отличных от нуля, не превышает суммы относительных погрешностей делимого и делителя.

$$u = x_1 / x_2 \\ \ln(u) = \ln(x_1) - \ln(x_2)$$

По абсолютной величине

$$|\Delta u / u| \leq |\Delta x_1 / x_1| + |\Delta x_2 / x_2| \quad (1.16)$$

Погрешность степени.

Пусть $u = x^m$, тогда $\ln(u) = m \ln(x)$ и следовательно

$$\left| \frac{\Delta u}{u} \right| = m \left| \frac{\Delta x}{x} \right| \quad \delta_u = m \delta_x$$

Предельная относительная погрешность m -й степени числа в m раз больше относительной погрешности самого числа.

Погрешность корня.

Пусть $u = \sqrt[m]{x}$, тогда $u^m = x$ и, следовательно,

$$\delta_u = \frac{1}{m} \delta_x$$

Предельная относительная погрешность корня m -й степени числа в m раз меньше относительной погрешности самого числа.

Значащая цифра. Число верных знаков.

Положительное число a можно представить в виде конечной или бесконечной десятичной дроби.

$$a = a_m * 10^m + a_{m-1} * 10^{m-1} + \dots + a_{m-n+1} * 10^{m-n+1} + \dots$$

где a_i - цифры числа a ($a_i = 0, 1, 2, \dots, 9$) и старшая цифра $a_m \neq 0$ (старший десятичный разряд).

$$123.345\dots = 1 * 10^2 + 2 * 10^1 + 3 * 10^0 + 3 * 10^{-1} + 4 * 10^{-2} + 5 * 10^{-3} + \dots$$

На практике приходится работать с приближёнными числами, являющимися конечными дробями. Все сохранённые знаки являются *значащими* цифрами.

Значащей цифрой приближённого числа является всякая цифра в его десятичном представлении, отличная от нуля, и нуль, если он содержится между значащими цифрами или является представителем сохранённого десятичного разряда.

Пример: 0.002080 Первые три нуля не являются значащими

Третий нуль – значащий, т.к. заключен между значащими цифрами

Последний нуль – значащий, т.к. сохранен десятичный разряд 10^{-6} .

Если последняя цифра не является значащей, то число должно быть записано как 0.00208.

Первые n значащих цифр (десятичных знаков) являются верными, если абсолютная погрешность этого числа не превышает половины единицы разряда, выраженного n -ой значащей цифрой, считая слева направо.

Пример: Измеряем размер детали микрометром. Цена деления – 10 микрометров. Следовательно, приняв за абсолютную погрешность измерений цену деления шкалы микрометра, размер детали, записанный как 2621.78 мкм, содержит три первых верных значащих цифр

Глава 2. Приближение функций.

Общие вопросы приближения.

В своей практической деятельности мы часто сталкиваемся с ситуацией, когда те или иные параметры системы или объекта можно определить только в конечном числе точек (узлов). А для проведения численного моделирования необходимо знание значений параметров системы во всей области определения.

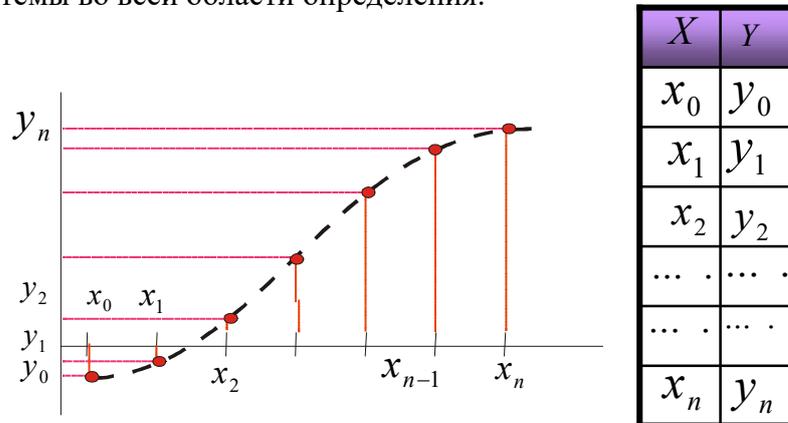


Рис.1. Представление табличной функции

Возможен и другой вариант, когда известная аналитическая зависимость какого-либо параметра системы представляет собой трудновычисляемую функцию $y = f(x)$, требующую длительных расчетов. Например, в теоретической физике некоторые спецфункции вычисляются медленно и с трудом. В этом случае более рационально составить таблицу значений этих функции в ограниченном количестве точек в области их определения, а промежуточные значения $y = f(x)$ вычислять с помощью приближённых функций. В обоих случаях мы оперируем с табличной функцией, которую можно представить, как в форме таблицы, так и графиком в виде дискретного ряда точек.

Наиболее часто исходная функция $y = f(x)$ приближается многочленами.

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

Иногда удобно приближать функции тригонометрическими полиномами, или приближать полиномом не $\varphi(x)$, а $\ln(\varphi(x))$. (Б-36)

В общем случае задачу можно сформулировать следующим образом:

Данную функцию $f(x)$ требуется приближённо заменить (аппроксимировать) некоторой функцией $\varphi(x)$, так что отклонение $\varphi(x)$ от $f(x)$ во всей области определения было наименьшим. Если приближение осуществляется относительно узлов табличной функции (т.е. функции заданной в ограниченном числе значений аргумента), то такая аппроксимация называется *точечной* (Рис.2а). К этому виду аппроксимации относятся интерполирование, среднеквадратичное приближение и др. При построении приближения на непрерывном множестве точек (отрезке) аппроксимация называется *непрерывной* (Рис.2б), например, равномерное приближение. Различие между точечной и непрерывной аппроксимацией заключается в том, что при непрерывной аппроксимации ни одно значение аппроксимирующей функции $\varphi(x)$ не может выйти за пределы максимально допустимой абсолютной разницы Δ между функциями $\varphi(x)$ и $f(x)$.

Если $|f(x) - \varphi(x)| < \varepsilon$, это означает, что функция $\varphi(x)$ *равномерно приближает* (аппроксимирует) функцию $f(x)$ с точностью ε на отрезке $[a, b]$. Понятие равномерного приближения предполагает сравнение заданной и аппроксимирующей функций на непрерыв-

ном множестве (отрезке $[a, b]$) и связано с абсолютным отклонением Δ функции $\varphi(x)$ от функции $f(x)$ на этом отрезке

$$\Delta = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - \varphi(x)|.$$

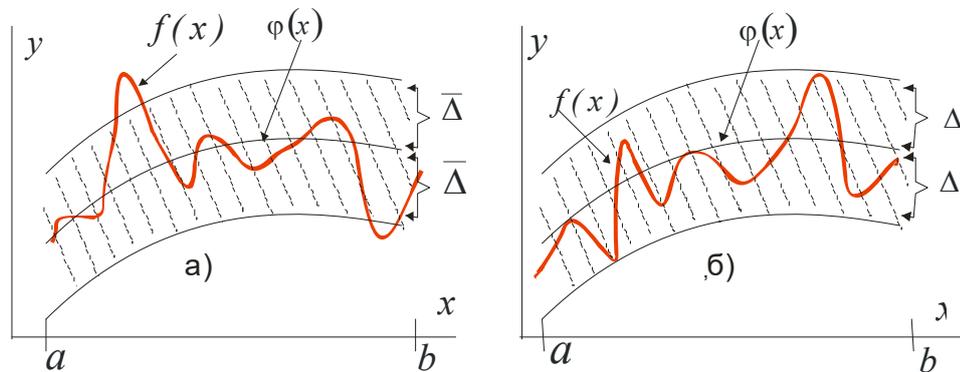


Рис.2. Среднеквадратичное (а) и равномерное приближение (б).

Среднеквадратичное отклонение $\bar{\Delta}$ связано с мерой отклонения S функции $\varphi(x)$ от функции $f(x)$ на множестве точек $(x_i, y_i) i = 0, 1, 2, \dots, n$.

$$S = \sum (\varphi(x_i) - y_i)^2 \quad \text{и} \quad \bar{\Delta} = \sqrt{S/n}$$

Нередко требуется рассмотреть поведение изучаемого объекта вне имеющегося диапазона $[a, b]$ аргумента функции $f(x)$, т.е. представить характер её поведения при $x < a$ и $x > b$. Этот процесс называется *экстраполяцией*.

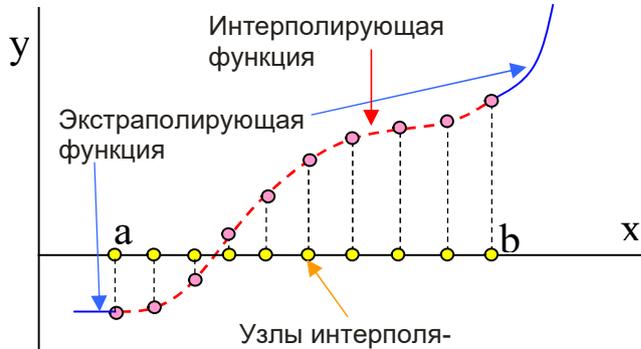


Рис.2. Интерполяция и экстраполяция.

Интерполяция – процесс замены табличной функции аналитической функцией, значения которой в узлах таблицы совпадают со значениями табличной функции (!).

Существуют несколько схем реализующих подобную замену. Они отличаются друг от друга как формой исходных таблиц (равноотстоящие узлы или произвольно расположенные), так и по способу выбора узлов, содержащих информацию, используемую для построения интерполирующей функции. Интерполирующая функция может строиться сразу для всего рассматриваемого интервала аргумента или отдельно для разных частей этого интервала.

Одним из основных понятий, связанных с табличными функциями, является понятие **конечной разности**. (X-19 в т.ч.)

Пусть $y = f(x)$ - заданная функция, а $\Delta x = x_{i+1} - x_i = h = const$ - фиксированная величина приращения аргумента (шаг). Тогда выражение

$$\Delta y \equiv \Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) \quad (2.1)$$

называется *первой конечной разностью* функции y .

В приведённых формулах используется разностный оператор Δ .

$\Delta x = x_{i+1} - x_i$ - разность значений переменной x в двух соседних узлах таблицы.

$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ - разность значений табличной функции в двух соседних узлах таблицы.

Оператор Δ по своему воздействию на функцию $f(x)$ похож на действие дифференциального оператора $\frac{d}{dx}$ (производная $\frac{df(x)}{dx}$ или $\frac{dy}{dx}$).

Аналогично определяются *конечные разности* функции y *высших порядков*.

$$\begin{aligned} \Delta^2 y_i &= \Delta y_{i+1} - \Delta y_i \\ \Delta^3 y_i &= \Delta^2 y_{i+1} - \Delta^2 y_i \\ \Delta^4 y_i &= \Delta^3 y_{i+1} - \Delta^3 y_i \\ &\dots \dots \dots \\ \Delta^n y_i &= \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i \end{aligned} \quad (2.2)$$

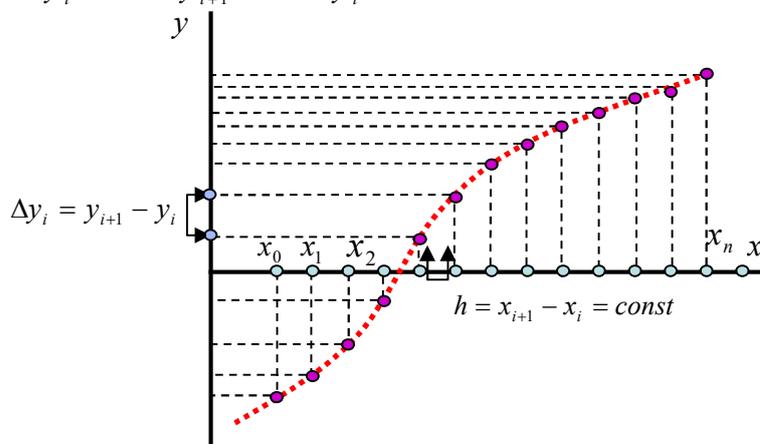


Рис.2 Графическое представление конечных разностей и узлов табличной функции.

Можно выразить конечную разность любого порядка непосредственно через значения табличной функции. Например, для второй конечной разности

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = (y_{i+2} - y_{i+1}) - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i \quad (2.3)$$

Аналогично можно получить выражения для других конечных разностей.

Конечная разность произвольного порядка определяется как

$$\Delta^k y_i = \sum_{j=0}^k (-1)^j C_k^j y_{k+i-j} \quad (2.4)$$

где C_k^j коэффициенты бинома Ньютона.

Аргумент	Функция	1-я к.раз	2-я к.раз	3-я к.раз	4-я к.раз	5-я к.раз
x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$	$\Delta^5 y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_1$	$\Delta^4 y_1$	
x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$	$\Delta^3 y_2$		
x_3	y_3	Δy_3	$\Delta^2 y_3$			
x_4	y_4	Δy_4				
x_5	y_5					

Из таблицы видно, что разность более высокого порядка строится на основе разностей предшествующего порядка. Следует обратить внимание на индексацию разностей. Нижний индекс означает, к какому узлу таблицы принадлежит данная разность. Верхний индекс ($\Delta^i y_j$) означает порядок конечной разности (а не возведение в степень i). Для таблицы, содержащей n узлов можно построить конечные разности до $(n-1)$ порядка включительно.

Горизонтальная таблица разностей используется при построении интерполяционного полинома Ньютона (первая и вторая интерполяционные формулы Ньютона).

Первая интерполяционная формула Ньютона.

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots \quad (2.5)$$

где x_i - координаты узлов табличной функции, а a_i - коэффициенты, значения которых определяются значениями табличной функции в соответствующих узлах. В зависимости от количества членов полинома получаем различные приближения интерполирующей функции к табличной функции. Так первые два члена представляют линейную интерполяцию между двумя узлами (x_0, x_1), первые три члена – квадратичную интерполяцию, первые четыре члена – кубическую интерполяцию, и т.д. Если функция задана в $(n+1)$ узле, то можно построить полином n -ой степени.

Рассмотрим процесс вычисления коэффициентов a_i . Полагая в (2.5) $x = x_0$, получаем $P_n(x_0) = y_0 = a_0$, т.е. $a_0 = y_0$.

Для определения a_1 вычислим конечную разность полинома в точках x и $x+h$

$$\begin{aligned} P_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots \\ P_n(x+h) &= a_0 + a_1(x+h - x_0) + a_2(x+h - x_0)(x+h - x_1) + \dots \end{aligned} \quad (2.6)$$

Полагая в (2.6) $x = x_0$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta P(x_0) &= P_n(x+h) - P_n(x) \Rightarrow \Delta P(x_0) = a_1 * h, \\ \Delta P(x_0) &= \Delta y_0 \Rightarrow a_1 = \Delta y_0 / (1! * h) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Последовательно, продолжая этот процесс, получим

$$a_i = \Delta^i y_{n-1} / (i! * h^i) \quad (2.8)$$

Следует отметить, что для i -го узла в формулах (2.6 – 2.7) нужно произвести замену индексов при переменных x_0, x_1, x_2 и т.д. на x_i, x_{i+1}, x_{i+2} и т.д.

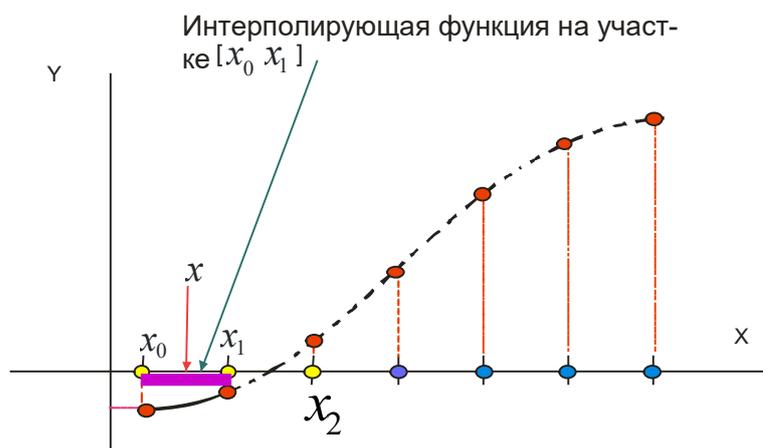


Рис. 3. Выбор узлов для квадратичной интерполяции на участке $[x_0, x_1]$.

Первой интерполяционной формуле Ньютона соответствуют конечные разности, расположенные в горизонтальных рядах Таблицы 1. В таком подходе при наличии таблиц, содержащих n узлов, возможно построение конечных разностей до $(n - 1)$ степени. При построении полинома m -ой степени ($m < n$) допустима интерполяция до $(n - m)$ -го узла включительно, так как для последующих интервалов таблицы будет не хватать конечных разностей соответствующих степеней. Интерполирующая функция как бы «прижимается» к левой границе табличной функции. Для построения интерполирующей функции на правой границе табличной функции используется вторая интерполяционная формула Ньютона.

Вторая интерполяционная формула Ньютона

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_n) + a_2(x - x_n)(x - x_{n-1}) + a_3(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots \quad (2.9)$$

Коэффициенты полинома определяются по такому же алгоритму как и для первой интерполяционной формулы Ньютона.

Полагая в (2.9) $x = x_n$, получаем $P_n(x_n) = y_n = a_0$, т.е. $a_0 = y_n$.

Для определения a_1 вычислим конечную разность полинома в точках x и $x - h$

$$\begin{aligned} P_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_n) + a_2(x - x_n)(x - x_{n-1}) + a_3(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots \\ P_n(x + h) &= a_0 + a_1(x + h - x_n) + a_2(x + h - x_n)(x + h - x_{n-1}) + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

Полагая в (2.10) $x = x_{n-1}$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta P(x_{n-1}) &= P_n(x - h) - P_n(x) \Rightarrow \Delta P(x_{n-1}) = a_1 * h, \\ \Delta P(x_{n-1}) &= \Delta y_{n-1} \Rightarrow a_1 = \Delta y_{n-1} / (1! * h) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Последовательно, продолжая этот процесс, получим

$$a_i = \Delta^i y_{n-i} / (i! * h^i) \quad (1.12)$$

Следует отметить, что для i -го узла в формулах (2.9 – 2.10) нужно произвести замену индексов при переменных x_n, x_{n-1}, x_{n-2} и т.д. на x_i, x_{i-1}, x_{i-2} и т.д.

Второй интерполяционной формуле Ньютона соответствуют конечные разности, расположенные в нижней диагонали Таблицы 1. При построении полинома m -ой степени ($m < n$) допустима интерполяция до $(m + 1)$ -го узла включительно, так как для последующих интервалов таблицы будет не хватать конечных разностей соответствующих степеней. Интерполирующая функция как бы «прижимается» к правой границе табличной функции.

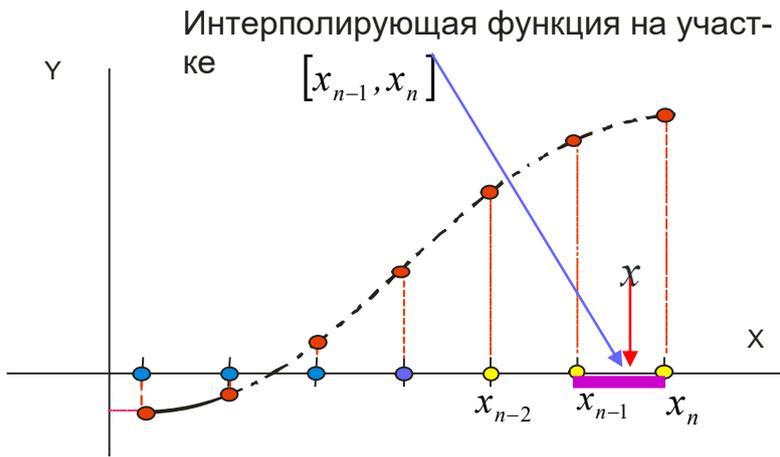


Рис.4. Выбор узлов для квадратичной интерполяции на участке $[x_n, x_{n-1}]$.

Для практических применений интерполяционные формулы Ньютона используют в несколько преобразованном виде. Введем переменную q (первая формула Ньютона)

$$q = \frac{x - x_0}{h} \text{ - число шагов, необходимых для достижения точки } x, \text{ исходя из базовой}$$

точки x_0 в выражении (2.6), т.е. то же самое, что $x = x_0 + q * h$, определяющее положение

узловых точек записанных в данной формуле. Тогда

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)(q-2)\dots(q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0 \quad (2.13)$$

Для второй формулы Ньютона

$$q = \frac{x - x_n}{h} \text{ - число шагов, необходимых для достижения точки } x, \text{ исходя из базовой}$$

точки x_n .

$$P_n(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 y_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1)(q+2)\dots(q+n-1)}{n!} \Delta^n y_0 \quad (2.14)$$

Пример 1. Рассмотрим тестовую функцию $y = e^x$. Составим таблицу с шагом $h = 0,05$

Таблица 3. Тестовая функция $y = e^x$.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
3,5	33,11545	1,697866	0,087051	0,004463
3,55	34,81332	1,784917	0,091515	0,004692
3,6	36,59823	1,876432	0,096207	
3,65	38,47467	1,972638		
3,7	40,4473			

Как видно из Таблицы 3 разности третьего порядка практически постоянны, поэтому для интерполяции можно ограничиться полиномом третьей степени ($n = 3$). Полагая $x_0 = 3.5$

и $y_0 = 33,11545$ получим $q = \frac{x - 3.5}{0.05} = 20(x - 3.5)$. Значение функции в точке $x = 3.525$

равно 33,95377, а полинома - 33,95344.

При построении интерполяционных формул Ньютона использовались значения функции, лежащие по одну сторону от выбранного начального значения, т.е. эти формулы носят односторонний характер. В соответствии с выбранным направлением используются

также определения – *интерполирование вперёд* и *интерполирование назад*. Во многих случаях оказываются полезными интерполирующие функции, использующие как последующие, так и предшествующие значения функции по отношению к её начальному значению. Поэтому значения табличной функции, приведённые в Таблице 1, можно представить в виде диагональной таблицы (Таблица 2.), которая отличается от Таблицы 1 только индексами элементов таблицы, сохраняя их численные значения.

Диагональная таблица разностей используется при построении интерполяционного полинома Гаусса (первая и вторая интерполяционные формулы Гаусса).

Для расчетов используются значения функции и конечных разностей, которые расположены в горизонтальной строке диагональной таблицы. Например, в приведённой Таблице 2 этому положению соответствует строка с нулевым индексом. Если в расчётах ограничиться кубическим полиномом (конечные разности до третьего порядка), то этому условию соответствуют строки с индексами от (-2) до (+2).

Первая интерполяционная формула Гаусса.

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_{n-1}) \quad (2.15)$$

В этой записи x_i - узлы табличной функции, x - текущее значение аргумента функции, a_i - коэффициенты полинома, определяемые через значения табличной функции и её конечных разностей в соответствующих узлах.

Таблица 3. Табличная функция и конечные разности. Диагональная таблица.

Аргумент	Функция	1-я к.раз	2-я к.раз	3-я к.раз	4-я к.раз	5-я к.раз
x	y	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$	$\Delta^5 y_0$
x_{-4}	y_{-4}					
		Δy_{-4}				
x_{-3}	y_{-3}		$\Delta^2 y_{-4}$			
		Δy_{-3}		$\Delta^3 y_{-4}$		
x_{-2}	y_{-2}		$\Delta^2 y_{-3}$		$\Delta^4 y_{-4}$	
		Δy_{-2}		$\Delta^3 y_{-3}$		$\Delta^5 y_{-4}$
x_{-1}	y_{-1}		$\Delta^2 y_{-2}$		$\Delta^4 y_{-3}$	
		Δy_{-1}		$\Delta^3 y_{-2}$		$\Delta^5 y_{-3}$
x_0	y_0		$\Delta^2 y_{-1}$		$\Delta^4 y_{-2}$	
		Δy_0		$\Delta^3 y_{-1}$		$\Delta^5 y_{-2}$
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$		$\Delta^4 y_{-1}$	
		Δy_1		$\Delta^3 y_0$		$\Delta^5 y_{-1}$
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$		$\Delta^4 y_0$	
		Δy_2		$\Delta^3 y_1$		
x_3	y_3		$\Delta^2 y_2$			
		Δy_3				
x_4	y_4					

По той же методике, что и для полиномов Ньютона можно выразить значения коэффициентов a_i через значения табличной функции и её конечных элементов в соответствующих узлах таблицы.

Первая интерполяционная формула Гаусса (в Таблице 3 ей соответствует нижний ряд стрелок) содержит центральные разности

$$\Delta y_0, \Delta y_{-1}^2, \Delta y_{-1}^3, \Delta y_{-2}^4, \Delta y_{-2}^5, \Delta y_{-3}^6.$$

Коэффициенты полинома:

$$a_0 = y_0, \quad a_1 = \frac{\Delta y_0}{1! h}, \quad a_2 = \frac{\Delta y_{-1}^2}{2! h^2}, \quad a_3 = \frac{\Delta y_{-1}^3}{3! h^3}, \quad a_4 = \frac{\Delta y_{-2}^4}{4! h^4}, \dots \quad (2.16)$$

$$a_{2n-1} = \frac{\Delta y_{-(n-1)}^{2n-1}}{(2n-1)! h^{2n-1}}, \quad a_{2n} = \frac{\Delta y_{-n}^{2n}}{(2n)! h^{2n}}$$

Вторая интерполяционная формула Гаусса.

Вторая интерполяционная формула Гаусса (в Таблице 3 ей соответствует верхний ряд стрелок)

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_{-1})(x - x_0) + a_3(x - x_{-1})(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_{-2})(x - x_{-1})(x - x_0)(x - x_1) + \dots \quad (2.17)$$

содержит центральные разности

$$\Delta y_{-1}, \Delta y_{-1}^2, \Delta y_{-2}^3, \Delta y_{-2}^4, \Delta y_{-3}^5, \Delta y_{-3}^6.$$

Коэффициенты полинома:

$$a_0 = y_0, \quad a_1 = \frac{\Delta y_{-1}}{1! h}, \quad a_2 = \frac{\Delta y_{-1}^2}{2! h^2}, \quad a_3 = \frac{\Delta y_{-2}^3}{3! h^3}, \quad a_4 = \frac{\Delta y_{-2}^4}{4! h^4}, \dots \quad (2.18)$$

$$a_{2n-1} = \frac{\Delta y_{-n}^{2n-1}}{(2n-1)! h^{2n-1}}, \quad a_{2n} = \frac{\Delta y_{-n}^{2n}}{(2n)! h^{2n}}$$

Произведя замену переменных (как и для формул Ньютона) $q = \frac{x - x_0}{h}$

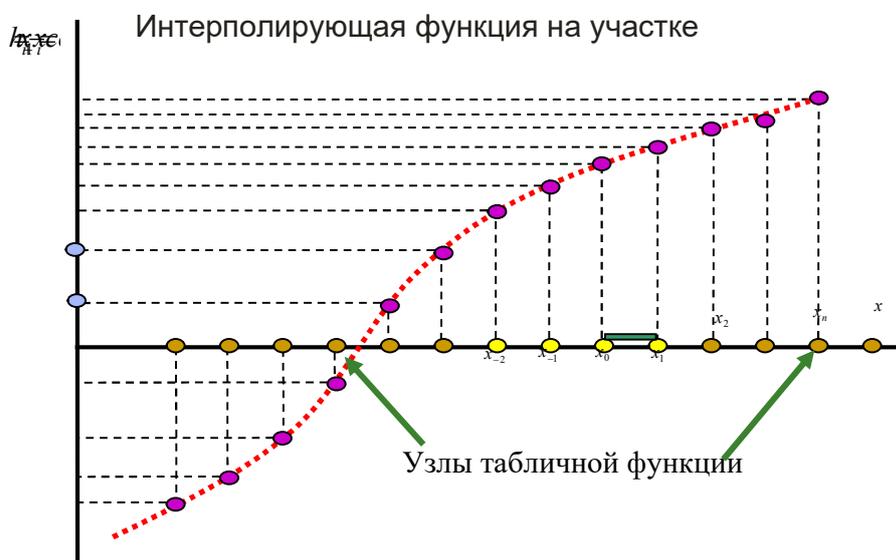
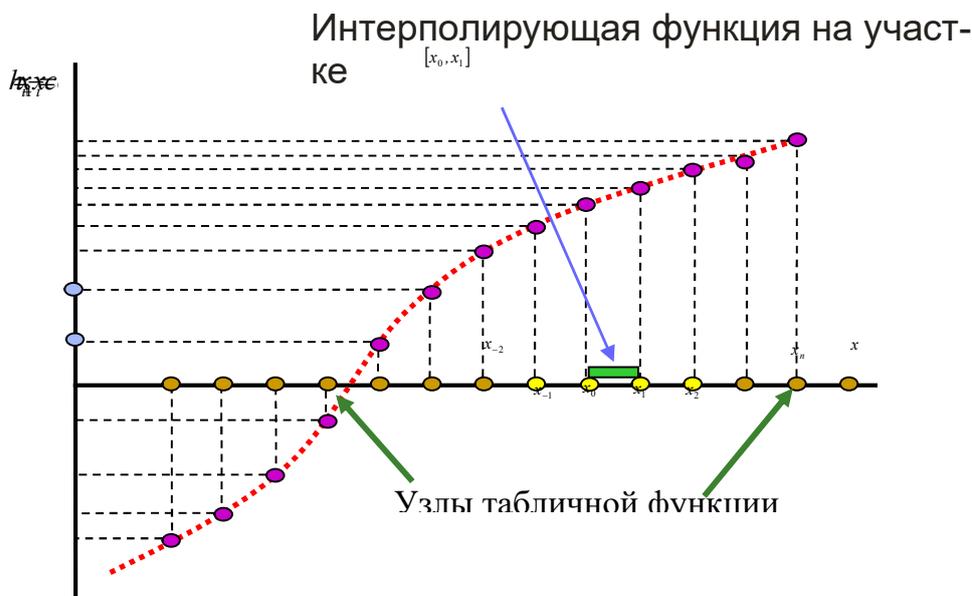
Можно записать интерполяционные формулы Гаусса в компактном виде.

Первая интерполяционная формула Гаусса

$$P(x) = y_0 + q \Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{(q+1)q(q-1)}{3!} \Delta^3 y_{-1} + \frac{(q+1)q(q-1)(q-2)}{4!} \Delta^4 y_{-2} + \dots + \frac{(q+n-1) \dots (q-n+1)}{(2n-1)!} \Delta^{2n-1} y_{-(n-1)} + \frac{(q+n-1) \dots (q-n)}{(2n)!} \Delta^{2n} y_{-n} \quad (2.19)$$

Вторая интерполяционная формула Гаусса

$$P(x) = y_0 + q \Delta y_{-1} + \frac{(q+1)q}{2!} \Delta^2 y_{-1} + \frac{(q+1)q(q-1)}{3!} \Delta^3 y_{-2} + \frac{(q+2)(q+1)q(q-1)}{3!} \Delta^4 y_{-2} + \dots + \frac{(q+n-1) \dots (q-n+1)}{(2n-1)!} \Delta^{2n-1} y_{-n} + \frac{(q+n)(q+n-1) \dots (q-n+1)}{(2n)!} \Delta^{2n} y_{-n} \quad (2.20)$$



Интерполяционная формула Стирлинга.

Интерполяционная формула Стирлинга является полусуммой первой и второй формул Гаусса

Интерполяционная формула Бесселя

Интерполяционная формула Бесселя является полусуммой второй формулы Гаусса и такой же формулы, но с нижними индексами, увеличенными на единицу (т.е. с базовой точкой x_1 вместо базовой точки x_0).

Рекомендации к использованию интерполяционных формул. (Д-524)

1. При $|q| \leq 0.25$ целесообразно использовать формулу Стирлинга.
2. При $0.25 \leq q \leq 0.75$ целесообразно использовать формулу Бесселя.
3. Интерполяционные формулы Ньютона выгодно применять, если интерполирование производится в начале или в конце таблицы и не хватает нужных центральных разностей.

Сравним значения, полученные с помощью формул Ньютона, Гаусса и Стирлинга, с тестовой функцией $y = e^x$ при различных значениях шага таблиц и количества членов полиномов.

Таблица 4. Базовая точка $x_0 = 3.5$, шаг $h = 0.05$, $e^{3.5} = 33,9537736$

1-я Ньютон	1-я Гаусс	2-я Гаусс	Стирлинг	число эл-тов
33,96438	33,96438	33,92298	33,94368	2
33,9535	33,95403	33,95403	33,95403	3
33,95378	33,95377	33,95378	33,95378	4
33,95377	33,95377	33,95377	33,95377	5
33,95377	33,95377	33,95377	33,95377	6

Таблица 5. Базовая точка $x_0 = 3.5$, шаг $h = 0.1$, $e^{3.5} = 33,9537736$

1-я Ньютон	1-я Гаусс	2-я Гаусс	Стирлинг	число эл-тов
33,98615	33,98615	33,90329	33,94472	2
33,95181	33,95508	33,95508	33,95508	3
33,95391	33,95371	33,95384	33,95378	4
33,95376	33,95377	33,9537	33,95373	5
33,95371	33,95377	33,9537	33,95374	6

Таблица 6. Базовая точка $x_0 = 3.5$, шаг $h = 0.25$, $e^{3.5} = 33,9537736$

1-я Ньютон	1-я Гаусс	2-я Гаусс	Стирлинг	число эл-тов
34,05601	34,05601	33,84796	33,95199	2
33,9358	33,96239	33,96239	33,96239	3
33,95742	33,95264	33,9548	33,95372	4
33,95297	33,95367	33,95253	33,9531	5
33,94814	33,95379	33,95263	33,95321	6

Из приведённых таблиц следует, что, естественно, уменьшая шаг таблиц и увеличивая число членов полиномов, можно получить наилучшее приближение к значениям тестовой функции. Сравнение четырёх интерполяционных формул показало большую эффективность формулы Стирлинга.

Интерполяция табличной функции с неравноотстоящими узлами Интерполяционная формула Лагранжа

Для интерполирования табличной функции с неравноотстоящими узлами используется формула Лагранжа.

На отрезке $[a, b]$ даны $(n + 1)$ различных значений аргумента - $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ и известны значения функции $f(x)$ в этих узлах - $y_i = f(x_i)$. Нужно построить полином $L_n(x)$ степени не выше n , такой, что $L_n(x_i) = y_i$ для $i = 0, 1, 2, \dots, n$

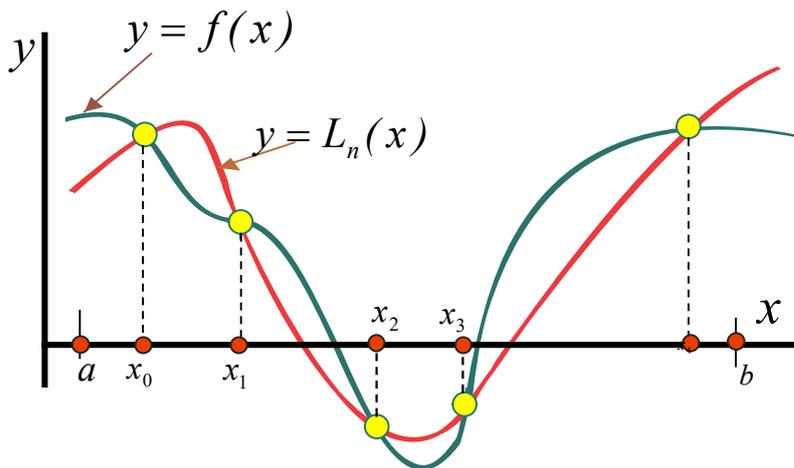


Рис. 7. Табличная функция и полином Лагранжа.

Для построения такого полинома сначала нужно решить частную задачу - построить полином $p_i(x)$, такой, что

$p_i(x_j) = 0$ при $j \neq i$ и $p_i(x_i) = 1$, т.е.

$$p_i(x_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (2.21)$$

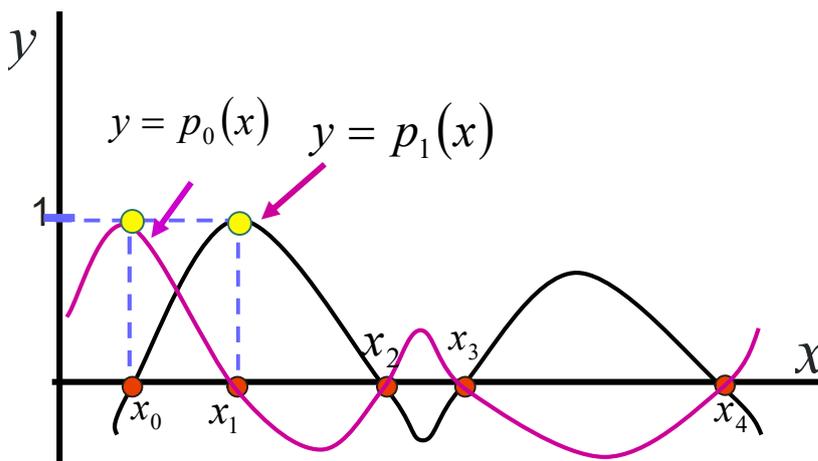


Рис. 8. Вспомогательные полиномы.

Так как интерполяционный полином обращается в нуль в n узлах, то он может быть записан как

$$p_i(x) = C_i (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n) \quad (2.22)$$

где C_i - постоянный коэффициент.

Полагая в (2.22) $x = x_i$ и учитывая, что $p_i(x_i) = 1$, получаем

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)(x_i - x_2)(x_i - x_3) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \quad (2.23)$$

и, следовательно, полином (2.22) запишется как

$$p_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)(x_i - x_2) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \quad (2.24)$$

Чтобы выполнялось исходное требование $L_n(x_i) = y_i$, интерполяционный полином должен иметь вид

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)(x_i-x_2)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \quad (2.25)$$

Докажем единственность полинома Лагранжа от противного. Пусть существует другой полином $Q_n(x)$ степени не выше n , который решает задачу интерполяции $Q_n(x_i) = y_i$.

Построим новый многочлен

$$R_n(x) = L_n(x) - Q_n(x), \quad (2.26)$$

который имеет степень не выше n и во всех узлах $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ обращается в нуль, в силу равенства значений

$$Q_n(x_i) = L_n(x_i) = y_i. \quad (2.27)$$

Получается, что точки $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ являются корнями многочлена $R_n(x)$. Из основной теоремы алгебры многочленов $R_n(x)$ не может иметь более n корней. Полученное противоречие означает, что многочлены $Q_n(x_i)$ и $L_n(x_i)$ должны полностью совпадать, т.е. по заданным $(n+1)$ значениям функции можно построить единственный интерполяционный многочлен.

Следует отметить, что интерполяционный многочлен Лагранжа, в отличие от других интерполяционных функций, содержит в явном виде значения y_i , что при решении некоторых задач может оказаться важным фактором.

Оценка погрешности интерполяционных формул

При заданном наборе узлов интерполяции существует один и только один интерполяционный многочлен. Формулы Лагранжа, Ньютон, Гаусса и другие порождают один и тот же многочлен (при условии, вычисления производятся точно). Разница между ними лишь в алгоритме построения, а многочлен Лагранжа не содержит явных выражений для коэффициентов.

Исходя из принципа построения интерполяционного полинома, следует, что в точках узлов значения полинома и табличной функции полностью совпадают. В других же точках существует разница между полиномом $L_n(x)$ и функцией $f(x)$, которая определяется остаточным членом

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) \quad (2.28)$$

Пусть функция $f(x)$ во всей области $a \leq x \leq b$ имеет производные $f'(x), f''(x), f'''(x), \dots, f^{(n+1)}(x)$ до $(n+1)$ порядка включительно. Введём вспомогательную функцию

$$u(x) = f(x) - L_n(x) - k \prod_{n+1}(x), \quad (2.29)$$

где $\prod_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$ и

k - постоянный коэффициент.

Функция $u(x)$ имеет $(n+1)$ корень в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$.

Выберем коэффициент k таким образом, чтобы функция $u(x)$ имели $(n+2)$ -й корень в любой, но фиксированной, точке \bar{x} отрезка $[a, b]$ не совпадающей с узловыми точками. Для этого нужно положить

$$f(\bar{x}) - L_n(\bar{x}) - k \prod_{n+1}(\bar{x}) = 0 \quad (2.30)$$

Отсюда, так как $k \prod_{n+1}(\bar{x}) \neq 0$, следует

$$k = \frac{f(\bar{x}) - L_n(\bar{x})}{\prod_{n+1}(\bar{x})} \quad (2.31)$$

При таком выборе коэффициента k функция $u(x)$ будет иметь $(n+2)$ корня на отрезке $[a, b]$ и обращаться в нуль на концах каждого отрезка

$$[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_i, \bar{x}], [\bar{x}, x_{i+1}], \dots, [x_{n-1}, x_n]$$

Применяя теорему Ролля к каждому из этих отрезков, можно сделать вывод, что производная $u'(x)$ имеет не менее $(n+1)$ корня на отрезке $[a, b]$.

[Теорема Ролля: Производная $f'(x)$ действительного многочлена $f(x)$ имеет нечётное число действительных корней между двумя соседними действительными корнями многочлена $f(x)$.]

Вторая производная $u''(x)$ имеет не менее n корней на отрезке $[a, b]$. Продолжая эти рассуждения для производных более высоких порядков, можно сделать вывод, что производная $u^{(n+1)}(x)$ имеет хотя бы один нуль на отрезке $[a, b]$, т.е. $u^{(n+1)}(\xi) = 0$.

Так как $L_n^{(n+1)}(x) = 0$ и $\prod_{n+1}^{(n+1)}(x) = (n+1)!$, то из (*-*) имеем

$$u^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - k(n+1)! \quad (2.32)$$

И при $x = \xi$ получаем $0 = f^{(n+1)}(\xi) - k(n+1)!$, откуда следует

$$k = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (2.33)$$

Сравнивая правые части (2.31) и (2.33) получаем соотношение

$$\frac{f(\bar{x}) - L_n(\bar{x})}{\prod_{n+1}(\bar{x})} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (2.34)$$

и, следовательно,

$$f(\bar{x}) - L_n(\bar{x}) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(\bar{x}) \quad (2.35)$$

Т.к. \bar{x} произвольно, то можно записать (2.35) в виде

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x), \quad (2.36)$$

Где ξ зависит от x и лежит внутри отрезка $[a, b]$.

Введя обозначение $M_{n+1} = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$

Получаем оценку абсолютной погрешности интерполяционной формулы Лагранжа

$$|R_n(x)| = |f(x) - L_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x) \quad (2.37)$$

$$\prod_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

Используя замену $q = \frac{x - x_0}{h}$ можно (2.37) записать как

$$|R_n(x)| = |f(x) - L_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} q(q-1)(q-2) \dots (q-n) h^{n+1} \quad (2.38)$$

Из проведенной оценки абсолютной погрешности интерполяционной формулы Лагранжа можно для функции $f(x)$ с равноотстоящими узлами (первая интерполяционная формула Ньютона) записать

$$|R_n(x)| = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} q(q-1)(q-2) \dots (q-n) h^{n+1} \quad (2.39)$$

Где ξ - некоторое промежуточное значение между узлами интерполирования $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ и точкой x .

Интерполяционная формула Ньютона, как правило, обрывается на членах, содержащих такие разности, которые в пределах заданной точности можно считать постоянными. Полагая, что конечные разности $\Delta^{n+1}y$ почти постоянны для функции $f(x)$ и шаг h достаточно мал, и учитывая, что

$$f^{(n+1)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta^{n+1}y}{h^{n+1}} \quad (2.40)$$

можно положить

$$f^{(n+1)}(\xi) \approx \frac{\Delta^{n+1}y_0}{h^{n+1}} \quad (2.41)$$

И тогда остаточный член для первой интерполяционной формулы Ньютона

$$R_n(x) \approx \frac{\Delta^{n+1}y_0}{(n+1)!} q(q-1)(q-2)\dots(q-n)h^{n+1}. \quad (2.42)$$

При тех же условиях остаточный член для второй интерполяционной формулы Ньютона

$$R_n(x) \approx \frac{\Delta^{n+1}y_n}{(n+1)!} q(q+1)(q+2)\dots(q+n)h^{n+1} \quad (2.43)$$

Выбор способа интерполяции – локального или глобального - определяется особенностями решаемой задачи (точностью, быстродействием и др.). Повышение степени интерполяционного полинома (при локальной интерполяции) не всегда повышает точность интерполяции, т.к. не всегда ясно поведение производной $f^{(n+1)}(x)$ при увеличении n .

Разделенные разности.

На практике часто встречаются таблицы с неравноотстоящими узлами, т.е. таблицы с переменным шагом. Для этих таблиц понятие конечных разностей обобщается введением так называемых *разделённых разностей*.

Пусть функция $y = f(x)$ задана таблично и $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ значения аргумента, а $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ соответствующие значения функции, у которой разности

$$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i \neq 0 \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.44)$$

не равны между собой.

Отношения вида

$$[x_i, x_{i+1}] = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (2.45)$$

Называются *разделёнными разностями первого порядка*.

В литературе используются различные формы записи разделённых разностей –

$$y(x_i, x_{i+1}) = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad \text{или} \quad f(x_i, x_{i+1}) = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

По аналогии *разделёнными разностями второго порядка* запишутся как

$$[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{[x_{i+2}, x_{i+1}] - [x_{i+1}, x_i]}{x_{i+2} - x_i} \quad (2.46)$$

и, соответственно, в других формах

$$y(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{y(x_{i+1}, x_{i+2}) - y(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i} \quad \text{или} \quad f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}.$$

По аналогии строятся разделённые разности более высоких порядков.

Интерполяционная формула Ньютона для неравноотстоящих значений аргумента записывается как

$$P(x) = y_0 + [x_0, x_1](x - x_0) + [x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + [x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \quad (2.47)$$

Интерполяция сплайнами

В настоящее время широкое распространение получила интерполяция кубическими сплайн-функциями – специальным образом построенными многочленами третьей степени. Они представляют собой математическую модель очень гибкого тонкого упругого металлического стержня. Если этот стержень зафиксировать в двух узлах под заданными углами α и β , так, что стержень может свободно скользить в узлах закрепления, то стержень примет форму, соответствующую состоянию с минимальной потенциальной энергией.



Рис.9. Механическая модель сплайна

Пусть форма этого стержня описывается функцией $y = S(x)$. Из курса сопротивления материалов известно, что уравнение свободного равновесия имеет вид $S''''(x) = 0$, следовательно, между парой соседних узлов интерполяции функция $S(x)$ является многочленом степени не выше третьей.

$$S(x) = S_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (2.48)$$

На каждом отрезке $x_{i-1} \leq x \leq x_i$ имеется четыре неизвестных коэффициента a_i, b_i, c_i, d_i , следовательно, на всём интервале $[x_0, x_n]$ число неизвестных - $4n$. Для их определения необходимо построить систему $4n$ уравнений.

На каждом отдельном участке $[x_{i-1}, x_i]$ из условия прохождения графика функции $S(x)$ через заданные точки следует x_2 .

Эти условия можно записать в виде

$$\begin{aligned} S_i(x_{i-1}) &= a_{i-1} = y_{i-1} \\ S_i(x_i) &= a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i \\ h_i &= x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \end{aligned} \quad (2.49)$$

Эта система содержит $2n$ уравнений.

Свободное равновесие обеспечиваются условиями непрерывности первых и вторых производных во внутренних узлах интерполяции, т.е. условиями гладкости второго порядка кривой во всех внутренних точках –

$$S'_i(x_i) = S'_{i+1}(x_i), \quad S''_i(x_i) = S''_{i+1}(x_i), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad (2.50)$$

Вычисляя эти производные из многочлена (2.48)

$$\begin{aligned} S'_i(x) &= b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2, \\ S''_i(x) &= 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1}) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Подставляя эти выражения в (2.50) получаем $(2n - 2)$ уравнений

$$\begin{aligned} b_{i+1} &= b_i + 2h_i c_i + 3h_i^2 d_i \\ c_{i+1} &= c_i + 3h_i d_i \\ i &= 1, 2, 3, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Оставшиеся необходимые два уравнения получаются из условий закрепления концов сплайна, в которые входят значения первой и второй производной функции $S(x)$ в точках x_0 и x_n . Из (2.51) следует $S'_i(x_{i-1}) = b_i$, $S''_i(x_{i-1}) = 2c_i$, и, следовательно, в точке x_0 имеем $S'_1(x_0) = b_1$, $S''_1(x_0) = 2c_1$, т.е. значения производных в точке x_0 присутствуют в системе. Значения производных в точке x_n отсутствуют в системе, поэтому они вводятся с помощью дополнительных переменных b_{n+1} и c_{n+1} , т.е.

$$S'(x_n) = b_{n+1}, \quad S''(x_n) = 2c_{n+1} \quad (2.53)$$

Из условия непрерывности производных в точке x_n следует, что

$$\begin{aligned} b_{n+1} &= b_n + 2h_n c_n + 3h_n^2 d_n \\ c_{n+1} &= c_n + 3h_n d_n \end{aligned} \quad (2.54)$$

С учётом этих дополнений (2.52) можно рассматривать для всего диапазона индексов $i = 1, 2, 3, \dots, n$

Построенная таким образом система содержит $4n + 2$ неизвестных и $4n$ уравнений. Эту систему можно дополнить одним из двух условий закрепления концов сплайна:

$$S'(x_0) = b_1 = k_1, \quad S''(x_n) = b_{n+1} = k_2 \quad (2.55)$$

или

$$S''(x_0) = 2c_1 = m_1, \quad S''(x_n) = 2c_{n+1} = m_2, \quad (2.56)$$

где k_1, k_2, m_1, m_2 - заданные числа.

Например, из рис. ** видно, что при заданных углах наклона α и β

$$k_1 = \operatorname{tg} \alpha, \quad k_2 = \operatorname{tg} \beta \quad (2.57)$$

При свободном закреплении концов сплайна, можно приравнять нулю кривизну линии в точках закрепления (т.е. вторые производные равны нулю). Полученная таким образом функция называется *свободным кубическим сплайном*.

$$m_1 = m_2 = 0$$

С учётом (2.55) или (2.56) получаем систему $4n + 2$ уравнений для определения коэффициентов

$$\begin{array}{ll} a_i, d_i & i = 1, 2, \dots, n \quad - 2n \text{ уравнений,} \\ b_i, c_i & i = 1, 2, \dots, n + 1 \quad - 2n + 2 \text{ уравнений.} \end{array}$$

Построенную систему $4n + 2$ уравнений можно решать различными способами

Полученную систему линейных алгебраических уравнений можно существенно упростить, используя условия сшивки функции $S(x)$ на границах отдельных участков (в узлах $i = 1, 2, \dots, n$) по значениям функции и её первой и второй производным.

$$a_i = y_{n-1}$$

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i} \quad (2.58)$$

$$b_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} + 2c_i)$$

В окончательном виде получаем систему уравнений относительно коэффициентов c_i

$$\begin{aligned}
\frac{2}{3}h_1 * c_1 + \frac{1}{3}h_1 * c_2 &= \frac{y_1 - y_0}{h_1} - k_1 \\
h_1 * c_1 + 2(h_1 + h_2) * c_2 + h_2 * c_3 &= 3 \left(\frac{y_2 - y_1}{h_2} - \frac{y_1 - y_0}{h_1} \right) \\
h_2 * c_2 + 2(h_2 + h_3) * c_3 + h_3 * c_4 &= 3 \left(\frac{y_3 - y_2}{h_3} - \frac{y_2 - y_1}{h_2} \right) \\
\dots\dots\dots \\
h_{n-1} * c_{n-1} + 2(h_{n-1} + h_n) * c_n + h_n * c_{n+1} &= 3 \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} - \frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-1}} \right) \\
\frac{1}{3}h_n * c_n + \frac{2}{3}h_n * c_{n+1} &= k_2 - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n}
\end{aligned}
\tag{2.59}$$

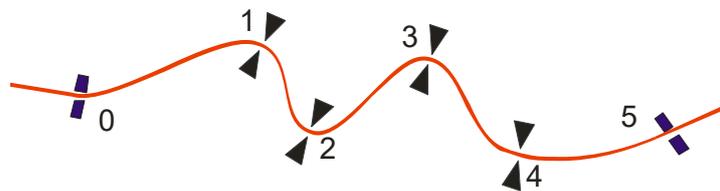


Рис.10. Механическая модель сплайна ($n = 5$).

В матричном виде система сводится к трёхдиагональной матрице и решается методом прогонки (подробнее рассматривается в разделе решения систем линейных алгебраических уравнений). Например, для случая $n = 5$ система будет иметь вид -

$$\begin{bmatrix}
\frac{2}{3}h_1 & \frac{1}{3}h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & 0 & 0 \\
0 & 0 & h_3 & 2(h_3 + h_4) & h_4 & 0 \\
0 & 0 & 0 & h_4 & 2(h_4 + h_5) & h_5 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3}h_5 & \frac{2}{3}h_5
\end{bmatrix}
\times
\begin{bmatrix}
c_1 \\
c_2 \\
c_3 \\
c_4 \\
c_5 \\
c_6
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\frac{y_1 - y_0}{h_1} - k_1 \\
3 * \left(\frac{y_2 - y_1}{h_2} - \frac{y_1 - y_0}{h_1} \right) \\
3 * \left(\frac{y_3 - y_2}{h_3} - \frac{y_2 - y_1}{h_2} \right) \\
3 * \left(\frac{y_4 - y_3}{h_4} - \frac{y_3 - y_2}{h_3} \right) \\
3 * \left(\frac{y_5 - y_4}{h_5} - \frac{y_4 - y_3}{h_4} \right) \\
k_2 - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n}
\end{bmatrix}$$

(2.60)

Продолжая эту систему, можно записать матрицу для кубического сплайна произвольной степени.

Приближение функций. Аппроксимация.

Решение нелинейных алгебраических уравнений.

Уравнения с одним неизвестным.

Задача нахождения корней нелинейных уравнений вида

$$f(x) = 0 \quad (3.1)$$

часто встречается при решении различных физических задач. Нелинейные уравнения можно разделить на два класса:

1. Алгебраические – содержат только алгебраические функции (например, полиномы).
2. Трансцендентные – содержат тригонометрические, показательные, логарифмические и др.

Методы решения нелинейных уравнений делятся на *прямые* и *итерационные*. Прямые методы позволяют записать решение в виде некоторого конечного соотношения (формулы).

Итерационные методы предполагают два этапа решения – отыскание приближённого значения корня (начального приближения) и уточнение приближённого значения корня до некоторой степени точности.

Начальное приближение может быть найдено либо из физических соображений, либо из решения аналогичной задачи при других исходных данных, либо с помощью графических методов. Наиболее общий подход к заданию начального приближения состоит в следующем – определяются две достаточно близко расположенные друг к другу точки a и b , в которых функция $f(x)$ меняет свой знак, т.е. $f(a)f(b) < 0$. В этом случае можно полагать что между точками a и b имеется хотя бы одна точка \bar{x} , в которой $f(\bar{x}) = 0$. За начальное приближение можно принять середину отрезка $x_0 = (a+b)/2$. Итерационный процесс состоит в построении последовательности приближённых значений корня $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, которая сходится к истинному значению корня

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \bar{x}$$

Общая постановка задачи:

Функция $f(x)$ определена и непрерывна на некотором конечном или бесконечном отрезке $a < x < b$ и удовлетворяет уравнению (3.1). В некоторых алгоритмах поиска корня необходимы дополнительные условия – существования и непрерывности первой производной $f'(x)$ или даже второй производной $f''(x)$. Всякое значение ξ , обращающее $f(x)$ в нуль, (т.е. $f(\xi) = 0$) является корнем уравнения или нулём функции $f(x)$.

Полагаем, что уравнение (3.1) имеет только изолированные корни, т.е. для каждого корня уравнения (3.1) существует некоторая окрестность, не содержащая других корней этого уравнения. Нахождение изолированных корней состоит из двух этапов:

1. Отделение корней – выделение некоторых интервалов $[\alpha_i, \beta_i]$, в которых содержится один и только один корень уравнения (3.1).
2. Уточнения приближенных значений корней методом последовательных приближений до необходимой степени точности.

Если непрерывная функция $f(x)$ принимает значения разных знаков на конце интервала $[\alpha_i, \beta_i]$ и существует первая производная $f'(x)$, которая сохраняет свой знак ($f'(x) < 0$ или $f'(x) > 0$), то на этом интервале (рис.3.1) существует только один корень ξ и $f(\xi) = 0$.

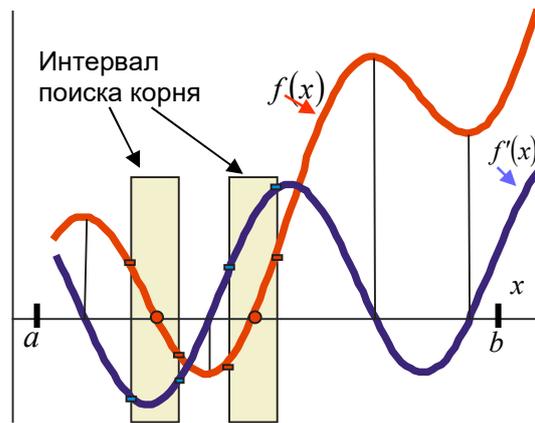


Рис.3.1. Локализация корней функции $f(x)$.

Отделение корней осуществляется путём разбиения интервала $a < x < b$ на участки с шагом $h = \frac{(b-a)}{n}$, на которых оценивается произведение $f(x_i) \times f(x_{i+1})$ и анализируется знак первой производной на концах интервала $[x_i, x_{i+1}]$. Полезно помнить, что алгебраическое уравнение n -ой степени имеет не более n действительных корней. Поэтому, если в процессе поиска корней получена $n+1$ перемена знаков, то все корни отделены. При выборе шага h можно пользоваться принципом половинного деления интервала $[a, b]$, т.е. $h \rightarrow \frac{(b-a)}{2}, \frac{(b-a)}{4}, \frac{(b-a)}{8} \dots$ и т.д.

Для поиска корня в выделенном интервале $[\alpha_i, \beta_i]$ (в дальнейшем рассмотрении выделенный интервал $[\alpha_i, \beta_i]$ будем записывать как $[a, b]$) используются следующие алгоритмы:

1. Деление отрезка пополам,
2. Метод хорд,
3. Метод касательных,
4. Метод секущих.
5. Метод комбинированный.

Деление отрезка пополам.

Функция $f(x)$ задана на отрезке $[a, b]$ и имеет только один корень ξ . Сначала проверяется условие – если $f((a+b)/2) = 0$, то поиск завершён, иначе организуется итерационный процесс, на каждой итерации которого интервал поиска корня функции уменьшается вдвое. Критерием выбора той или иной половины рассматриваемого интервала для дальнейшего поиска является условие, что непрерывная функция $f(x)$ принимает значения разных знаков на концах подынтервалов либо $[a, a + (a+b)/2]$, либо $[a + (a+b)/2, b]$.

Алгоритм решения:

Полагая, что $b > a$ и ζ и δ - малые значения.

Шаг 1: Вычисляем значения функции $f(x)$ на концах интервала - $f(a), f(b)$. Проверяем условие наличия корня на интервале $[a, b]$ - если корень существует, то переходим к шагу 2, иначе – выход.

Шаг 2: Определяем середину интервала $x_{cp} = (a+b)/2$ и вычисляем в этой точке значение функции $f(x_{cp})$. Если $f(x_{cp}) \neq 0$, то переходим к шагу 3, иначе – выход.

Шаг 3: Вычисляем произведение – $f(a)f(x_{cp})$

Если $f(a)f(x_{cp}) < 0$, то присваиваем $b = x_{cp}$, иначе присваиваем $a = x_{cp}$ и $f(a) = f(x_{cp})$

Шаг 4: Признак завершения счета. Если $abs(b - a) < \delta$, то перейти к шагу 5, иначе перейти к шагу 2.

Шаг 5: Вычисляем $\xi = (a + b)/2$ и $f(\xi)$. Проверяем - если $f(\xi) < \zeta$, вычисления закончены, иначе уменьшаем значение δ и переходим к шагу 2.

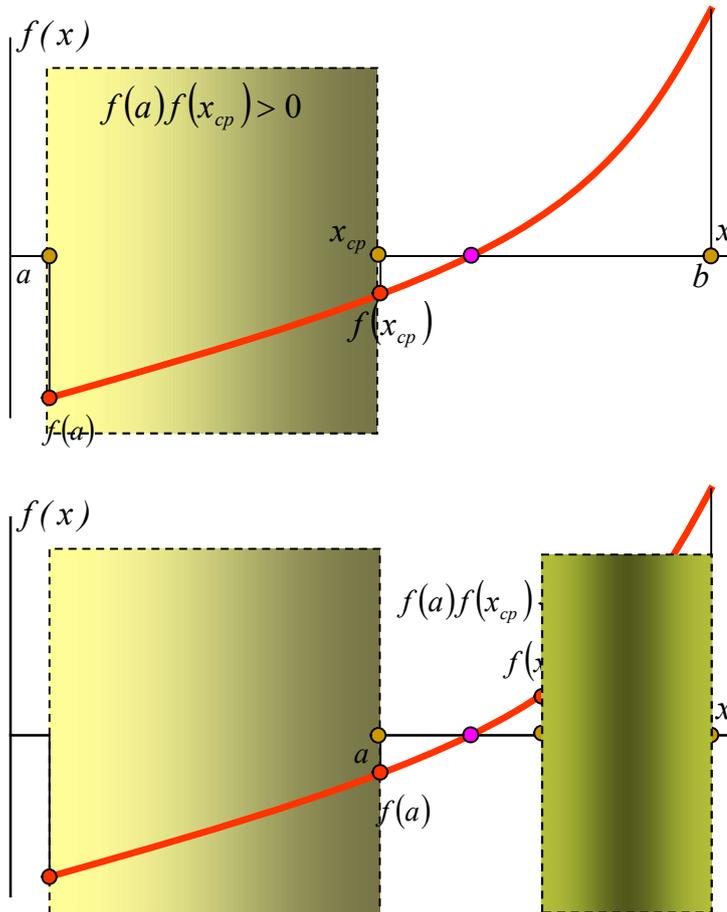


Рис. 3.2. Алгоритм «Деление отрезка пополам». Затенённые области исключаются из последующих итераций, границы поиска либо a , либо b перемещаются на место x_{cp} в зависимости от знака произведения $f(a)f(x_{cp})$.

Метод хорд.

Более быстрый способ нахождения корня ξ уравнения $f(x) = 0$ на отрезке $[a, b]$ заключается в замене криволинейной функции $f(x)$ прямолинейным отрезком $A - B$ - хордой, соединяющей точки $A[a, f(a)]$ и $B[b, f(b)]$ (Рис.3.3). Уравнение прямой, проходящей через две точки $A[a, f(a)]$ и $B[b, f(b)]$ записывается как

$$\frac{x - a}{b - a} = \frac{f(x) - f(a)}{f(b) - f(a)} \quad (3.2)$$

Для доказательства сходимости процесса поиска корня, считаем, что он отделён и вторая производная $f''(x) > 0$ сохраняет знак на отрезке $[a, b]$. Кривая функции $f(x)$ выпукла вниз и, следовательно расположена ниже своей хорды $A - B$ (Рис. 3.4).

Отсюда, полагая $f(x) = 0$, получаем первое приближение корня

$$x_0 = a - \frac{f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a) \quad (3.3)$$

Затем вычисляем значение функции $f(x)$ в точке x_0 - $f(x_0)$ и определяем точку $A_1[x_0, f(x_0)]$. Через точки $A_1[x_0, f(x_0)]$ и $B[b, f(b)]$ проводим новую хорду $A_1 - B$. Получаем второе приближение корня

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f(b) - f(x_0)}(b - x_0) \quad (3.4)$$

Далее повторяется процесс построения новых хорд и определения последующих приближений значений корня. Обобщая (3.4) можно записать

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f(b) - f(x_i)}(b - x_i) \quad (3.5)$$

Таким образом, строится монотонно возрастающая последовательность

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

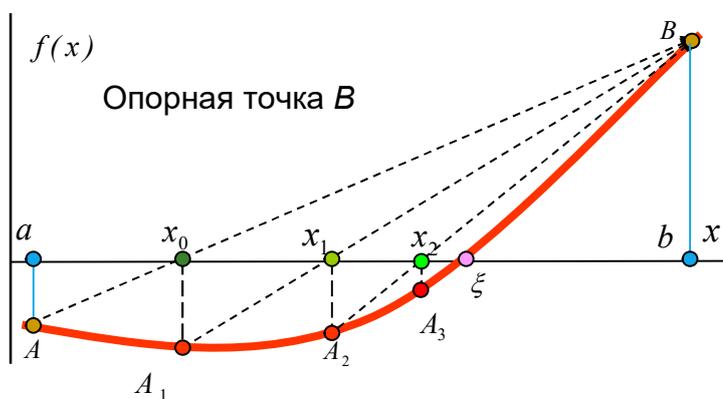


Рис.3.4. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод хорд. Опорная точка B .

Рассмотрим предшествующий случай, в качестве опорной точки выберем точку A .

Как видно из рис.3.5, уже построение второй хорды $A - A_1$ даёт приближённое значение корня уравнения $f(x) = 0$ вне интервала определения $[a, b]$.

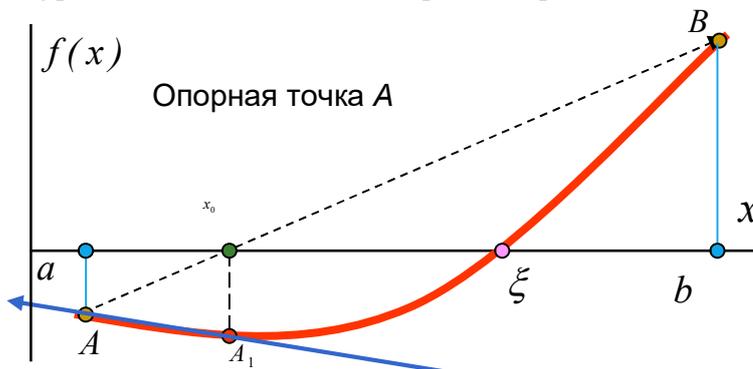


Рис.3.5. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод хорд. Опорная точка A .

Окончательно можно сделать выводы:

1. Неподвижен тот конец отрезка (опорная точка), для которого знак функции $f(x)$ совпадает со знаком второй производной $f''(x)$

2. Последовательные приближения x_n лежат по ту сторону корня ξ , где функция $f(x)$ имеет знак, противоположный знаку её второй производной $f''(x)$.

Приближенное значение корня уравнения $f(x) = 0$ определяем как

$$\bar{\xi} = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n \quad (3.6)$$

Алгоритм решения:

Полагая, что $b > a$ и ζ и δ - малые значения.

Шаг 1: Вычисляем значения функции $f(x)$ на концах интервала - $f(a)$, $f(b)$. Проверяем условие наличия корня на интервале $[a, b]$ - если корень существует, то переходим к шагу 2, иначе - выход.

Шаг 2: Вычисляем значения второй производной $f''(x)$ - $f''(a)$, $f''(b)$. Выбираем опорную точку.

Шаг 3: Используя уравнение хорды (3.2) и формулу (3.5) определяем приближённое значение корня x_0 и запоминаем его в ячейке x_{cm} .

Шаг 4: Используя уравнение хорды (3.2) и формулу (3.5) определяем приближённое значение корня x_0 .

Шаг 5: Вычисляем $abs(x_{cm} - x_0)$.

Если $abs(x_{cm} - x_0) < \delta$ и $f(x_0) < \zeta$, то выход, иначе уменьшаем значение δ и переходим к шагу 3.

Шаг 6: Выход.

Метод касательных (метод Ньютона).

Функция $f(x)$ определена и непрерывна на некотором конечном или бесконечном отрезке $[a, b]$ и удовлетворяет уравнению (3.1). Первая производная $f'(x)$ вторая производная $f''(x)$ непрерывны и сохраняют знаки на отрезке $a < x < b$.

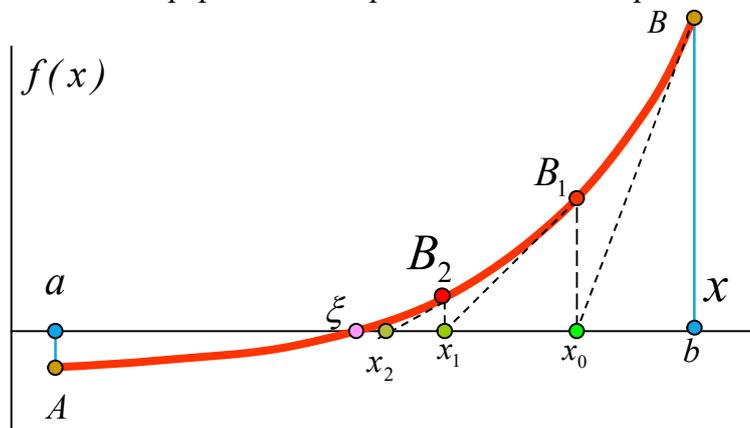


Рис.3.6. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод касательных. Опорная точка B.

По своей сути этот метод похож на метод хорд и отличается только способом построения линейных функций, с помощью которых определяется очередное приближённое значение корня уравнения $f(x) = 0$.

Пусть x_i некое приближение корня $\xi = x_i + \delta_i$ (δ_i - малая величина).

Пользуясь формулой Тейлора в окрестности точки $(x_i + \delta_i)$ запишем функцию $f(x)$ в виде ряда (высшие члены ряда не учитываются).

$$f(x_i + \delta_i) \approx f(x_i) + f'(x_i)\delta_i \quad (3.7)$$

Полагая $f(x_i + \delta_i) = 0$, получаем

$$\delta_i = -f(x_i) / f'(x_i) \quad (3.8)$$

Очередное приближённое значение корня определяется как

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (3.9)$$

Графически метод Ньютона эквивалентен замене части дуги $y = f(x)$ касательной к некоторой точке B .

Уравнение касательной в точке $B_i(x_i, f(x_i))$ имеет вид

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i) \quad (3.10)$$

При $y = 0$ и $x = x_{i+1}$, получаем

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (3.11)$$

Значение производной $f'(x)$ вычисляется каждый раз заново для точек B_1, B_2, \dots, B_n .

Правила выбора опорной точки ($f'(b)f''(b) > 0$) и сам алгоритм решения такие же, как в методе хорд.

Метод касательных является условно сходящимся методом, то есть для его сходимости

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n \rightarrow \xi$$

должно быть выполнено следующее условие в области поиска корня

$$|f(x^*)f''(x^*)| < (f'(x^*))^2 \quad (3.12)$$

При произвольном нулевом приближении итерации будут сходиться, если всюду будет выполнено приведённое выше условие. В противном случае сходимость будет лишь в некоторой окрестности корня.

Метод секущих.

Этот метод является модификацией метода касательных. Для случая, когда значения производной $f'(x)$ на всём отрезке $[a, b]$ незначительно отличаются друг от друга по величине, достаточно вычислить значение производной в опорной точке и использовать это значения для построения последовательности секущих линий и определения последовательности приближённых значений корня уравнения $f(x) = 0$

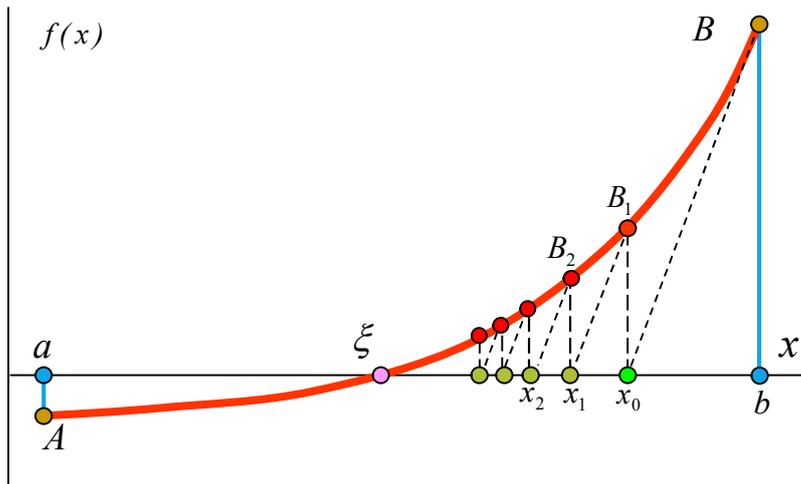


Рис.3.7. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод секущих.
Опорная точка B .

Метод итераций.

Пусть дано уравнение

$$f(x) = 0 \quad (3.1)$$

где $f(x)$ - непрерывная функция на интервале $[a, b]$, и нужно определить вещественные корни этого уравнения. Заменим уравнение (3.1) равносильным уравнением

$$x = \varphi(x) \quad (3.13)$$

Например, положим

$$\varphi(x) = x + \rho(x)f(x) \quad (3.14)$$

Где $\rho(x)$ - произвольная функция, не имеющая корней на интервале $[a, b]$ или константа. Действительно, при $f(x^*) = 0$ $\varphi(x^*) = x^*$, это означает, что нахождение корня уравнения (3.1) равносильно нахождению точки пересечения графиков $y = x$ и $y = \varphi(x)$

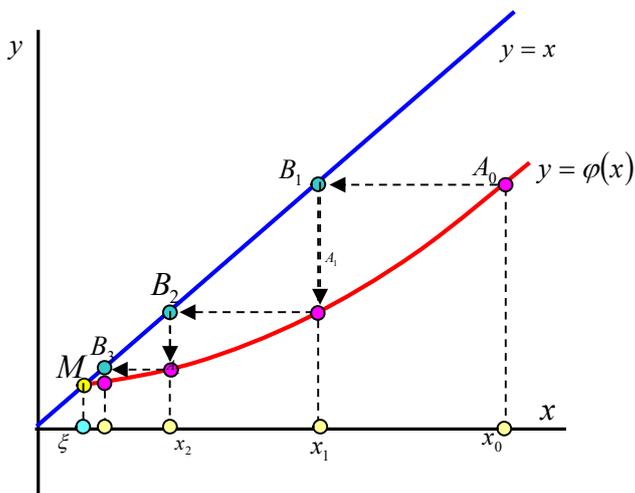


Рис.3.8. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод простой итерации $\varphi'(x) > 0$.

Алгоритм решения достаточно прост – выбираем любым способом грубое приближение значения корня x_0 (Рис.3.8) и подставляем его в правую часть уравнения (3.13). При этом получаем некоторое число

$$x_1 = \varphi(x_0) \quad (3.15)$$

Далее процесс продолжается - в правую часть уравнения (3.13) подставляем значение x_1 . Таким образом, получаем последовательность чисел

$$x_n = \varphi(x_{n-1}), \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (3.16)$$

Если эта последовательность сходится, то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(x_{n-1}) \quad (3.17)$$

Предел $\xi = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n$, является корнем уравнения (3.1)

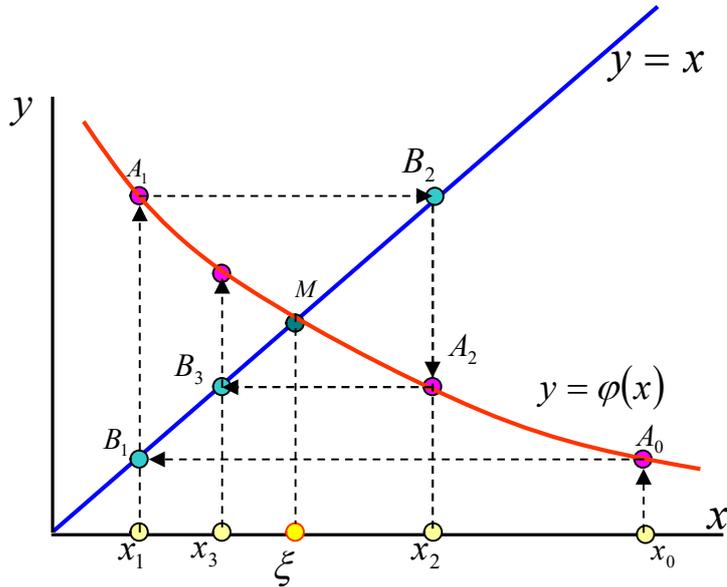


Рис.3.9. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод простой итерации $\varphi'(x) < 0$.

Различие в рис 3.8 и 3.9 заключается в том, что производная $\varphi'(x)$ имеет разные знаки. На рис 3.8 $\varphi'(x) > 0$, а на рис 3.9 $\varphi'(x) < 0$ и решение представляется в виде «лестницы» и в виде «скручивающейся спирали».

При условии $|\varphi'(x)| > 1$ процесс поиска корня может быть расходящимся (рис.3.10).

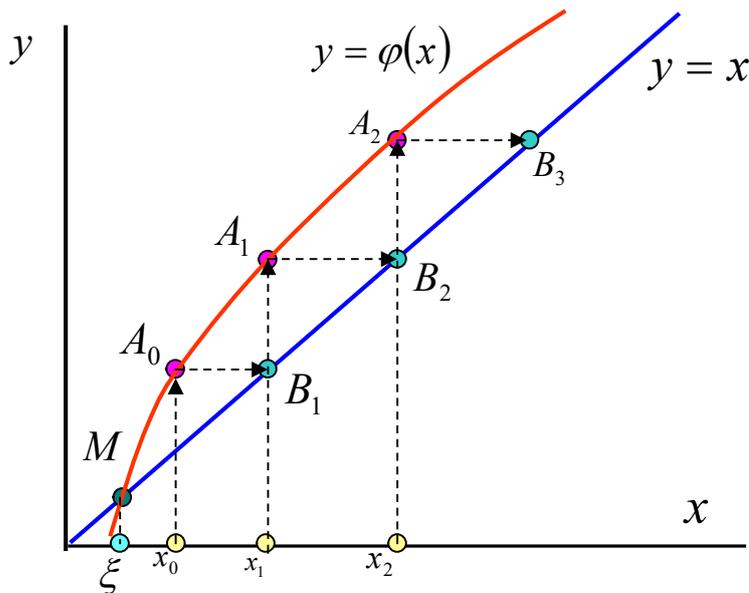


Рис.3.10. Поиск корня уравнения $f(x) = 0$. Алгоритм: метод простой итерации $|\varphi'(x)| > 1$.

Выбор функции $\varphi(x)$ заключается в том, чтобы $|\varphi'(x)|$ был минимален. Продифференцируем уравнение 3.14

$$\varphi'(x) = 1 + \rho'(x)f(x) + \rho(x)f'(x) \quad (3.18)$$

Поскольку вблизи корня $f(x) \approx 0$, то из (3.18) получаем

$$\varphi'(x) = 1 + \rho(x)f'(x) \quad (3.19)$$

И минимум $|\varphi'(x)|$ означает

$$1 + \rho(x)f'(x) = 0 \quad (3.20)$$

Таким образом, $\rho(x) = -\frac{1}{f'(x)}$ и функция

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (3.21)$$

Условие сходимости $|\varphi'(x)| < 1$ примет вид

$$\left| 1 - \frac{f(x)}{f'(x)} + \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} \right| < 1 \quad (3.22)$$

или

$$|f(x)f''(x)| < (f'(x))^2 \quad (3.23)$$

При выполнении этого условия процесс поиска корня уравнения (3.1) будет сходящимся.