

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
«Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»
Факультет нелинейных процессов

Ю.И. Левин, С.Е. Шешукова, А.В. Садовников

**ВВЕДЕНИЕ В ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ.
ЧАСТЬ 1. ТЕОРИЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ**

Учебно-методическое пособие

Саратов, 2015

УДК 159.6

Левин Ю.И., Шешукова С.Е., Садовников А.В. Введение в численные методы решения физических задач. Часть 1. Теория интерполяции: Учебно-методическое пособие. Саратов: СГУ, 2015. 39 с.

В учебном пособии изложены элементарные численные методы необходимые начинающим физикам младших курсов. При этом принимается во внимание, что на старших курсах читается курс «Математические методы естествознания». В пособие приведены методы интерполяции и аппроксимации функции.

Учебное пособие в первую очередь предназначено для студентов младших курсов факультета нелинейных процессов. Отдельные разделы могут быть использованы учащимися старших классов Лицея прикладных наук.

УДК 159.6

© Ю.И.Левин, С.Е. Шешукова, А.В. Садовников
2015

Оглавление

Предисловие

1. Математическое моделирование физических процессов

2. Интерполяция функций

2.1. Интерполяция многочленами

2.2. Интерполяционный полином Лагранжа

2.3. Метод Ньютона (метод разделенных разностей)

2.4. Сравнение лагранжевого и ньютонового представления интерполяционного полинома

2.5. Погрешность многочленной интерполяции

2.6. Сплайн-интерполяция

2.7. Метод наименьших квадратов

2.8. Полиномы на базе ортогональных систем функций

Предисловие

У великого русского поэта М.Ю. Лермонтова есть слова: «Во всякой книге предисловие есть первая и вместе с тем последняя вещь: она или служит объяснением цели или оправданием и ответом на критику». Это предисловие не является исключением.

В V веке до нашей эры Пифагор считал, что все сущее управляется числом, позднее Эммануил Кант утверждал, что в любой науке столько истины, сколько в ней математики. Развитие физики и математики зачастую шли параллельно. Достаточно привести три примера, связанные с тремя великими именами: Исаака Ньютон (основы механики и дифференциальные и интегральные исчисления), Леонард Эйлер (строительная механика, гидродинамика и вариационное исчисление), Анри Пуанкаре (устойчивость динамических систем и теория бифуркаций).

Иногда у начинающих исследователей и, особенно, у студентов младших курсов складывается впечатление, что вычислительные методы появились с компьютерами. Это далеко не так. Рассматривая различные численные методы, в данном учебном пособии мы столкнемся с именами Ньютона, Лагранжа, Эйлера и другими великими именами. В те далекие времена при решении практических задач в ряде случаев аналитические методы оказывались бессильными, и приходилось разрабатывать и применять численные методы. Другое дело, с развитием компьютерной техники и особенно персональных компьютеров численные методы получили широчайшее применение. Это обусловлено двумя обстоятельствами. Во-первых, важнейшим достоинством компьютеров – огромным быстродействием и, во-вторых, особенностью компьютеров – оперируют с дискретными объектами.

В настоящее время разработано большое число разнообразных численных методов. Настоящее учебное пособие не ставит своей целью их изложение или хотя бы перечисление. В пособие вошли только те численные методы, знание которых необходимы студентам младших курсов при подготовке по направлениям «Радиофизика», «Прикладная математика и физика», «Информационные системы и технологии» на факультете нелинейных процессов Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского. На старших курсах студенты по указанным направлениям проходят подготовку по дисциплине «Математические методы естествознания».

Следует отметить, что имеется значительное число учебной литературы по численным методам. Однако, либо это устаревшие учебники, либо написаны для математиков, либо при

использовании требуют солидной математической подготовки, либо изданы малым тиражом и недоступны студентам младших курсов.

В данном пособии вычислительные методы в какой-то степени излагаются с «потребительской» точки зрения: главное не строгость доказательства, а достоинства и недостатки того или иного метода при его практическом применении.

В конце настоящего пособия приведен список литературы, который ни в коей мере нельзя назвать полным. С одной стороны, это рекомендуемый список литературы, а с другой – это те источники, которые использовали авторы. Здесь уместно назвать еще две публикации, материалы которых широко использованы в настоящем пособии и практически недоступны для студентов:

1. Математическое моделирование физических процессов: Методические указания для студентов специальностей 60.45, 20.01 / ННПИ; Сост.: А.Д. Юнаковский, Н.Новгород, 1990.

2. Юнаковский А.Д. Математическое моделирование физических процессов (вычислительные аспекты). Препринт № 296 академия наук СССР. Институт прикладной физики. Н. Новгород, 1991.

1 Математическое моделирование физических процессов

Вопросы, рассматриваемые в учебном пособии, в настоящее время неразрывно связаны с использованием электронных вычислительных машин. Вычислительные методы, несмотря на то, что многие из них были созданы задолго до появления ЭВМ, сегодня неотделимы от использования компьютеров.

Самая обширная область применения компьютеров связана с теми сторонами человеческой деятельности, для осуществления которых требуется вычисления, расчеты, математический анализ, что нашло отражение в названии ЭВМ: компьютер (англ.) – вычислитель. Условно можно выделить еще два направления использования вычислительных машин:

1) ЭВМ – логический автомат, осуществляющий сортировку информации, упорядочение ее по тем или иным признакам, поиск наилучших или наихудших условий (т.е. решение задач оптимизации);

2) ЭВМ – устройство текстовой обработки самостоятельно или в комплексе с другими устройствами оргтехники. Это различного рода автоматизированные библиотеки и справочники, автоматическое переводчики с одного языка на другой, редакторы и т.д.

Естественно, в каждом из этих основных направлений применения ЭВМ существует множество подклассов и групп задач, зависящих от целей и специфики применения, наличия информации и многих других факторов.

В контексте рассматриваемых здесь вопросов вычислительных методов нас будет интересовать только первое направление применения ЭВМ, связанные с необходимостью выполнения тех или иных математических расчетов. Рассмотрений двух других применений ЭВМ можно отнести к информатике.

Приступая к изучению того или иного объекта физической или другой природы, исследователь, обычно, составляет систему уравнений, которая отражает сущность объекта и свойственные ему закономерности. Такая система уравнений называется *математической моделью объекта*, а методика ее нахождения и последующего изучения – *математическим моделированием*.

Существует понятие экспериментального или физического моделирования – это замена изучения реального интересующего нас явления или объекта изучением аналогичного явления на модели меньшего или большего масштаба. Такое моделирование базируются на анализе размерностей и теории подобия и его смысл: по результатам опытов с моделями дать необходимые ответы о характере процессов и величине параметров в реальном объекте в натуральных условиях. Аналоговое моделирование основано на аналогии явлений и

процессов, имеющих различную физическую природу, но описываемых одинаковыми математическими (дифференциальными, алгебраическими, логическими и др.) уравнениями.

Математическое моделирование или моделирование на ЭВМ принципиально отличается от физического моделирования. Оно связано с решением, зачастую, сложных и громоздких систем уравнений или логических задач, описывающих поведение модели, адекватной изучаемому объекту.

В физическом энциклопедическом словаре дано такое определение: «Математическое моделирование – метод исследования физических явлений с помощью специальных моделей, основанный на идентичности математического описания процессов в оригинале и модели. «Идентичность» здесь означает одинаковость формы уравнений и наличие однозначных соотношений (уравнений преобразования переменных) между переменными в уравнениях оригинала и модели. При этом физическая природа модели и оригинала различны. По сравнению с физическим моделированием, основанным на изучении явлений на моделях одной физической природы с оригиналом, метод математического моделирования имеет ряд преимуществ: переход от задачи к задаче не требует построения новой модели, изменение параметров моделируемой системы не вызывает трудоемких переделок модели, математические модели относительно просты и дешевы. Метод математического моделирования более универсален, чем метод физического моделирования. Вместе с тем он позволяет воспроизводить только ограниченный комплекс физических процессов, укладываемых в рамки идеализации, принятой при математическом описании явлений.»

Процесс изучения того или иного реального объекта можно условно представить следующим образом. Прежде всего, мы создаем физическую модель: например, учитываем или не учитываем трение, релятивистские эффекты, определяем какие параметры можно считать малыми и т.п., т.е. вносим какие-то ограничения. Затем мы записываем математические выражения (строим математическую модель), при этом, как правило, тоже вводятся какие-то допущения. Следующий шаг можно условно назвать построением вычислительной модели – применяются численные методы опять же при каких-то допущениях. Наконец, составляется программа и начинается счет на ЭВМ. Но и при составлении программы мы делаем те или иные ограничения. Чрезвычайно важен вопрос (о нем не следует забывать) об адекватности модели. То, что мы считаем на ЭВМ, действительно соответствует реальному объекту?

Образно ситуацию можно представить так. Мы купаем ребенка и грязную водичку выплескиваем. Продолжаем купать и опять выплескиваем грязную водичку. Так несколько раз. И вот мы получаем, мы так думаем, чистого ребенка. Мы должны быть уверены, что на

каждом этапе с грязной водичкой мы не выплеснули ребенка, что в итоге мы имеем дело не с грязной водой, а с чистым ребенком.

Рассмотрим пример. Перед обработкой металла давлением (ковкой, штамповкой, прокатом) исходная заготовка нагревается до определенной температуры. Если не догреть металл, то из-за недостаточной пластичности требуется большое давление, а, следовательно, и более мощное оборудование, возникают проблемы с износом оборудования. Если перегреть металл, то при транспортировке заготовка может деформироваться и будут излишние затраты энергии.

Пусть исходная заготовка цилиндрическая, имеет сечение радиуса R , и ее надо нагреть до температуры T_0 . Центральная ось заготовки нагревается медленнее и, очевидно, процесс нагрева можно считать законченным, когда на оси будет достигнута необходимая температура. Для последующего расчета на ЭВМ такая постановка задачи должна быть скорректирована. Нагрев можно будет считать законченным, когда на оси будет достигнута температура $T_0 \pm \Delta T$, где ΔT – допустимое (может быть сколь угодно малое) отклонение от заданной температуры.

Пусть требуется рассчитать время нагрева заготовки. Предполагаем, что теплоемкость печи намного больше теплоемкости заготовки. Внесение заготовки в печь не меняет ее температуры T_0 . Процесс нагрева заготовки определяется явлением теплопроводности внутри металла. Математическая модель этого процесса – известное классическое уравнение математической физики, уравнение теплопроводности. Для заготовки цилиндрической формы это уравнение можно записать в виде

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

где α – коэффициент теплопроводности; r – «текущий» радиус цилиндра ($r=0$ – ось, $r=R$ – поверхность цилиндра); τ – время.

Уравнение записано в предположении, что нагрев заготовки осуществляется через боковую поверхность цилиндра, а теплопередачей на торцах заготовки можно пренебречь.

Граничные условия: при $r=R$ имеем $T=T_0$ – наружная поверхность заготовки мгновенно приобретает температуру печи; при $r=0$ имеем $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ – соответствует допущению, что нагрев осуществляется симметрично относительно оси.

Начальные условия: заготовка в момент поступления в печь ($\tau=0$) имеет одинаковую по всем сечениям температуру. Для простоты расчетов можно положить ее равной нулю ($T_{\tau=0}=0$).

Уравнение теплопроводности с граничными и начальными условиями составляет математическую модель рассчитываемого процесса. Построенная модель при сделанных допущениях в принципе позволяет определить температуру заготовки во времени по ее толщине, в том числе и на оси $T(\tau, 0)$. Отметим, что измерить температуру на оси невозможно.

ЭВМ непосредственно (в непрерывных переменных) решать уравнения в частных переменных не могут. Нужно обратиться к численным методам и создать то, что мы назвали вычислительной моделью. Можно использовать метод конечных разностей. Для этого разобьем заготовку по радиусу на n слоев и будем фиксировать температуру в этих слоях, т.е. температура внутри каждого i -слоя неизменная, а от слоя к слою изменяется скачком ($i=1,2,3,\dots,n$). Если вы думаете, что чем больше слоев (больше число n), тем точнее будет ответ, то это далеко не всегда так. Позднее мы убедимся в этом. При выбранном методе частные производные по радиусу можно заменить конечными разностями

$$\frac{\partial T}{\partial r} \rightarrow \frac{T_{i-1} - T_i}{\Delta r_i}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \rightarrow \frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{\Delta r_i^2}$$

где Δr_i – интервал разбиения на слои (толщина слоев).

Если подставить эти значения производных в уравнение теплопроводности для каждого значения i , то получим n конечно-разностных уравнений. После несложных преобразований модель принимает вид:

$$\frac{dT_1}{d\tau} = \alpha \left(\frac{1}{r_1 \Delta r_1} + \frac{1}{\Delta r_1^2} \right) (T_0 - T_1) - \frac{\alpha}{\Delta r_1^2} (T_1 - T_2);$$

...

$$\frac{dT_i}{d\tau} = \alpha \left(\frac{1}{r_i \Delta r_i} + \frac{1}{\Delta r_i^2} \right) (T_{i-1} - T_i) - \frac{\alpha}{\Delta r_i^2} (T_i - T_{i+1});$$

...

$$\frac{dT_n}{d\tau} = \alpha \left(\frac{1}{r_n \Delta r_n} + \frac{1}{\Delta r_n^2} \right) (T_{n-1} - T_n), \quad T_i(0) = 0$$

Мы получили систему обыкновенных дифференциальных уравнений с одной производной по времени. Следует обратить внимание, что граничные условия вошли в структуру этих уравнений. Для простоты можно записать так:

$$\begin{aligned} y_1 &= b_{n1}(T_0 - T_1) - b_{12}(T_1 - T_2), \\ &\dots \\ y_i &= b_{i1}(T_{i-1} - T_i) - b_{i2}(T_i - T_{i+1}), \\ &\dots \\ y_n &= b_{n1}(T_{n-1} - T_n), \end{aligned}$$

где

$$y_i = \frac{dT_i}{d\tau}, \quad b_{i1} = \alpha \left(\frac{1}{r_i \Delta r_i} + \frac{1}{\Delta r_i^2} \right), \quad b_{i2} = \frac{\alpha}{\Delta r_i^2}.$$

Но ЭВМ не умеют решать и обыкновенные дифференциальные уравнения. Опять нужно прибегать к численным методам. Например, можно воспользоваться простым, но далеко не самым точным методом Эйлера. Суть его в следующем. Интервал интегрирования по времени разбивается на N участков по $\Delta\tau$. Номер «временного» дискретного участка $j = 1, 2, \dots, N$. Искомые величины T_i вычисляются по формулам

$$T_{i,j} = T_{i,j-1} + y_{i,j} \Delta\tau; \quad \tau_j = \tau_{j-1} + \Delta\tau$$

т.е. для каждого j -го момента определяются текущее значение времени τ_j и температура каждого слоя $T_{1j}, T_{2j}, \dots, T_{nj}$.

Теперь можно перейти к построению программы, не забывая о сделанных допущениях и о тех предположениях, которые могут быть еще сделаны. Вера в получаемые результаты расчета базируется на уверенности в адекватности модели.

Математическое моделирование с помощью современных ЭВМ физических (и других, нефизических) процессов достигло такого высокого уровня, что говорят о математическом или вычислительном эксперименте. Существенными свойствами моделей, которые можно исследовать с помощью ЭВМ, являются конечность и дискретность.

Вычислительный (машинный) эксперимент может быть успешным лишь тогда, когда он квалифицированно организован. Конечно, многое зависит от правильного выбора или применения численных методов. Но следует обратить внимание еще на одно обстоятельство. Успех эксперимента может зависеть и от постановки задачи, т.е. от формулировки математической модели. Продemonстрируем это на простом примере.

Рассмотрим систему

$$\begin{cases} 1000x + 2001y = 4003, \\ x + 2y = 4, \end{cases}$$

которая имеет точное решение $x = -2, y = 3$.

Пусть коэффициенты этой системы каким-то образом рассчитываются, и при определении коэффициента при y в первом уравнении мы ошиблись на 0.1%, т.е. вместо 2001 получили 1999. Ответ резко изменяется, получаем $x = 10, y = -3$. Это «плохо обусловленная система». Уравнения системы описывают прямые, наклоны которых относительно координатных осей отличаются друг от друга незначительно (рис. 1.1).

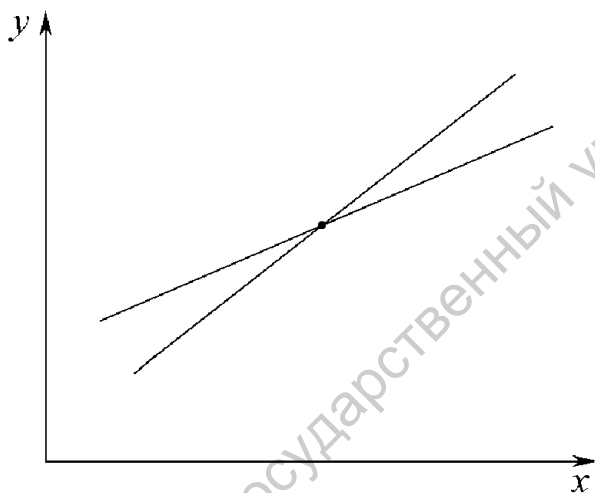


Рис. 1.1. Иллюстрация «плохо обусловленной системы»

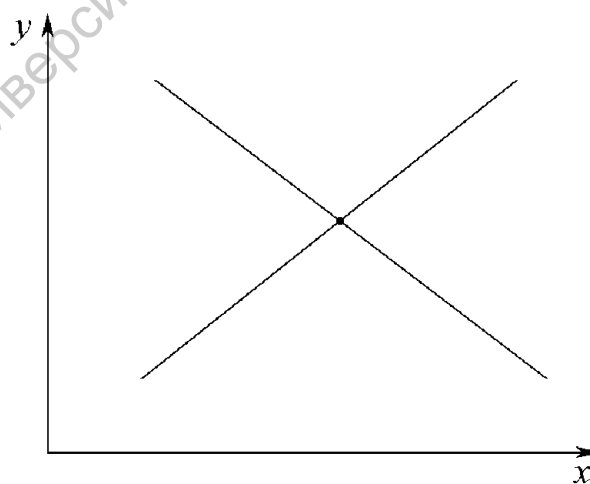


Рис.1.2. Иллюстрация «хорошо обусловленной системы»

Незначительное изменение одного из коэффициентов в системе и соответственно незначительное изменение наклона одной из прямых ведет к существенному изменению положения точки пересечения прямых, определяющей решение системы уравнений.

Для «хорошо обусловленной системы» решение должно определяться так, как показано на рис. 1.2.

2 Интерполяция функций

Интерполяция в простейшем классическом смысле – это конструктивное восстановление (чаще всего приближенное) функции определенного класса по известным ее значениям или значениям ее производных в данных точках. Если функция задана в определенных (дискретных) точках на конечном интервале, то сущность интерполяции стоит в отыскании значений функции в промежуточных точках.

Интерполяционную задачу можно сформулировать, например, так. Задано конечное множество вещественных аргументов (узлов), выстроенных по возрастающей,

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n,$$

и соответственно значения функций

$$y_0, y_1, y_2, \dots, y_n.$$

Необходимо построить такую функцию $f(x)$, чтобы

- 1) $f(x_i) = y_i$
- 2) $f(x)$ – принимает «разумные» значения для x , лежащих между заданными точками.

Критерий «разумности» меняется от задачи к задаче и не может быть точно определен.

Цели интерполяции разнообразны, но чаще всего в ее основе желание иметь быстрый алгоритм вычисления $f(x)$ для значения x , не содержащихся в таблице данных (x_i, y_i) .

Перед тем как непосредственно перейти к методам интерполяции, обратим внимание на 4 вопроса:

1. Какие узлы мы будем использовать, т.е. какие точки x_i и с каким шагом $h_i = x_i - x_{i-1}$ будут заданы?
2. Какой класс приближающих (интерполяционных) функций мы будем использовать?
3. Какой критерий согласия мы примем, т.е. как, по каким критериям интерполяционная функция согласуется с таблицей данных (x_i, y_i) ?
4. Какую точность мы хотим получить?

Сделаем некоторые общие замечания по поводу ответов на эти вопросы.

1. Узлы (точки x_i) чаще всего заданы внешними обстоятельствами, но если можно влиять на расположение узлов, то надо это делать лучшим способом. Например, при вычислении интеграла с резко меняющейся функцией узлы нужно концентрировать в районе

больших производных подынтегральной функции, а при приближенном вычислении производной

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Нельзя брать слишком малый шаг h , можем получить большую ошибку за счет вычисления двух близких величин в числителе.

2. При выборе интерполяционных функций чаще всего обращаются к трем классам функций:

- многочлены степени $\leq n$ (где n – число узлов) с базисными функциями
$$1, x, x^2, \dots, x^n;$$
- система тригонометрических функций с базисом $\sin(a_i x), \cos(a_i x)$ с различными a_i при $i \leq n$;
- система экспонент $\exp(a_i x)$ с различными a_i при $i \leq n$.

Почему именно эти функции? Каждая из этих групп обладает важными свойствами. Во-первых, множество функций таких групп переходят сами в себя при замене $x \rightarrow x + \alpha$. Следовательно, выбор любой из этих групп не зависит от начала отсчета. Во-вторых, множество этих функций не меняется как множество при замене $x \rightarrow \alpha x$.

Иногда используется еще одна группа интерполяционных функций: отношение двух полиномов

$$\frac{P(x)}{Q(x)}$$

Такой подход срабатывает в тех ситуациях, когда обычные полиномы с ростом степени перестают давать «разумное» приближение.

3. Критерии согласия разнообразны. Укажем только на три:

а) точное совпадение интерполяционной функции в узловых точках с заданными значениями;

б) берется полином степени $m \leq n$ (n – число узлов) такой, что сумма квадратов уклонений в узловых точках минимальна (метод наименьших квадратов);

в) берется полином степени $m \leq n$ (n – число узлов), дающий минимальное значение максимуму уклонения интерполирующей функции в узлах от заданных значений.

4. Точность вычислений! На практике ответ на вопрос о точности ищется в первоначальной задаче, в самой постановке задачи. Иногда вопрос о точности удается в какой-то мере осмыслить после предварительных расчетов, когда полученные числа истолковываются на языке первоначальной задачи.

2.1 Интерполяция многочленами

Базисные функции

$$1, x, x_2, x_3, \dots, x_n.$$

Многочлен степени n является линейной комбинацией базисных функций

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n = \sum_{k=0}^n a_k x^k.$$

Неизвестными являются $(n+1)$ коэффициентов a_i . Если имеется $(n+1)$ условий, наложенных на многочлен, то можно определить коэффициенты.

Пусть нам известны $(n+1)$ узловых точек

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n,$$

и соответствующие значения функции y_i ($i=0,1,2,\dots,n$). Иногда узловыми называют точки на плоскости (x_i, y_i) . Потребуем, чтобы многочлен проходил через эти точки, т.е.

$$\sum_{k=0}^n a_k x_i^k = y_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

Мы получили систему $(n+1)$ линейных уравнений относительно a_k . Эта система имеет нетривиальное решение, если ее определитель отличен от нуля.

Определитель полученной системы называется определителем Вандермонда (свойства такого определителя впервые рассмотрел Vandermonde A. T. в 1771 году для случая $n=3$) и имеет вид

$$W = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix}.$$

Основное свойство определителя Вандермонда состоит в том, что он равен нулю $W=0$ тогда и только тогда, когда среди его элементов хотя бы часть одинаковая, т.е. имеется $x_i = x_j$ ($i, j = 0, 1, 2, \dots, n$). В этом не трудно убедиться.

Пусть имеется $x_i = x_j$, т.е. две строки в определителе равны, тогда $W=0$ как любой определитель. Однако, это не означает, что не может быть $W=0$ при $x_i \neq x_j$. Докажем, что определитель Вандермонда равен нулю только при $x_i = x_j$.

Рассмотрим определитель Вандермонда как функцию узловых точек

$$W = f(x_0, x_1, \dots, x_n).$$

Будем вначале считать $W = f(x_n)$. При изменении аргумента x_n всякий раз, когда $x_n = x_j$ для $j=0, 1, 2, \dots, n-1$ будет $W=0$. Следовательно, функция $f(x_0, x_1, \dots, x_n)$ содержит множители

$$(x_n - x_{n-1})(x_n - x_{n-2}) \dots (x_n - x_0) = \prod_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i).$$

Рассматривая определитель W как функцию $f(x_{n-1})$ точно также можно установить, что $f(x_0, x_1, \dots, x_n)$ содержит множители

$$(x_{n-1} - x_{n-2})(x_{n-1} - x_{n-3}) \dots (x_{n-1} - x_0) = \prod_{i=0}^{n-2} (x_{n-1} - x_i).$$

Нетрудно убедиться, что функция $f(x_0, x_1, \dots, x_n)$ содержит все множители

$$\prod_{j>i=0}^n (x_j - x_i).$$

При дальнейших несложных рассуждениях мы приходим к выводу

$$W = \prod_{j>i=0}^n (x_j - x_i).$$

Таким образом, определитель Вандермонда может обращаться в ноль тогда и только тогда, когда имеются одинаковые элементы $x_i = x_j$. В рассматриваемом случае такого нет, т.е. всегда $W \neq 0$, и задачу о нахождении многочлена по узловым точкам (x_i, y_i) всегда (в принципе) можно решить и найти коэффициенты a_k по правилу Крамера или каким-нибудь иным способом.

Рассмотренный путь интерполяции функции логически достаточно прост, но при больших n в приложениях применяется редко, т.к. требует вычисления определителей, а это часто не простая задача, приводящая к неоправданным затратам машинного времени.

2.2 Интерполяционный полином Лагранжа

Рассмотрим еще один способ определения многочлена (полинома) $P(x)$, который интерполирует узловые точки (x_i, y_i)

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

В предыдущем случае мы строили полином (многочлен) на основе базиса

$$1, x, x^2, \dots, x^n.$$

Теперь в качестве базиса используем так называемые «лагранжевы полиномы», которые также иногда называют «множители Лагранжа» или «лагранжевы многочлены влияния».

Построим $(n+1)$ полиномов $L_i(x)$ степени n таких, что

$$L_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j, \end{cases} \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n,$$

x_j – узловые точки.

Этим условиям удовлетворяет полином степени n :

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}.$$

Действительно:

а) при $x = x_j$ и $j \neq i$ один из множителей числителя обращает $L_i(x_j)$ в ноль; множителя содержащего x_i нет в числителе и при $j = i$ имеем $L_i(x_i) \neq 0$.

б) множители знаменателя нормируют полином так, что $L_i(x_i) = 1$ ($i = j$).

В предыдущем случае для определителя a_k мы получили систему

$$y_i = \sum_{k=0}^n a_k x_i^k, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n,$$

из которой видно, что коэффициенты a_k линейной зависят от y_i . Следовательно, и многочлен $P(x)$ линейно зависит от величины y_i . Это позволяет полином $P(x)$, являющийся решением задачи интерполяции, представить в виде

$$P(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x).$$

В узловых точках (как и ранее) полином принимает значение y_i , т.е. совпадает с заданными значениями функции. Полученное соотношение иногда называют формулой Лагранжа.

Важно подчеркнуть, что существует один и только один многочлен $P(x)$ степени n , который интерполирует заданные точки (x_i, y_i) , которых $(n + 1)$ штук (это можно показать, используя основную теорему алгебры). Таким образом, полином Лагранжа совпадает с ранее построенным полиномом.

2.3 Метод Ньютона (метод разделенных разностей)

Метод разделенных разностей – это еще один способ построения интерполяционного многочлена. В рассмотренных выше двух методах построения интерполяционных полиномов мы исходили из того, что число используемых узлов задано и известно. Но иногда бывает так, что известной является лишь заданная точность, а число узлов, которое требуется для достижения этой точности, определяется из информации о том, как вычисляется функция. Метод Ньютона удобен тем, что число используемых узлов интерполяции может быть легко увеличено или уменьшено (для достижения заданной точности) без повторения всех выполненных вычислений.

Следуя Ньютону, полином будем искать в виде

$$P(x) = C_0 + C_1(x - x_0) + C_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + C_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}).$$

Коэффициенты C_i находятся из условия совпадения полинома с заданной функцией в узловых точках.

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

при $x = x_0$	$y_0 = C_0,$
при $x = x_1$	$y_1 = C_0 + C_1(x_1 - x_0),$
при $x = x_2$	$y_2 = C_0 + C_1(x_2 - x_0) + C_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1),$
...	
при $x = x_n$	$y_n = C_0 + \dots + C_n(x_n - x_0)(x_n - x_1)\dots(x_n - x_{n-1}),$

В результате мы получаем линейную систему уравнений с треугольной матрицей. Определение с ее помощью значений коэффициентов C_i не представляет трудностей. При этом важно следующее обстоятельство: если для построения полинома по заданным узловым точкам x_0, x_1, \dots, x_n коэффициенты C_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) уже определены, то при добавлении еще одной узловой точки x_{n+1} эти коэффициенты останутся прежними и лишь добавится новый коэффициент C_{n+1} .

Рассмотрим случай равностоящих узловых точек

$$x_i = x_0 + i h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

В этом случае система уравнений для определения коэффициентов C_i принимает вид:

$$\begin{aligned} y_0 &= C_0, \\ y_1 &= C_0 + C_1 h, \\ y_2 &= C_0 + C_1 2h + C_2 2h^2, \\ &\dots \\ y_n &= C_0 + C_1 n h + C_2 n h(n-1)h + \dots + C_n (n!) h^n. \end{aligned}$$

Отсюда для коэффициентов получаем

$$\begin{aligned} C_0 &= y_0, \\ C_1 &= \frac{y_1 - C_0}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h} = \frac{\Delta y_0}{h}, \quad \text{где } \Delta y_0 = y_1 - y_0, \\ C_2 &= \frac{1}{2h^2} (y_2 - C_0 - 2C_1 h) = \frac{1}{2h^2} \left(y_2 - y_0 - 2h \frac{y_1 - y_0}{h} \right) = \\ &= \frac{1}{2h^2} (y_2 - 2y_1 + y_0) = \frac{1}{2} \frac{\Delta y_1 - \Delta y_0}{h^2}, \quad \text{где } \Delta y_1 = y_2 - y_1, \Delta y_0 = y_1 - y_0. \end{aligned}$$

Мы ввели оператор разности Δ . В общем случае $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$ — это конечная разность первого порядка. Разность второго порядка: $\Delta^2 y_0 = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$. Разности порядка k выражаются через разности порядка $(k-1)$:

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Итак, для коэффициента C_2 можно записать

$$C_2 = \frac{1}{2} \frac{\Delta^2 y_0}{h^2} = \frac{\Delta^2 y_0}{2! h^2}.$$

Можно показать, что для любого коэффициента

$$C_k = \frac{\Delta^k y_0}{k! h^k}.$$

Величину $\frac{\Delta^k y_0}{h^k}$ иногда называют k -й правой разделенной разностью. Очевидно

$$C_0 = y_0,$$

$$C_1 = f(y_1, y_0),$$

$$C_2 = f(y_2, y_1, y_0) \quad \text{и т.д.}$$

Например

$$C_3 = \frac{\Delta^3 y_0}{3!h^3} = \frac{1}{6h^3} (\Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0) = \frac{1}{6h^3} [(\Delta y_2 - \Delta y_1) - (\Delta y_1 - \Delta y_0)] =$$

$$= \frac{1}{6h^3} (\Delta y_2 - 2\Delta y_1 + \Delta y_0) = \frac{1}{6h^3} (y_3 - y_2 - 2y_2 + 2y_1 + y_1 - y_0) =$$

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

Подставляя найденные значения C_k в формулу для полинома, получаем

$$P(x) = y_0 + x \frac{\Delta y_0}{h} + x(x-h) \frac{\Delta^2 y_0}{h^2} + x(x-h)(x-2h) \frac{\Delta^3 y_0}{h^3} + \dots$$

Это соотношение иногда называют формулой Ньютона.

Следует обратить внимание, что в методе разделенных разностей безразличен порядок, в котором пронумерованы узлы интерполяции.

2.4 Сравнение Лагранжевого и Ньютонового представления интерполяционного полинома

В предыдущих разделах мы получили формулу Лагранжа

$$P(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) y_i(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

и формулу Ньютона

$$P(x) = C_0 + C_1(x - x_0) + C_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + C_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

В формуле Лагранжа множители $L_i(x)$ зависят от выбора узлов x_i и точки x , в которой мы хотим определить функцию, и не зависят от y_i . Множитель $y_i(x_i)$ позволяют учитывать влияние на $P(x)$ свойств функции $y(x)$ и ее значений в узловых точках. Это «разделение» удобно в двух отношениях:

а) если нужно интерполировать несколько функций по одной системе узлов x_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), то можно вычислить L_i один раз и использовать их для всех функций $y(x)$;

б) указанное «разделение» влияния на $P(x)$ выбора узлов x_i и свойств функции y бывает полезным при исследовании сходимости $P(x)$ к $y(x)$ при $n \rightarrow \infty$. Действительно, если эти факторы разделены, легче наблюдать за их влиянием и оценивать погрешность приближения $P(x)$ к $y(x)$.

Ньютоново представление полинома менее удобно для исследования такого рода, т.к. коэффициенты C_i зависят от расположения узлов x_i и свойств функции $y(x)$ и ее значения в узлах достаточно сложно. Это затрудняет использование формулы Ньютона в исследовании теоретических вопросов. Но формула Ньютона обладает другими чертами, делающими ее весьма полезной при практических расчетах. Выше уже указывалось на эти свойства, обратим на них внимание еще раз.

При интерполяционных вычислениях часто поступают так: исходя из опыта и других соображений, задают число и расположение узлов x_i , при которых можно ожидать достижения необходимой точности. Но надежды редко сбываются «сходу», точность оказывается недостаточной. Для достижения необходимой точности обычно добавляют еще один или несколько узлов. В формуле Лагранжа это влечет за собой не только добавления нового слагаемого, но и пересчет всех остальных, ранее полученных, членов полинома. В

формуле Ньютона при добавлении нового $(n+1)$ слагаемого все ранее найденные члены полинома сохраняются, и требуется лишь добавление этого слагаемого

$$(x-x_0)\dots(x-x_n)C_{n+1}.$$

Отметим еще раз, что для расчета по формуле Ньютона безразличен порядок, в котором перенумерованы узлы интерполяции. Это полезно помнить при добавлении новых узлов при практических расчетах.

Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

2.5 Погрешность многочленной интерполяции

Исходя из того, что в принципе существует некоторая функция, значение которой y_i заданы в узловых $(n+1)$ точках x_i , мы строим тем или иным методом многочлен (полином), проходящий через эти точки и фактически заменяющий первоначальную функцию. В таком контексте вместо слова «интерполяция» иногда используют слово «аппроксимация». В простейшем понимании аппроксимация – это замена одних математических объектов другими, в том или ином смысле близкими к исходным. При построении полинома важен вопрос, как сильно могут различаться исходная функция и полином в точках, отличных от узловых.

Проведем оценку погрешности метода многочленной интерполяции (аппроксимации). Пусть $y(x)$ – исходная функция, $P(x)$ – интерполяционный многочлен. Погрешностью интерполирования называют разность

$$R(x) = y(x) - P(x).$$

Эта величина зависит от многих факторов. Например, $R(x)$ зависит от свойств функции $y(x)$, от всех параметров интерполяции, от положения точки интерполирования x . Изучение погрешности $R(x)$ сложная задача, при решении которой могут использоваться разнообразные представления погрешности, могут быть взяты различные численные меры погрешности и т.д.

Ограничимся рассмотрением представления погрешности $R(x)$, рассчитанное на классы функций высокого порядка гладкости, т.е. существуют производные исходной функции $y^{(n)}(x)$ высокого порядка.

Погрешность удобно представить в виде

$$y(x) - P(x) = W(x)r(x),$$

$$\text{где } W(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i).$$

При таком представлении погрешность заведомо равна нулю во всех узловых точках интерполяции.

Введем вспомогательную функцию

$$g(x) = y(t) - P(t) - W(t)r(x).$$

В этом соотношении x играет роль параметра, который может принимать любые, но фиксированные значения. Не трудно видеть, что $g(t) = 0$ в случаях:

- а) во всех узловых точках, когда $t = x_0, x_1, \dots, x_n$;
- б) в точке $t = x$ – в соответствии с введенным представлением $R(x)$.

Таким образом, $g(t) = 0$ в $(n+2)$ точках.

Пусть исходная функция $y(x)$ имеет $(n+1)$ непрерывную производную. Следовательно, и функция $g(t)$ имеет $(n+1)$ непрерывную производную.

По теореме Роля между нулями гладкой функции лежит нуль ее производной. Для функции с высоким порядком гладкости можно выстроить «цепочку». Между нулями первой производной лежит нуль второй производной, между нулями второй производной лежит нуль третьей производной и т.д.

В рассматриваемом случае в итоге имеем: между крайними из $(n+2)$ нулей вспомогательной функции $g(t)$ лежит нуль $(n+1)$ производной:

$$g^{(n+1)}(t) = 0$$

или

$$y^{(n+1)}(t) - P^{(n+1)}(t) - W^{(n+1)}(t)r(x) = 0.$$

$P(x)$ многочлен n -ой степени, поэтому

$$P^{(n)}(t) = \text{Const}, \quad P^{(n+1)}(t) = 0.$$

Нетрудно видеть, что

$$W^{(n+1)}(t) = (n+1)!.$$

В итоге получаем

$$g^{(n+1)}(t) = y^{(n+1)}(t) - [(n+1)!]r(x) = 0,$$

откуда следует

$$r(x) = \frac{y^{(n+1)}(t)}{(n+1)!}.$$

Имеется некоторая точка t , в которой имеет место последнее соотношение, определяющее искомую погрешность. Но о положении этой точки нельзя сказать ничего определенного.

Полученный результат можно использовать для оценки погрешности, вводя максимально возможную погрешность. Введем величину

$$M_{n+1} = \max |y^{(n+1)}(t)|,$$

где максимум производной берется по отрезку между наименьшим и наибольшим из значений x .

В результате для оценки погрешности получаем

$$|y_{(x)} - P(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |W(x)|.$$

2.6 Пример Рунге (опасность, возникающая при интерполяции полиномами)

На опасности, связанные с полиномиальной интерполяцией, впервые обратил внимание Рунге в 1901 году. Он пытался представить в виде многочлена в интервале $[-1, 1]$ простую функцию

$$y(x) = \frac{1}{1 + 25x^2},$$

при этом использовалось равномерное распределение узлов x_i . Полином 5-ой степени давал неудовлетворительный результат. Полином 20-ой степени приводил к хорошему соответствию с исходной функцией, но только в центральной части интервала, примерно при $-0.5 \leq x \leq 0.5$. Приближение к концам интервала $[-1, 1]$ вело к резкому расхождению полинома и исходной функции (рис. 2.1)

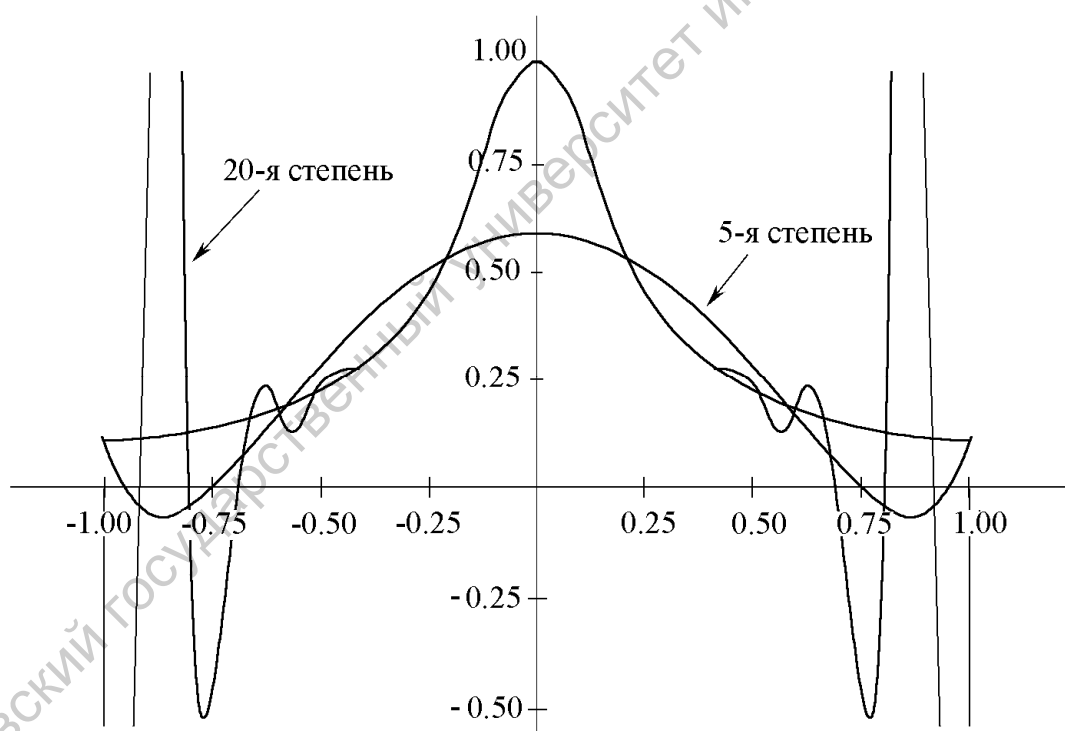


Рис. 2.1. Функция Рунге, интерполированная многочленами 5-ой и 20-й степени при равноудаленных абсциссах

Выяснилось, что при бесконечном увеличении порядка полинома ($n \rightarrow \infty$) последовательность $P(x)$ расходится при $0.726... \leq |x| \leq 1$. Было показано, что если узлы выбрать неравномерно, так чтобы вблизи концов интервала они помещались в корни

чебышевского полинома степени $(n+1)$, то проблема расходимости для функции Рунге исчезает, и полином $P(x)$ сходится к $y(x)$ при $n \rightarrow \infty$ для всех x из интервала $[-1, 1]$.

Полином Чебышева имеет вид

$$T_m(x) = \cos(m \arccos x), \quad x \in [-1, 1],$$

а его нули определяются формулой

$$x_k^{(m)} = \cos \frac{2k-1}{2m} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Разумеется, нет гарантии, что такой подход к решению проблемы расходимости полинома «сработает» для любой непрерывной функции. Однако показано, что если функция $y(x)$ имеет непрерывную производную на интервале $[-1, 1]$, то интерполяционный полином $P(x)$, совпадающий с $y(x)$ в корнях полинома Чебышева степени $(n+1)$, сходится при $n \rightarrow \infty$ для любой точки x из интервала $[-1, 1]$.

2.6 Сплайн-интерполяция

Мы по-прежнему исходим из того, что заданы узловые точки x_i и значения функции y_i в этих точках ($i=0,1,2,\dots,n$), и необходимо построить некую функцию $S(x)$, проходящую через заданные узлы и позволяющую рассчитать значения функции при любых x в интервале $[x_0, x_n]$.

Для проведения плавных кривых между заданными точками чертежники издавна использовали в качестве лекал сплайны. Механический сплайн представляет собой упругий длинный тонкий стержень, который закрепляется в заданных точках. Стержень принимает форму, минимизирующую его потенциальную энергию. В механике показано, что такой сплайн между любыми соседними закрепленными точками принимает форму кубического полинома. Такие полиномы соединяются в непрерывную линию, непрерывны их первые и вторые производные.

В теории интерполяции используется математический образ механического сплайна, т.е. моделируется известное механическое устройство.

Сплайном будем называть функцию $S(x)$, которая вместе со своими производными непрерывна на интервале $[x_0, x_n]$, а на каждом элементарном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ представляет собой алгебраический полином. Рассмотрим случай, когда между любыми соседними узлами используется полином 3-й степени. Такой сплайн называют естественным кубическим полиномом. Между $(n+1)$ узлами находится n элементарных отрезков, на каждом из которых нужно построить кубический полином (естественный сплайн). Кубический полином характеризуется четырьмя константами. Следовательно, необходимо определить $4n$ констант.

Будем искать на элементарном интервале $[x_{i-1}, x_i]$ естественный кубический сплайн в виде

$$S(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3,$$

где a_i , b_i , c_i , и d_i – коэффициенты, которые необходимо определить.

Первая и вторая производные сплайна имеют вид

$$S'(x) = b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2,$$

$$S''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1}).$$

Из условия (в узловых точках сплайн совпадает с заданным значением функции)

$$S(x_i) = y_i$$

находим

$$S(x_{i-1}) = a_i = y_{i-1}, \quad (*)$$

$$S(x_i) = a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i,$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Из условия непрерывности производных

$$S'(x_i - 0) = S'(x_i + 0),$$

$$S''(x_i - 0) = S''(x_i + 0)$$

получаем

$$b_{i+1} = b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2, \quad (**)$$

$$c_{i+1} = c_i + 3d_i h_i,$$

где $i = 1, 2, \dots, (n-1)$.

Уравнения (*) и (**) образуют систему для определения коэффициентов. Нетрудно видеть, что всего в системе $(4n - 2)$ уравнений. Недостающие до $4n$ два уравнения находятся из условия равенства нулю вторых производных при $x = x_0$ и $x = x_n$, т.е. на концах рассматриваемого интервала $[x_0, x_n]$:

$$c_1 = 0; \quad c_n + 3d_n h_n = 0.$$

Эти условия означают нулевую кривизну сплайна на концах интервала. Кубический сплайн при этом является самым гладким среди всех интерполяционных функций данного класса.

Полученную систему уравнений можно преобразовать следующим образом. Из второго уравнения в (**) следует

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}.$$

Подставляя найденное выражение для d_i в (*) и учитывая $a_i = y_{i-1}$, получаем

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

$$b_n = \frac{1}{h_n}(y_n - y_{n-1}) - \frac{2}{3}h_n c_n.$$

Подставляя выражение для b_i , b_{i+1} и d_i в первое уравнение в (***) находим уравнение для определения коэффициентов c_i

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

с условиями на концах $c_1 = 0$, $c_{n+1} = 0$.

Матрица полученной системы уравнений трехдиагональная, т.е. отличны от нуля лишь элементы на главной диагонали и на прилегающих сверху и снизу к ней диагоналях. При решении системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей используется метод прогонки, который будет описан ниже.

2.7 Метод наименьших квадратов

Метод наименьших квадратов обычно применяется в двух случаях:

- а) для оценки неизвестной величины по результатам измерений, содержащих случайные ошибки, т.е. это один из методов теории ошибок;
- б) для приближенного представления заданной функции другими функциями (более простыми).

Этот метод был предложен К. Гауссом (1794–1795) и А. Лежандром (1805–1806), но строгое обоснование метода было дано советскими математиками А.А. Марковым и А.Н. Колмогоровым.

В теории ошибок метод наименьших квадратов приводит к среднему арифметическому. Пусть некоторая величина x измеряется n раз. Результаты измерений

$$x_i = x + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где x – истинное значение величины, ε_i – случайная ошибка измерений.

Метод наименьших квадратов утверждает: наилучшее приближенное значение \bar{x} измеряемой величины есть такое число, для которого минимальна сумма квадратов отклонений от x_i

$$f(\bar{x}) = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

Минимум величины $f(\bar{x})$ определяется по обычным правилам

$$\frac{df}{d\bar{x}} = -2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n \bar{x}, \quad \sum_{i=1}^n \bar{x} = n\bar{x},$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

Среднее арифметическое значение измеряемой величины определяется формулой

$$x_{\text{cp}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i.$$

Следовательно, «метод наименьших квадратов» и «выбор среднего» эквивалентны.

Вернемся к проблеме представления таблично заданной функции аналитической функцией (часто это полином).

Пусть в результате какого-то опыта получено n экспериментальных данных (x_i, y_i) , т.е. имеем конечное число значений функций y_i в определенных узлах x_i . Задача остается прежней – получить явный вид функциональной зависимости $y(x)$ в определенном интервале значений x , используя полином

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m,$$

степень которого не превышает число измерений

$$m \leq n.$$

Ранее в качестве критерия «согласия» (см. начало этой главы) использовалось условие точного совпадения интерполяционного полинома с табличными значениями y_i в заданных узлах x_i :

$$P(x_i) = y_i.$$

Однако экспериментальные значения функции в узлах получены с определенной погрешностью и требование, чтобы искомая функциональная зависимость принимала в узловых точках значение y_i , может быть неоправданным. Целесообразно искать некоторую сглаженную кривую, не проходящую через узловые точки (x_i, y_i) , задав определенный критерий «согласия». В качестве такого критерия может выступать метод наименьших квадратов.

В учебной литературе часто задачи поиска функциональной зависимости $y(x)$ разделяют на два типа: задачи интерполяции и задачи аппроксимации. При интерполяции искомая функциональная зависимость должна удовлетворять условию

$$P(x_i) = y_i,$$

а при аппроксимации выполнение этого условия не обязательно, должен выполняться другой критерий «согласия». Таким образом, метод наименьших квадратов относят к задачам аппроксимации.

Напомним, что в простейшем понимании:

интерполяция – конструктивное восстановление функции определенного класса по известным ее значениям или значениям ее производных в данных точках;

аппроксимация – замена одних математических объектов другими, в том или ином смысле близкими к исходной.

Видно, что разделение задач интерполяции и аппроксимации в некотором смысле условно.

В соответствии с методом наименьших квадратов коэффициенты a_i в искомом многочлене следует брать такими, чтобы функция

$$f(a_0, a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n [y_i - P(x_i)]^2$$

принимала минимальные значения (в этом случае достигается наилучшее приближение).

Продифференцируем эту функцию по каждой a_k ($k=0,1,2,\dots,m$) и приравняем производную к нулю.

$$\frac{df}{da_k} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - P(x_i)] x_i^k = 0,$$

$$\sum_{i=1}^n y_i x_i^k = \sum_{i=1}^n P(x_i) x_i^k.$$

Подставим в последнее соотношение полином $P(x)$

$$\sum_{i=1}^n y_i x_i^k = a_0 \sum_{i=1}^n x_i^k + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^{k+1} + \dots + a_m \sum_{i=1}^n x_i^{k+m} = \sum_{j=0}^m \left(a_j \sum_{i=1}^n x_i^{k+j} \right).$$

Введем обозначения $S_k = \sum_{i=1}^n x_i^k$, $T_k = \sum_{i=1}^n y_i x_i^k$.

Тогда $\sum_{j=0}^m a_j S_{k+j} = T_k$, $k=0,1,2,\dots,m$

Получили нормальную систему $(m+1)$ линейных уравнений для определения коэффициентов a_k . Величины S_k и T_k , входящие в эти уравнения, целиком определяются через заданные значения x_i и y_i . Можно показать, что определитель этой системы отличен от нуля, и система уравнений имеет нетривиальное решение.

Рассмотрим пример (известный из литературы). Пусть при изучении некой химической реакции измерено количество вещества y (в процентах), оставшееся в системе через x минут от начала реакции. Результаты эксперимента сведены в таблицу.

x	7	12	17	22	27	32	37
y	83.7	72.9	63.2	54.7	47.5	41.4	36.3

Необходимо составить эмпирическую формулу

$$y = P(x).$$

Если по табличным данным построить график, то легко увидеть, что точки (x_i, y_i) на плоскости (x, y) примерно располагаются на параболе с вертикальной осью. Поэтому возьмем многочлен второй степени

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2.$$

В рассматриваемом случае $m=2$ – степень полинома, $n=7$ – число измерений, нормальная система уравнений имеет вид

$$S_0a_0 + S_1a_1 + S_2a_2 = T_0,$$

$$S_1a_0 + S_2a_1 + S_3a_2 = T_1,$$

$$S_2a_0 + S_3a_1 + S_4a_2 = T_2.$$

Вычисляем коэффициенты этой системы

$$S_0 = \sum_1^7 x_i^0 = 7,$$

$$S_1 = \sum_1^7 x_i = 154,$$

$$S_2 = \sum_1^7 x_i^2 = 4088 \text{ и т.д.},$$

$$T_0 = \sum_1^7 x_i^0 y_i = \sum_1^7 y_i = 399.7 \text{ и т.д.}$$

В итоге система уравнений принимает вид

$$7a_0 + 154a_1 + 4088a_2 = 399.7$$

$$154a_0 + 4088a_1 + 120736a_2 = 7688.9$$

$$4088a_0 + 20736a_1 + 3795092a_2 = 186054.3$$

Решение системы

$$a_2 = 0.023381,$$

$$a_1 = -2.6066,$$

$$a_0 = 100.791.$$

Уже из этого простейшего примера видно, что недостатком метода наименьших квадратов являются громоздкие вычисления. К этому методу обычно прибегают при обработке наблюдений высокой точности, когда нужно получить весьма точные значения параметров. Заметим, что промежуточные вычисления нужно проводить с надлежащим количеством десятичных знаков.

2.8 Полиномы на базе ортогональных систем функций

Если степень алгебраического аппроксимирующего полинома весьма велика, то его отыскание требует громоздких вычислений. Заслуживает внимания другой подход, основанный на применении ортогональных функций.

Система интегрируемых функций

$$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x) \dots \varphi_n(x)$$

называется ортогональной на отрезке $[a, b]$, если

$$\int_a^b \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = 0, \text{ при } m \neq n.$$

Число (при $m = n$)

$$\|\varphi_m(x)\| = \sqrt{\int_a^b \varphi_m^2(x) dx}$$

называется нормой функций $\varphi_m(x)$ на отрезке $[a, b]$. Если для всех функций $\|\varphi_m(x)\| = 1$, то система называется ортонормированной.

Обобщенный полином ищется в виде

$$Q(x) = c_0 \varphi_0(x) + c_1 \varphi_1(x) + \dots + c_m \varphi_m(x) = \sum_{i=0}^m c_i \varphi_i(x),$$

где система функций $\{\varphi_i(x)\}$ ортогональна на отрезке $[a, b]$.

С помощью такого обобщенного полинома можно провести квадратичную аппроксимацию данной непрерывной функции $f(x)$ на заданном отрезке $[a, b]$.

Коэффициенты c_i подбираются так, чтобы согласно метода наименьших квадратов квадратичное отклонение полинома $Q(x)$ от функции $f(x)$

$$I = \int_a^b [Q(x) - f(x)]^2 dx$$

имело наименьшее значение. Минимум величины

$$I = I(c_0, c_1, c_2 \dots c_m)$$

ищется обычным способом

$$I = \int_a^b \left[\sum_{i=0}^m c_i \varphi_i(x) - f(x) \right]^2 dx,$$

$$\frac{dI}{dc_j} = 2 \int_a^b \left[\sum_{i=0}^m c_i \varphi_i(x) - f(x) \right] \varphi_j(x) dx = 0,$$

где $j = 0, 1, 2 \dots m$ и мы имеем систему $(m+1)$ уравнений.

После несложных преобразований имеем

$$\sum_{i=0}^m c_i \int_a^b \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = \int_a^b f(x) \varphi_j(x) dx.$$

В силу ортогональности

$$\int_a^b \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = 0, \text{ при } i \neq j.$$

Полагая, что среди функций $\varphi_i(x)$ нет функций с нулевой нормой $\|\varphi_i(x)\| \neq 0$, получаем

$$c_j = \frac{\int_a^b f(x) \varphi_j(x) dx}{\int_a^b \varphi_j^2(x) dx}.$$

В случае ортонормированной системы функций

$$c_j = \int_a^b f(x) \varphi_j(x) dx, \quad j = 0, 1, 2 \dots m.$$

Коэффициенты c_j называют коэффициентами Фурье функции $f(x)$ относительно заданной ортогональной системы $\{\varphi_i(x)\}$. Обобщенный полином с коэффициентами Фурье данной функции обладает наименьшим квадратичным отклонением от этой функции.

Отметим два свойства обобщенного полинома $Q(x)$:

– при увеличении числа слагаемых полинома (увеличение m) ранее рассчитанные коэффициенты c_i остаются неизменными, их не нужно пересчитывать;

– присоединение новых слагаемых увеличивает точность аппроксимации.

Часто в качестве базисной ортогональной системы функций используют тригонометрические функции

$$1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, \dots, \sin nx, \cos nx.$$

Эта система функций ортогональна на любом отрезке длиной 2π , например, на отрезке $[-\pi, \pi]$. В том легко убедиться, вычислив интегралы при $m \neq n$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nxdx = 0, \quad \int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nxdx = 0.$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \sin nx = 0, \quad \int_{-\pi}^{\pi} 1 \cdot \cos nxdx = 0, \quad \int_{-\pi}^{\pi} 1 \cdot \sin nxdx = 0.$$

Квадраты норм функций

$$\|1\|^2 = 2\pi, \quad \|\sin nx\|^2 = \pi, \quad \|\cos nx\|^2 = \pi.$$

Если дана непрерывная периодическая функция $f(x)$ с периодом 2π , то обобщенный полином обычно записывается в виде

$$Q(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^n (a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad k = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Чтобы квадратичное отклонение полинома $Q(x)$ от функции $f(x)$ было минимальным, коэффициенты a_0, a_k, b_k должны быть коэффициентами Фурье функции $f(x)$ относительно системы тригонометрических функций

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos kxdx, \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin kxdx.$$

Заметим, что при построении обобщенного полинома $Q(x)$ можно исходить не из идеи ортогональных функций, а из требования прохождения полинома через узловые точки (x_i, y_i) , где $y_i = f(x_i)$.