Глава 3. ПРИБЛИЖЕНИЕ ФУНКЦИЙ.

Пусть на отрезке $[a,b]$ определена некоторая функция $y = f(x)$, однако полная информация о ней недоступна. Известны лишь ее значения в конечном числе точек $x_0, x_1, \ldots x_n$, этого отрезка, которые мы будем считать занумерованными в порядке возрастания:

$$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_i < x_{i+1} < \ldots x_n \le b . \tag{1}$$

Требуется по известным значениям

$$y_i = f(x_i),\ i = 0,1,\ldots,n \tag{2}$$

«восстановить», хотя бы приближенно, исходную функцию $y = f(x)$, то есть построить на отрезке $[a,b]$ функцию $F(x)$, достаточно близкую к $f(x)$. Функцию $F(x)$ принято называть интерполирующей функцией, точки $x = x_0, x = x_1, \ldots x = x_n$ - узлами интерполяции.

Подобные задачи часто возникают на практике, например, при обработке экспериментальных данных, когда значения переменной y, зависящей от x, измеряется в конечном числе точек x_i: $y_i = f\left(x_i\right)$, $\left(i = 0,1,\ldots,n\right)$ или при работе с табличными функциями, если требуется вычислить $y = f(x)$, при значениях аргумента , не совпадающего ни с одним из табличных x_i.

Поставленный выше в общей форме вопрос о приближении функций является достаточно сложным. Существует не один подход к его решению. Мы ограничимся изложением трех наиболее распространенных методов.

§1. Интерполирование.

1.1. Классическая постановка задачи интерполирования.

Выберем некоторую систему функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots \varphi_n(x)$, заданных на отрезке $\left[a,b\right]$, и будем строить $F(x)$ как их линейную комбинацию:

$$F(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i(x), \tag{3}$$

где числовые коэффициенты c_i $(i = 0,1,\ldots n)$ подлежат определению, согласно условиям:

$$F(x_j) = f(x_j),\ j = 0,1,\ldots,n . \tag{4}$$

Равенства (4) представляют собой систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов c_i:

$$\sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i(x_j) = f(x_j),\ j = 0,1,\ldots,n$$

или в развернутом виде:

$$\begin{cases} c_0\varphi_0(x_0)+c_1\varphi_1(x_0)+\ldots+c_n\varphi_n(x_0)=f(x_0) \\ c_0\varphi_0(x_1)+c_1\varphi_1(x_1)+\ldots+c_n\varphi_n(x_1)=f(x_1) \\ \vdots \\ c_0\varphi_0(x_n)+c_1\varphi_1(x_n)+\ldots+c_n\varphi_n(x_n)=f(x_n) \end{cases}. \tag{5}$$

Для того, чтобы коэффициенты c_i $(i=0,1,\ldots n)$ можно было определить и притом единственным образом, необходимо и достаточно, чтобы определитель полученной системы линейных уравнений был отличен от нуля:

$$\Delta=\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \ldots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \ldots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \ldots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix}\neq 0. \tag{6}$$

Определение.
Система функций $\varphi_i(x)$ $(i=0,1,\ldots n)$, *удовлетворяющая при фиксированных значениях* $x_j\,(j=0,1,\ldots n)$ *условию (6), называется Чебышевской.*

Очевидно, что для однозначной разрешимости задачи интерполирования в классической постановке необходимо и достаточно, чтобы система функций $\varphi_i(x)$ $(i=0,1,\ldots n)$ была Чебышевской. Только такие системы функций мы и будем использовать в этой главе. Необходимым условием принадлежности системы функций $\varphi_i(x)\,(i=0,1,\ldots n)$ к Чебышевской является их линейная независимость. Однако это условие не является достаточным. Например, для системы из двух линейно независимых функций $\varphi_0(x)=\sin x$, $\varphi_1(x)=\cos x$, с узлами интерполяции $x_0=0,\ x_1=\pi,$ определитель

$$\Delta=\begin{vmatrix} \sin x_0 & \cos x_0 \\ \sin x_1 & \cos x_1 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}=0$$

и данная система функций при выбранных значениях x_0 и x_1 не является Чебышевской.

1.2. Интерполирование полиномами.

При построении интерполирующей функции $F(x)$ в виде (3) функции $\varphi_i(x)$, естественно, выбираются такими, чтобы их вычисление было простым. В частности, широкое распространение получило интерполирование с помощью степенных функций:

$$\varphi_0(x)=1;\quad \varphi_1(x)=x;\quad \varphi_2(x)=x^2,\quad \ldots\quad \varphi_n(x)=x^n.$$

В этом случае интерполирующая функция представляет собой полином степени n:

$$F(x)=P_n(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i x^i \tag{7}$$

с неизвестными коэффициентами c_i ($i=0,1,\ldots n$).

Согласно рассмотренной выше общей схеме построения интерполирующей функции, следует потребовать, чтобы коэффициенты c_i с учетом (7) удовлетворяли системе линейных уравнений:

$$\sum_{i=0}^{n} c_i x_j^i = f(x_j), \; j = 0,1,\ldots,n. \tag{8}$$

Определителем этой системы является определитель Ван-дер- Монда:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{i>j} (x_i - x_j).$$

В нашем случае этот определитель отличен от нуля, поскольку, согласно (1), все узлы интерполирования различны между собой. Итак, интерполирование с помощью полиномов при сделанных в начале главы предположениях всегда осуществимо и притом единственным образом.

Задача 1.

Построить линейный полином

$$P_1(x) = c_0 + c_1 x$$

по заданным узлам интерполяции $x_0 < x_1$ *и соответствующим им значениям функции*

$$y_0 = f(x_0) \text{ и } y_1 = f(x_1).$$

Линейная система уравнений для определения c_0 и c_1 в данном случае имеет вид:

$$c_0 + c_1 x_0 = f(x_0),$$
$$c_0 + c_1 x_1 = f(x_1).$$

Определитель этой системы равен $\Delta = x_1 - x_0 \neq 0$. Решив систему, получим:

$$c_0 = \frac{x_1 f(x_0) - x_0 f(x_1)}{x_1 - x_0}; \quad c_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Следовательно,

$$P_1(x) = \frac{x_1 f(x_0) - x_0 f(x_1)}{x_1 - x_0} + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} x. \tag{9}$$

Перепишем этот полином в несколько другой форме, выделяя $f(x_0)$ и $f(x_1)$ в качестве множителей

$$P_1(x) = f(x_0)\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}. \tag{10}$$

Геометрический образ интерполирующей функции $P_1(x)$ - прямая, проходящая на плоскости (x, y) через точки с координатами (x_0, y_0) и (x_1, y_1). Уравнение этой прямой, наряду с (9) и (10), можно переписать в виде:

$$y = P_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0). \tag{11}$$

Из данного примера видно, что всегда существуют различные эквивалентные между собой формы записи интерполяционного полинома, удобные в различных ситуациях.

1.3. Построение интерполяционного полинома в форме Лагранжа.

Интерполяционный полином первой степени (9) мы построили, решая напрямую систему двух уравнений с двумя неизвестными - коэффициентами c_0 и c_1. Однако решить таким же образом систему (8) при произвольном n технически очень сложно. Проще сделать это с помощью специальных методов, учитывающих особенности рассматриваемой задачи. Один из таких методов, принадлежащих Лагранжу, мы и рассмотрим в этом разделе.

Представим искомый полином $P_n(x)$ в виде:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) Q_{n,i}(x), \tag{12}$$

где $Q_{n,i}(x)$ полиномы степени n, «ориентированные» на точки x_i в том смысле, что

$$Q_{n,i}(x) = \begin{cases} 0, & x = x_j \quad \forall j \neq i, \\ 1, & x = x_i. \end{cases} \tag{13}$$

Такие полиномы легко построить:

$$Q_{n,i}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{j=n} \frac{\left(x - x_j\right)}{\left(x_i - x_j\right)} \tag{14}$$

или в развернутом виде:

$$\begin{aligned} Q_{n,0}(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)\ldots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\ldots(x_0-x_n)}, \\ Q_{n,i}(x) &= \frac{(x-x_0)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)}, \\ Q_{n,n}(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\ldots(x_n-x_{n-1})}. \end{aligned} \tag{15}$$

Иногда нам будет удобно записывать $Q_{n,i}(x)$ в виде:

$$Q_{n,i}(x) = \frac{(x-x_0)\ldots[i]\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\ldots[i]\ldots(x_i-x_n)}.$$

Из выражения (12) и формул (13) очевидно, что построенный полином $P_n(x)$ действительно является интерполяционным полиномом для функции $y = f(x)$ на сетке с узлами $x_0, x_1, ..., x_n$. Его принято называть интерполяционным полиномом в форме Лагранжа. Этим подчеркивается, что возможны и другие эквивалентные представления интерполяционного полинома $P_n(x)$. С одним из них мы познакомимся в следующем разделе.

В заключение отметим, что из трех различных представлений интерполяционного полинома первой степени (9)- (11) формула (10) дает его запись в форме Лагранжа.

Задача 2.

Написать интерполяционный полином второй степени для функции $y = \sin x$ *по ее значениям в трех точках:* $x_0 = 0$, $x_1 = \pi/6$, $x_2 = \pi/2$. *Вычислить с помощью этого полинома приближенное значение синуса в точке* $x = \pi/4$, *сравнить полученный результат с точным значением синуса и подсчитать погрешность* $R_2\left(\frac{\pi}{4}\right)$.

Воспользуемся для записи полинома формулой Лагранжа (12). В рассматриваемом случае $y_0 = \sin x_0 = 0$, так что в формуле останется только два слагаемых соответствующих точкам x_1 и x_2. В результате получим:

$$P_2(x) = \frac{1}{2}\frac{x\left(x - \frac{\pi}{2}\right)}{\frac{\pi}{6}\left(-\frac{\pi}{3}\right)} + \frac{x\left(x - \frac{\pi}{6}\right)}{\frac{\pi}{2}\left(\frac{\pi}{3}\right)} = \frac{x}{\pi^2}\left(\frac{7\pi}{2} - 3x\right) \tag{16}$$

Перейдем к выполнению второй части задания. Вычислим с помощью интерполяционного полинома (16) приближенное значения синуса в точке $x = \pi/4$ и подсчитаем погрешность:

$$P_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{11}{16},\ R_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{11}{16} = 0.0197 < 0.02\,. \tag{17}$$

На рис. 1 приведены для сравнения графики функций $\sin x$ (сплошная линия) и $P_2(x)$ (пунктир).

1.4. Интерполяционный полином в форме Ньютона.

Интерполяционный полином в форме Лагранжа, несмотря на своё изящество, неудобен для вычислений тем, что при увеличении числа узлов интерполяции приходится перестраивать весь полином заново.

Перепишем интерполяционный полином Лагранжа в иной, эквивалентной форме

$$P_n(x) = P_0(x) + \sum_{i=1}^{n}(P_i(x) - P_{i-1}(x)), \tag{18}$$

где $P_i(x)$ - полиномы Лагранжа степени $i \le n$, соответствующие узлам интерполирования $x_0, x_1, \ldots x_i$. В частности, $P_0(x) = f(x_0)$ - полином нулевой степени.

Полином

$$Q_i(x) = P_i(x) - P_{i-1}(x) \tag{19}$$

имеет степень i и по построению обращается в ноль при $x = x_0, x = x_1, \ldots x = x_{i-1}$, поэтому его можно представить в виде

$$Q_i(x) = A_i(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{i-1}), \tag{20}$$

где A_i - числовой коэффициент при x^i. Поскольку $P_{i-1}(x)$ не содержит степени i, то A_i просто совпадает с коэффициентом при x^i в полиноме $P_i(x)$. Согласно (12) и (15) его можно записать в виде

$$A_i = \sum_{k=0}^{i}\frac{f(x_k)}{\omega_{k,i}}, \tag{21}$$

где

$$\omega_{k,i} = (x_k - x_0)\dots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\dots(x_k - x_i). \tag{22}$$

При этом

$$A_0 = f(x_0). \tag{23}$$

Формулы (19) и (21) позволяют написать рекуррентное соотношение для полинома $P_n(x)$:

$$P_n(x) = P_{n-1}(x) + A_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \tag{24}$$

Выражая аналогичным образом по индукции $P_{n-1}(x)$ через $P_{n-2}(x)$, $P_{n-2}(x)$ через $P_{n-3}(x)$ и т. д., получим окончательную формулу для полинома $P_n(x)$:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= A_0 + A_1(x - x_0) + A_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &+ A_i(x - x_0)\dots(x - x_{i-1}) + \dots + A_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \end{aligned} \tag{25}$$

Представление (25) удобно для вычислителя, поскольку увеличение n на единицу требует только добавления к «старому» многочлену одного дополнительного слагаемого. Такое представление интерполяционного полинома $P_n(x)$ называют интерполяционным полиномом в форме Ньютона.

Из трех эквивалентных представлений интерполяционного полинома первой степени (9) - (11) формула (11) дает его запись в форме Ньютона.

Задача 3.

Написать интерполяционный полином второй степени в форме Ньютона для функции $y = \sin x$ по ее значениям в трех точках: $x_0 = 0$, $x_1 = \pi/6$, $x_2 = \pi/2$ (см. задачу 2).

Согласно формуле (25)

$$P_2(x) = A_0 + A_1 x + A_2 x\left(x - \frac{\pi}{6}\right). \tag{26}$$

Коэффициенты в этом разложении вычисляются по формулам (21) и(23):

$$A_0 = 0,\; A_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{6}{\pi}\right),\; A_2 = -\frac{18}{2\pi^2} + \frac{6}{\pi^2} = -\frac{3}{\pi^2}. \tag{27}$$

Подставляя найденные значения коэффициентов в формулу (26), получим

$$P_2(x) = \frac{3}{\pi}x - \frac{3x}{\pi^2}\left(x - \frac{\pi}{6}\right) = \frac{x}{\pi^2}\left(\frac{7\pi}{2} - 3x\right). \tag{28}$$

Первоначальные выражения для интерполяционного полинома в форме Лагранжа и Ньютона различны, но окончательные ответы, естественно, совпадают.

1.5. Погрешность интерполирования.

Поставим вопрос о том, насколько хорошо интерполяционный полином $P_n(x)$ приближает функцию $f(x)$ на отрезке $[a,b]$, то есть попытаемся оценить погрешность (остаточный член)

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x),\; x \in [a,b]. \tag{29}$$

Сразу же отметим, что по определению интерполяционного полинома

$$R_n(x_i) = 0 \text{ при } i = 0,1,\dots,n, \tag{30}$$

поэтому речь идет об оценке $R_n(x)$ при значениях $x \neq x_i$.

Для того, чтобы это сделать, следует ввести дополнительно предположение о гладкости функции $f(x)$. Предположим, что $f(x)$ имеет $(n+1)$ непрерывную производную на отрезке $[a,b]$.

В силу (30) $R_n(x)$ можно представить в виде:

$$R_n(x) = \omega_{n+1}(x) r_n(x), \tag{31}$$

где $\omega_{n+1}(x)$ - полином степени $(n+1)$:

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n). \tag{32}$$

Зафиксируем произвольное значение $x \in [a,b]$ и рассмотрим вспомогательную функцию от переменной t:

$$g(t) = f(t) - P_n(t) - \omega_{n+1}(t) r_n(x),$$

заданную на отрезке $[a,b]$ и содержащую переменную x в качестве параметра. В силу своего определения функция $g(t)$ обязана обращаться в нуль в узлах интерполирования при $t = x_i$ и кроме того при $t = x$, т. е. как функция аргумента t она имеет $(n+2)$ нуля:

$$g(x_i) = 0,\ i = 0,1,\dots,n,\ g(x) = 0. \tag{33}$$

Если $x \in [x_0, x_n]$, то все ее нули также лежат на отрезке $[x_0, x_n]$. Если $x < x_0$, то эти нули, вообще говоря, принадлежат отрезку $[x, x_n]$, а если $x > x_n$, то они находятся на отрезке $[x_0, x]$. Объединяя эти три случая, скажем, что указанные нули функции $g(t)$ принадлежат отрезку $[\alpha, \beta]$, где $\alpha = \min(x_0, x) \ge a$, $\beta = \max(x_n, x) \le b$.

Согласно известной теореме Ролля можно утверждать, что производная $g'(t)$ имеет по крайней мере $(n+1)$ нуль на отрезке $[\alpha,\beta]$ (эти нули перемежаются с нулями самой функции $g(t)$). Повторяя это рассуждение, заключаем, что $g''(t)$ имеет по крайней мере n нулей на отрезке $[\alpha,\beta]$, $g'''(t)$ - $(n-1)$ нуль и, наконец, $g^{(n+1)}(t)$ обращается хотя бы один раз в нуль в некоторой точке $t = \xi \in [\alpha,\beta]$, то есть

$$g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - P_n^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!\, r_n(x) = 0.$$

Учитывая, что $(n+1)$ производная полинома степени n тождественно равна нулю, получаем, что

$$r_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!};\ \xi \in [\alpha,\beta] \tag{34}$$

и соответственно

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x). \tag{35}$$

Формула (35) не позволяет вычислить погрешность, поскольку точное значение аргумента ξ нам неизвестно. Однако с ее помощью погрешность можно оценить:

$$\left|R_n(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|\omega_{n+1}(x)\right|, \tag{36}$$

где

$$M_{n+1} = \max_{x\in[\alpha,\beta]}\left|f^{(n+1)}(x)\right| \le \max_{x\in[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|. \tag{37}$$

Обсудим роль полинома $\omega_{n+1}(x)$ (32) в оценке (36). На отрезке $\left[x_0, x_n\right]$ он имеет $\left(n+1\right)$ нуль, а его значения между этими нулями сравнительно невелики, но, когда точка x выходит за пределы отрезка $\left[x_0, x_n\right]$ и удаляется от точки x_0 влево или от точки x_n вправо, оценка (36) ухудшается из-за быстрого роста функции $\left|\omega_{n+1}(x)\right|$. Это хорошо видно на рис. 2, где в качестве примера приведен график функции $\omega_4\left(x\right)$ с корнями $x_0 = -3/2$, $x_1 = -1/2$, $x_2 = 1/2$, $x_3 = 3/2$:

$$\omega_4\left(x\right) = \left(x^2 - \frac{9}{4}\right)\left(x^2 - \frac{1}{4}\right).$$

Ее наибольшее по модулю значение на отрезке $\left[-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right]$ равно единице. Однако уже в точках $x = \pm 2$ за пределами отрезка полином $\omega_4(x)$ принимает значение

$$\omega_4(\pm 2) = \frac{105}{16} = 6.5625.$$

Из сказанного можно сделать следующий вывод. Если $x \in \left[x_0, x_n\right]$, то множитель $\left|\omega_{n+1}(x)\right|$ не обесценивает оценку (36). Такой случай называют собственно интерполяцией $f(x)$. Противоположный случай, когда точка x лежит вне отрезка называют экстраполяцией функции $f(x)$. Отмеченная выше особенность поведения полинома $\omega_{n+1}(x)$ резко ухудшает оценку (36) при экстраполяции. Поэтому на практике экстраполяции избегают или ограничиваются многочленами невысокой степени $\left(n = 1, 2\right)$, когда рост функции $\left|\omega_{n+1}(x)\right|$ не настолько критичен.

Задача 4.

Написать мажорантную оценку для погрешности (36) при вычислении приближенного значения $\sin x$ *в точке* $x = \pi/4$ *с помощью интерполяционного полинома второй степени* $P_2\left(x\right)$ *(16). Сравнить ее с погрешностью (17), подсчитанной непосредственно.*

Формула для погрешности (35) принимает в данном случае вид:

$$R_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{6}\left(-\cos\xi\right)\omega_3\left(\frac{\pi}{4}\right) = \cos\xi\,\frac{\pi^3}{1152},\ 0 \le \xi \le \frac{\pi}{2}.$$

Она правильно определяет знак погрешности, но не позволяет вычислить ее величину, поскольку значение аргумента ξ неизвестно. Чтобы получить мажорантную оценку погрешности (36), нужно заменить $\cos\xi$ на его наибольшее значение – единицу. В результате будем иметь:

$$R_2\left(\frac{\pi}{4}\right) \le \frac{\pi^3}{1152} < 0.027\,.$$

Эта оценка согласуется с величиной погрешности (17), вычисленной «в лоб».

1.6. О сходимости интерполяционного процесса.

Поставим вопрос, будут ли сходится интерполяционные полиномы $P_n(x)$ к интерполируемой функции $f(x)$ на отрезке $[a,b]$ при неограниченном возрастании числа узлов n.

Упорядоченное множество точек x_i, $i = 0,1,\ldots n$ (1) назовем сеткой на отрезке $[a,b]$ и обозначим для краткости Ω_n. Рассмотрим последовательность сеток с возрастающим числом узлов:

$$\Omega_0 = \left\{x_0^{(0)}\right\},\;\; \Omega_1 = \left\{x_0^{(1)}, x_1^{(1)}\right\}, \ldots, \Omega_n = \left\{x_0^{(n)}, x_1^{(n)} \ldots x_n^{(n)}\right\}, \ldots$$

и отвечающую ей последовательность интерполяционных полиномов $P_n(x)$, построенных для фиксированной непрерывной на отрезке $[a,b]$ функции $f(x)$.

Интерполяционный процесс для функции сходится в точке $x_* \in [a,b]$, если существует предел

$$\lim_{n\to\infty} P_n(x_*) = f\left(x_*\right).$$

Наряду с обычной сходимостью часто рассматривается сходимость в различных нормах. Так, равномерная сходимость на отрезке $[a,b]$ означает, что

$$\max_{x\in[a,b]} \left| f(x) - P_n(x) \right| \to 0 \text{ при } n \to \infty\,.$$

Сходимость или расходимость интерполяционного процесса зависит как от выбора последовательности сеток, так и от гладкости функции $f(x)$. Если $f(x)$ - целая аналитическая функция, то при произвольном расположении узлов на отрезке $[a,b]$ интерполяционный многочлен $P_n(x)$ равномерно сходится к $f(x)$ при $n \to \infty$.

Положение резко меняется, если производные функции разрывны или не существуют в отдельных точках. Например для функции $f(x) = |x|$ на отрезке $[-1,1]$, покрытом равномерной сеткой узлов, значения $P_n(x)$ между узлами интерполяции неограниченно возрастают при $n \to \infty$. Вместе с тем, для заданной непрерывной функции $f(x)$ за счет выбора сеток можно добиться сходимости и притом равномерной на $[a,b]$. Однако построение таких сеток довольно сложно и, главное, такие сетки «индивидуальны» для каждой конкретной функции.

Если заметить дополнительно, что объем вычислений при построении интерполяционного полинома быстро нарастает с ростом n, то становится понятно, что на практике вычислители избегают пользоваться интерполяционными полиномами высокой степени. Вместо этого, в случае необходимости, при больших значениях n используется кусочно-полиномиальная интерполяция, которую мы обсудим в следующем параграфе.

1.7. Интерполяционный полином Эрмита.

Расширим постановку задачи об интерполяции. Ранее полагалось, что в узлах интерполяции заданы только значения функции $f(x)$. Пусть теперь в узлах $x_k \in [a,b]$, $k = 0,1,\ldots m$, среди которых нет совпадающих, заданы значения функции $f(x_k)$, и её производных $f^{(i)}(x_k)$, $i = 1,2,\ldots,N_k - 1$ до $(N_k - 1)$-го порядка включительно. Числа N_k при этом называют кратностью узла x_k. В каждой точке x_k, таким образом, задано N_k величин:

$$f(x_k), f'(x_k), \ldots f^{(N_k-1)}(x_k).$$

В общей сложности на всей совокупности узлов $x_0, x_1, \ldots, x_m$ известно $N_0 + N_1 + \ldots + N_m$ величин, что дает возможность ставить вопрос о построении полинома $H_n(x)$ степени

$$n = N_0 + \ldots + N_m - 1, \tag{38}$$

удовлетворяющего требованиям:

$$H_n^{(i)}(x_k) = f^{(i)}(x_k),\ k = 0,1,\ldots,m,\ i = 0,1,\ldots,N_k - 1. \tag{39}$$

Такой полином называется интерполяционным полиномом Эрмита для функции $f(x)$. Рассмотренный ранее вариант построения интерполяционного полинома $P_n(x)$ по известным значениям функции $f(x)$ в узлах интерполяции является частным случаем построения полинома Эрмита при условии, что все узлы простые: $N_k = 1$, $k = 0,1,\ldots,m$.

Докажем, что интерполяционный полином Эрмита существует и является единственным. Представим его в стандартном виде

$$H_n(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n.$$

Наше утверждение будет справедливо, если показать, что коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_n$ определяются из условий (39) и притом единственным образом. Условия (39) представляют собой систему линейных алгебраических уравнений относительно этих коэффициентов, причем число уравнений и число неизвестных равны $N_0 + N_1 + \ldots + N_m = n + 1$.

Рассмотрим соответствующую однородную систему

$$\bar{H}_n^{(i)}(x_k) = 0,\ k = 0,1,\ldots,m,\ i = 0,1,\ldots,N_k - 1. \tag{40}$$

Уравнения (40) просто указывают на то, что числа x_k являются корнями полинома $\bar{H}_n(x)$ кратности N_k. Мы видим, таким образом, что полином $\bar{H}_n(x)$ имеет, с учетом кратности, не менее $N_0 + N_1 + \ldots + N_m = n + 1$ корней. Поскольку его степень равна n, то он должен тождественно равняться нулю. Это означает, что $\bar{a}_0 = \bar{a}_1 = \ldots = \bar{a}_n = 0$, т.е. однородная система уравнений (40) имеет только тривиальное решение. Отсюда следует, что неоднородная система (39) при любой правой части разрешима и при том единственным образом.

Исследование погрешности интерполирования полинома Эрмита $R_n(x) = f(x) - H_n(x)$ почти дословно повторяет проведенное ранее исследование для полинома с простыми узлами x_k, в которых заданы только $f(x_k)$. Достаточно представить $R_n(x)$ в виде

$$R_n(x) = r_n(x)\omega_{n+1}(x), \tag{41}$$

где

$$\omega_{n+1}(x) = \left(x - x_0\right)^{N_0}\left(x - x_1\right)^{N_1}\ldots\left(x - x_m\right)^{N_m},\ n+1 = N_0 + \ldots + N_m \tag{42}$$

и рассмотреть функцию

$$g(t) = f(t) - H_n(t) - r_n(x)\omega_{n+1}(t).$$

Применяя теорему Ролля к функции $g(t)$ и ее производным с учетом кратности корней в узлах $t = x_k$ и условия $g(x) = 0$ придем к формуле

$$f(x) - H_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \tag{43}$$

которая по существу повторяет формулу (35). С ее помощью можно написать оценку типа (36):

$$\left|R_n(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|\omega_{n+1}(x)\right|, \tag{44}$$

где M_{n+1} - максимальное значение модуля функции $f^{(n+1)}\left(x\right)$ (37). Здесь полином $\omega_{n+1}(x)$ (42) является обобщением полинома (32) на случай кратных корней.

Построение полинома Эрмита в общем случае при произвольном числе узлов и их кратности приводит к довольно громоздким выражениям и редко используется. Поэтому мы ограничимся двумя примерами, встречающимися на практике.

Пример 1

Построить интерполяционный полином Эрмита для функции $f(x)$ по известным значениям в узлах $f(x_k) = f_k$, $k = 0,1,\ldots,m$ и значению $f'(x_j) = f'_j$ в одном из узлов $x = x_j$.

Степень полинома $H_n(x)$ в данном случае равна $m+1$.

Будем искать $H_{m+1}(x)$ в виде

$$H_{m+1}(x) = \sum_{\substack{k=0\\k\ne j}}^{m} f_k \frac{(x-x_0)\ldots[k]\ldots(x-x_m)}{(x_k-x_0)\ldots[k]\ldots(x_k-x_m)}\left(\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right) +$$

$$+\left[f_j + \alpha_j\left(x - x_j\right)\right]\frac{(x-x_0)\ldots[j]\ldots(x-x_m)}{(x_j-x_0)\ldots[j]\ldots(x_j-x_m)}.$$

Здесь выражения, стоящие под знаком суммы, суть обычные составляющие полинома в форме Лагранжа в узлах x_k, $k \ne j$, «усиленные» дополнительными множителями $(x-x_j)\big/(x_k-x_j)$. Слагаемое, отвечающее кратному узлу $x = x_j$, выделено отдельно как особое. Постоянная α_j подлежит определению.

Из структуры $H_{m+1}(x)$ видно, что $H_{m+1}(x_i) = f_i$, $i = 0,1,\ldots,m$. Найдем производную $H'_{m+1}(x_j)$ в узле $x = x_j$. Слагаемые, стоящие под знаком суммы, содержат множители $\left(x - x_j\right)^2$ и потому их производные обращаются в нуль при $x = x_j$. Таким образом,

$$H'_{m+1}(x_j) = f_j\left(\frac{1}{x_j - x_0} + \ldots + \frac{1}{x_j - x_{j-1}} + \frac{1}{x_j - x_{j+1}} + \ldots + \frac{1}{x_j - x_m}\right) + \alpha_j . \tag{45}$$

Для соблюдения требования $H'_{m+1}(x_j) = f'_j$ следует положить

$$\alpha_j = f'_j - f_j A_j ,$$

где для краткости обозначено

$$A_j = \frac{1}{x_j - x_0} + \ldots + \frac{1}{x_j - x_{j-1}} + \frac{1}{x_j - x_{j+1}} + \ldots + \frac{1}{x_j - x_m} . \tag{46}$$

Итак:

$$\begin{aligned} H_{m+1}(x) = {} & \sum_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{m} f_k \frac{(x-x_0)\ldots[k]\ldots(x-x_m)}{(x_k-x_0)\ldots[k]\ldots(x_k-x_m)}\left(\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right) + \\ & + \left[f_j + \left(f'_j - f_j A_j\right)\left(x - x_j\right)\right]\frac{(x-x_0)\ldots[j]\ldots(x-x_m)}{(x_j-x_0)\ldots[j]\ldots(x_j-x_m)} . \end{aligned} \tag{47}$$

Пример 2.

Построить интерполяционный полином Эрмита для функции $f(x)$ в случае, когда во всех узлах интерполяции x_k, $k = 0,1,\ldots,m$ заданы значения функции $f(x_k) = f_k$ и ее первой производной $f'(x_k) = f'_k$.

В данном случае $N_k = 2$, $k = 0,1,\ldots,m$, так что степень полинома $H_n(x)$ равна $2m+1$.

Запишем исходный полином в виде:

$$H_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^{m}\left[f_k + \alpha_k\left(x - x_k\right)\right]\frac{(x-x_0)^2\ldots[k]\ldots(x-x_m)^2}{(x_k-x_0)^2\ldots[k]\ldots(x_k-x_m)^2} . \tag{48}$$

Представление (48) удобно тем, что автоматически выполняются условия

$$H_{2m+1}(x_k) = f_k .$$

При вычислении производной полинома (48) в узле $x = x_k$ следует учесть, что все слагаемые суммы, кроме слагаемого, отвечающему самому узлу x_k, дают нулевой вклад в производную в этой точке, поэтому

$$H'_{2m+1}(x_k) = f_k\left(\frac{2}{x_k - x_0} + \ldots + \frac{2}{x_k - x_{k-1}} + \frac{2}{x_k - x_{k+1}} + \ldots + \frac{2}{x_k - x_k}\right) + \alpha_k = f'_k .$$

Отсюда

$$\alpha_k = f'_k - 2 f_k A_k ,$$

где, числа A_k определяются формулой (46). Таким образом, решением данной задачи является полиномом Эрмита

$$H_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^{m}\left[f_k + (f'_k - 2 f_k A_k)\left(x - x_k\right)\right]\frac{(x-x_0)^2\ldots[k]\ldots(x-x_m)^2}{(x_k-x_0)^2\ldots[k]\ldots(x_k-x_m)^2} . \tag{49}$$

Задача 5

Построить полином Эрмита второй степени $H_2(x)$ *для функции* $\sin x$ *по следующим данным:*

$$\sin 0 = 0, \sin\frac{\pi}{2} = 1, \sin'\frac{\pi}{2} = 0.$$

Вычислить с помощью этого полинома приближенное значение синуса в точке $x = \pi/4$. *Найти погрешность, сравнить ее с погрешностью, которую дает интерполяционный полином* $P_2(x)$ *(16) задачи 2 и с теоретической оценкой погрешности (44).*

Здесь мы имеем задачу, которая в общем виде была разобрана в примере 1: согласно (49) узел $x_0 = 0$ является простым, а узел $x_1 = \pi/2$ - двукратным. В этом случае в формуле (47) сумма, соответствующая простым узлам, сводится к одному слагаемому, которое в силу нулевого значения синуса в точке $x_0 = 0$ обращается в ноль. Второй член в формуле (47) соответствует кратному корню $x_1 = \pi/2$. Подставляя сюда соответствующее значение синуса и его производной в этой точке, а также значение коэффициента $A_1 = 2/\pi$, будем иметь:

$$H_2(x) = \left[1 - \frac{2}{\pi}\left(x - \frac{\pi}{2}\right)\right]\frac{2x}{\pi} = \frac{4}{\pi^2}x(\pi - x). \tag{50}$$

Вычислим значение полинома $H_2(x)$ в точке $x = \pi/4$ и подсчитаем погрешность

$$H_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{3}{4}, R_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{3}{4} = -0.04282. \tag{51}$$

Теоретическая формула для погрешности (43) принимает в данном случае вид:

$$R_2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{6}(-\cos\xi)\omega_3\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\cos\xi\frac{\pi^3}{384},\ 0 \le \xi \le \frac{\pi}{2}. \tag{52}$$

Она правильно определяет знак погрешности и позволяет написать для нее мажорантную оценку

$$\left|R_2\left(\frac{\pi}{4}\right)\right| \le \frac{\pi^3}{384} < 0.081. \tag{53}$$

Данная оценка согласуется с величиной погрешности (51), подсчитанной «в лоб».

При подсчете приближенного значения $\sin x$ с помощью полинома Эрмита $H_2(x)$ (50) в точке $x = \pi/4$ мы получили погрешность (51), модуль которой в два с лишним раза превышает погрешность (17) полинома $P_2(x)$ (16). Чтобы понять причину такого расхождения, рассмотрим рис. 3, на котором приведены графики функций $\sin x$ (сплошная линия) и $H_2(x)$ (пунктир). Сравним его с рис. 1, на котором изображены графики функции $\sin x$ и полинома $P_2(x)$. Из-за нулевого значения производной $H_2'(x)$ в точке $x = \pi/2$ график полинома $H_2(x)$ качественно больше похож на график синуса, чем график полином $P_2(x)$. Однако равенство полинома

$P_2(x)$ синусу не только в граничных точках отрезка $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, но и во внутренней точке $x = \pi/6$ приводит к тому, что полином $P_2(x)$ приближает синус на отрезке $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ лучше чем полином $H_2(x)$. Это хорошо видно при сравнении рис. 1 и рис. 3. Подсчет погрешностей (17) и (51) в точке $x = \pi/4$ является дополнительным тому подтверждением.

§2. Интерполирование сплайнами.

Увеличение степени интерполяционного полинома может оказаться невыгодным из-за быстрого роста объема вычислений. К тому же далеко не всегда оно приводит к повышению точности. Во второй половине XX века с появлением компьютеров и развитием современной вычислительной математики при обработке больших таблиц получила развитие новая идея – строить приближение функций с помощью кусочно-полиномиальной интерполяции с использованием полиномов сравнительно невысоких степеней. Наиболее удобными оказались полиномы третьей степени. Такие конструкции получили название кубических сплайнов.

2.1. Определение кубического сплайна.

Пусть на отрезке $[a,b]$ задана функция $y = f(x)$. Рассмотрим сетку узлов

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b \tag{54}$$

и обозначим через h_i расстояние между смежными узлами

$$h_i = x_i - x_{i-1},\ i = 1,\ldots,n \tag{55}$$

Определение:

Назовем кубическим сплайном функции $y = f(x)$, $x \in [a,b]$ на сетке (54) функцию $S(x)$ удовлетворяющую условиям:

- ***S1.*** *На каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ функция $S(x)$ является полиномом третьей степени.*
- ***S2.*** *Функция $S(x)$, её первая $S'(x)$ и вторая $S''(x)$ производные непрерывны на сегменте $[a,b]$.*
- ***S3.*** $S(x_i) = f(x_i) = f_i,\ \ i = 0,\ldots,n$
- ***S4.*** *На концах сегмента $[a,b]$ функция $S''(x)$ удовлетворяет условиям $S''(a) = S''(b) = 0$.*

Замечание. На концах сегмента $[a,b]$ могут быть заданы в принципе и другие условия, например:

$$S''(a) = A,\ \ S''(b) = B.$$

Справедлива следующая теорема.

Теорема.

Существует единственный сплайн $S(x)$, удовлетворяющий требованиям (S1) – (S4).

Мы проведем конструктивное доказательство этой теоремы.

2.2. Формулировка системы уравнений для коэффициентов кубического сплайна.

Сведем задачу построения сплайна к отысканию коэффициентов упомянутых полиномов третьей степени на каждом из отрезков $\left[x_{i-1}, x_i\right]$.Для этого сопоставим отрезку $\left[x_{i-1}, x_i\right]$ полином $S_i(x)$, для удобства записанный в виде:

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2}(x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x - x_i)^3,\ x \in \left[x_{i-1}, x_i\right],\quad i = 1, \ldots, n. \tag{56}$$

При этом, очевидно:

$$S_i'(x) = b_i + c_i(x - x_i) + \frac{d_i}{2}(x - x_i^2), \tag{57}$$

$$S_i''(x) = c_i + d_i(x - x_i), \tag{58}$$

так, что

$$S_i(x_i) = a_i,\ \ S_i'(x_i) = b_i,\ \ S_i''(x_i) = c_i. \tag{59}$$

Для выполнения требований (S3) в узлах интерполяции с номерами $i = 1, \ldots, n$ следует положить:

$$a_i = f\left(x_i\right) = f_i,\quad i = 1, \ldots, n \tag{60}$$

Требуя непрерывности сплайна в узлах x_i $\left(i = 1, \ldots, n-1\right)$и выполнения условия (S3) при $i = 0$, получим:

$$S_i(x_{i-1}) = f_{i-1},\quad i = 1, \ldots, n \tag{61}$$

или

$$f_i + b_i(x_{i-1} - x_i) + \frac{c_i}{2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x_{i-1} - x_i)^3 = f_{i-1},\quad i = 1, \ldots n.$$

Это равенство можно переписать следующим образом:

$$b_i h_i - \frac{c_i}{2}h_i^2 + \frac{d_i}{6}h_i^3 = f_i - f_{i-1},\quad i = 1, \ldots, n. \tag{62}$$

Условие (S2) непрерывности первой производной $S'(x)$в узлах x_i $\left(i = 1, \ldots, n-1\right)$ принимает вид:

$$S_i'(x_{i-1}) = S_{i-1}'(x_{i-1}) = b_{i-1},\quad i = 2, \ldots, n \tag{63}$$

и приводит к соотношениям

$$b_i - c_i h_i + \frac{d_i}{2}h_i^2 = b_{i-1},\quad i = 2, \ldots, n$$

или

$$c_i h_i - \frac{d_i}{2}h_i^2 = b_i - b_{i-1},\quad i = 2, \ldots, n. \tag{64}$$

Аналогичным образом условия непрерывности второй производной $S''(x)$ в тех же узлах:

$$S_i''(x_{i-1}) = S_{i-1}''(x_{i-1}) = c_{i-1},\quad i = 2, \ldots, n \tag{65}$$

означают, что

$$d_i h_i = c_i - c_{i-1},\quad i = 2, \ldots, n. \tag{66}$$

Наконец, дополнительные граничные условия (S4) дают еще два уравнения

$$\begin{cases} S_1''(x_0) = S_1''(a) = c_1 - d_1 h_1 = 0 \\ S_n''(x_n) = S_n''(b) = c_n = 0 \end{cases}. \tag{67}$$

В итоге мы получили замкнутую систему (62), (64), (66), (67), содержащую в сумме $3n$ линейных уравнений для отыскания $3n$ неизвестных: $b_i, c_i, d_i,\ \ i = 1,2,\ldots,n$

2.3. Редукция системы.

Удобно формально ввести ещё одно неизвестное c_0, положив при этом $c_0 = 0$, и первое уравнение в (67) переписать в виде:

$$d_1 h_1 = c_1 - c_0,$$

то есть в форме аналогичной (66).

Теперь уравнения (66) и (67) естественно представить в единообразном виде

$$d_i h_i = c_i - c_{i-1},\ i = 1,2,\ldots,n \tag{68}$$

$$c_0 = 0,\ c_n = 0. \tag{69}$$

Обратим внимание на то, что из системы (68) можно выразить все коэффициенты d_i через разности $c_i - c_{i-1}$, а затем из системы (62) выразить через c_i и c_{i-1} коэффициенты b_i. Подставляя полученные выражения в (64), придем к системе линейных уравнений для c_i:

$$\frac{1}{3}c_{i-2}h_{i-1} + \frac{2}{3}c_{i-1}(h_{i-1} + h_i) + \frac{1}{3}c_i h_i = 2\left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}}\right),\ i = 2,3,\ldots,n. \tag{70}$$

Сдвигая индекс i на единицу, получим симметричную форму записи уравнений (70):

$$h_i c_{i-1} + 2(h_i + h_{i+1})c_i + h_{i+1}c_{i+1} = 6\left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}\right),\ i = 1,\ldots n-1. \tag{71}$$

Кроме того, согласно (69)

$$c_0 = c_n = 0. \tag{72}$$

Система (71) содержит $n-1$ уравнение с $(n-1)$-ой неизвестной: $c_1, c_2, \ldots, c_{n-1}$. Величины c_0 и c_n определены дополнительными соотношениями (72). Если сетка (54) равномерная, т. е. $h_i = h = const$, то уравнения (71) принимают особенно простой вид:

$$c_{i-1} + 4c_i + c_{i+1} = 6\frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}. \tag{73}$$

Для уравнений системы (71) выполнено условие диагонального преобладания. Отсюда следует существование и единственность решения задачи (71), (72). По найденным величинам c_i можно рассчитать остальные коэффициенты сплайна по формулам

$$d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h_i},\ \ i = 1,\ldots,n \tag{74}$$

и

$$b_i = \frac{1}{2}h_i c_i - \frac{1}{6}h_i^2 d_i + \frac{f_i - f_{i-1}}{h},\ \ i = 1,\ldots,n, \tag{75}$$

завершив тем самым построение сплайна. Теорема доказана.

2.4. Замечание о решении системы.

Уравнения (71) имеют так называемую трехточечную структуру, общий вид таких систем

$$A_i y_{i-1} + C_i y_i + B_i y_{i+1} = F_i\,,\ i = 1, 2, \ldots, n-1, \tag{76}$$

$$y_0 = 0\,,\ y_n = 0 \tag{77}$$

соответствует системе линейных уравнений с трехдиагональной матрицей T для определения вектора неизвестных $y = (y_1, y_2, \ldots, y_{n-1})$:

$$Ty = F\,,$$

где

$$T = \begin{vmatrix} C_1 & B_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & C_2 & B_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & C_3 & B_3 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{n-1} & C_{n-1} \end{vmatrix}, \quad F = \begin{vmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \ldots \\ \ldots \\ F_{n-1} \end{vmatrix}. \tag{78}$$

При этом легко видеть, что в нашем случае

$$|C_i| > |A_i| + |B_i|, \quad i = 1, \ldots, n-1, \tag{79}$$

поскольку

$$C_i = 2(h_i + h_{i+1}),\ \ A_i = h_i,\ \ B_i = h_{i+1}\,. \tag{80}$$

Как было показано в главе 1, решение подобных систем эффективно осуществляется методом прогонки.

Задача 6.

Рассмотреть функцию $y = f(x) = 3^x$ *на отрезке* $[-1,1]$ *с узлами интерполяции* $x_0 = -1,\ x_1 = 0,\ x_2 = 1$. *Построить кубический сплайн. Найти его значение при* $x = 1/2$, *т. е. вычислить приближенно* $\sqrt{3}$. *Подсчитать погрешность.*

В рассматриваемом случае мы имеем равномерную сетку с шагом $h = 1$. У нее одна внутренняя точка x_1 и две граничные - x_0 и x_2. Система (73) сводится к одному уравнению относительно коэффициента c_1, которое с учетом дополнительных соотношений (70), определяющих нулевые значения коэффициентов c_0 и c_2, принимает вид:

$$4c_1 = 6\left(\frac{1}{3} - 2 + 3\right). \tag{81}$$

Таким образом, в нашей задаче:

$$c_0 = 0\,,\ c_1 = 2\,,\ c_2 = 0\,.$$

Остальные коэффициенты сплайна находятся по формулам (60), (74), (75):

$$a_1 = 1,\ a_2 = 3;\ \ d_1 = 2,\ d_2 = -2;\ \ b_1 = 4/3,\ b_2 = 7/3.$$

Теперь можно выписать кубические полиномы, определяющие сплайн:

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x) = 1 + \dfrac{4}{3}x + x^2 + \dfrac{1}{3}x^3, & -1 \le x \le 0, \\ S_2(x) = 3 + \dfrac{7}{3}(x-1) - \dfrac{1}{3}(x-1)^3, & 0 \le x \le 1. \end{cases} \quad (82)$$

Легко проверить, что построенная таким образом функция $S(x)$ непрерывна вместе с первой и второй производной во внутренней узловой точке $x = 0$.

В заключение вычислим значение сплайна в точке $x = 1/2$, т. е. подсчитаем приближенно $\sqrt{3}$:

$$\sqrt{3} \approx S_2\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{15}{8},\ \varepsilon = \sqrt{3} - \frac{15}{8} = \text{-}0{,}142949. \quad (83)$$

Значительная погрешность обусловлена прежде всего большим шагом $h = 1$. Определенную роль играют также условия S4:

$$S''(-1) = S''(1) = 0. \quad (84)$$

Вторая производная рассматриваемой функции $f(x) = 3^x$ в точках $x = \pm 1$ в ноль не обращается, т. е. условие (84) дает о ней искаженную информацию. Если учесть при построении сплайна истинные значения функции $f''(x)$ в точках ± 1, то точность аппроксимации улучшится.

2.5. Сходимость и точность интерполирования сплайнами.

При обсуждении эффективности численного метода в первую очередь обращают внимание на две характеристики:

1. Условие сходимости метода (сходимость).
   Речь идет о минимальных по возможности ограничениях, при которых приближенное решение задачи стремится к точному решению задачи.
   Сходимость означает, что данный метод в принципе позволяет найти решение задачи с любой степенью точности.
2. Скорость сходимости (точность).
   Это характеристика близости приближенного решения к точному (характеристика скорости убывания погрешности) при некоторых дополнительных ограничениях.

Посмотрим как решаются эти вопросы в теории сплайнов.

Итак, на сегменте $[a,b]$ задана функция $f(x)$ и построена сетка

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b;\ \ h_i = x_i - x_{i-1} > 0.$$

Введем в рассмотрение величину

$$h = \max_{1 \le i \le n} h_i. \quad (85)$$

Приведем без доказательства две теоремы.

Теорема 1. *Пусть* $f(x)$ *непрерывна на сегменте* $[a,b]$*, тогда для любого* $\varepsilon > 0$ *можно указать* $\delta(\varepsilon) > 0$ *такое, что при любой сетке, удовлетворяющей условию* $h < \delta$ *справедливо неравенство*

$$\left|f(x) - S(x)\right| < \varepsilon \quad \forall x \in [a,b], \quad (86)$$

иными словами $S_h(x)$ *при* $h \to 0$ *равномерно сходится к непрерывной функции* $f(x)$.

Теорема 2. *Пусть* $f(x)$ *имеет на сегменте* $[a,b]$ *четыре непрерывных производных и дополнительно удовлетворяет условию* $f''(a) = f''(b) = 0$. *Тогда имеют место неравенства (оценки):*

$$\left|f(x) - S(x)\right| \le M_4 h^4 \quad \forall x \in [a,b], \tag{87}$$

$$\left|f'(x) - S'(x)\right| \le M_4 h^3 \quad \forall x \in [a,b], \tag{88}$$

$$\left|f''(x) - S''(x)\right| \le M_4 h^2 \quad \forall x \in [a,b], \tag{89}$$

$$M_4 = \max_{[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|. \tag{90}$$

§3. Метод наименьших квадратов.

Метод наименьших квадратов был предложен Гауссом и Лежандром в конце XVIII - начале XIX веков в связи с проблемой обработки экспериментальных данных. В этом случае задача построения функции непрерывного аргумента по дискретной информации (1), (2) характеризуется двумя особенностями:

1. Число точек x_i, в которых проводятся измерения, обычно бывает достаточно большим.

2. Значения функции y_i (2) в точках сетки x_i (1) определяются приближенно в связи с неизбежными ошибками измерения.

С учетом этих обстоятельств строить функцию $y(x)$ в виде суммы большого числа слагаемых (3) и добиваться ее точного равенства в точках сетки величинам y_i, как это делалось при интерполировании, становится нецелесообразным.

В методе наименьших квадратов аппроксимирующая функция $y(x)$ ищется в виде суммы, аналогичной (3), но содержащей сравнительно небольшое число слагаемых

$$F(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k \varphi_k(x), \quad m < n, \tag{91}$$

в частности, возможен вариант $m \ll n$.

Предположим, что мы каким-то образом выбрали коэффициенты a_k, тогда в каждой точке сетки x_i, можно подсчитать погрешность

$$\delta_i = y_i - F(x_i) = y_i - \sum_{k=0}^{m} a_k \varphi_k(x_i), \quad i = 0,1,2,\ldots,n. \tag{92}$$

Сумма квадратов этих величин называется суммарной квадратичной погрешностью

$$J = \sum_{i=0}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{n} (y_i - \sum_{k=0}^{m} a_k \varphi_k(x_i))^2. \tag{93}$$

Она дает количественную оценку того, насколько близки значения функции $F(x)$ (91) в точках сетки к величинам y_i.

Меняя значения коэффициентов a_k, мы будем менять погрешность J, которая является их функцией. В результате естественно возникает задача:

Найти такой, набор коэффициентов a_k, *при которых суммарная квадратичная погрешность* J *оказывается минимальной.*

Функцию $F(x)$ (91) с набором коэффициентов, удовлетворяющих этому требованию, называют наилучшим приближением по методу наименьших квадратов.

Построение наилучшего приближения сводится к классической задаче математического анализа об экстремуме функции нескольких переменных. Метод решения этой задачи известен. Необходимым условием экстремума является равенство нулю в экстремальном точке всех первых частных производных рассматриваемой функции. В случае (93) это дает

$$\frac{\partial J}{\partial a_l} = -2\sum_{i=0}^{n}(y_i - \sum_{k=0}^{m} a_k \varphi_k(x_i))\varphi_l(x_i) = 0 \quad l = 0,1,\ldots,m. \tag{94}$$

Оставим члены, содержащие a_k, слева и поменяем в них порядок суммирования по индексам i и k. Члены, содержащие y_i, перенесем направо. В результате уравнения (94) примут вид

$$\sum_{k=0}^{m} \gamma_{lk} a_k = b_l, \quad l = 0,1,\ldots,m, \tag{95}$$

где

$$\gamma_{lk} = \sum_{i=0}^{n} \varphi_l(x_i)\varphi_k(x_i), \tag{96}$$

$$b_l = \sum_{i=0}^{n} \varphi_l(x_i) y_i. \tag{97}$$

Мы получили систему линейных алгебраических уравнений (95), в которой роль неизвестных играют искомые коэффициенты разложения $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Число уравнении и число неизвестных в этой системе совпадает и равно $m+1$. Матрица коэффициентов системы Г состоит из элементов γ_{lk}, которые определяются формулой (96). Ее называют матрицей Грама для системы функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_m(x)$ на сетке (1). Отметим, что матрица Грама является симметричной: для ее элементов, согласно (96), справедливо равенство $\gamma_{lk} = \gamma_{kl}$. Числа b_l, стоящие в правой части уравнений (95), вычисляются по формуле (97) через значения y_i сеточной функции (2).

Предположим, что функции $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_m(x)$ выбраны такими, что определитель матрицы Грама, отличен от нуля:

$$\Delta = \det \Gamma \neq 0. \tag{98}$$

В этом случае при любой правой части система (95) имеет единственное решение

$$\bar{a}_0, \bar{a}_1, \ldots, \bar{a}_m. \tag{99}$$

Рассмотрим наряду с набором коэффициентов (99), полученных в результате решения системы (95), любой другой набор коэффициентов $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Представим числа a_k в виде

$$\begin{gathered} a_0 = \bar{a}_0 + \Delta a_0, a_1 = \bar{a}_1 + \Delta a_1, \ldots, a_m = \bar{a}_m + \Delta a_m, \\ (\Delta a_0)^2 + (\Delta a_1)^2 + \cdots + (\Delta a_m)^2 > 0 \end{gathered} \tag{100}$$

и сравним значения суммарной квадратичной погрешности J для функций $F(x)$ (91), построенных с помощью коэффициентов (99) и (100).

Квадрат погрешности и точке $x = x_i$ для функции $F(x)$ (91) с коэффициентами (100) можно записать в виде

$$\delta_i^2 = \left\{ y_i - \sum_{k=0}^{m} \left(\overline{a}_k + \Delta a_k \right) \varphi_k(x_i) \right\}^2 =$$
$$= \left\{ \left(y_i - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \varphi_k(x_i) \right) - \sum_{k=0}^{m} \Delta a_k \varphi_k(x_i) \right\}^2 = \left(y_i - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \varphi_k(x_i) \right)^2 - \qquad (101)$$
$$-2 \left(y_i - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \varphi_k(x_i) \right) \left(\sum_{l=0}^{m} \Delta a_l \varphi_l(x_i) \right) + \left(\sum_{k=0}^{m} \Delta a_k \varphi_k(x_i) \right)^2 .$$

Здесь в среднем слагаемом мы заменили в одной из сумм индекс суммирования k на l, чтобы не использовать один и тот же индекс в двух разных суммах и иметь возможность перемножить их почленно.

Чтобы получить суммарную квадратичную погрешность, нужно просуммировать выражения (101) для δ_i^2 по индексу i Первые слагаемые не содержат Δa_k. Их сумма дает погрешность J, вычисленную для функции (91) с коэффициентами (99) $\overline{a}_k$.

Рассмотрим теперь сумму вторых слагаемых, которые зависят от Δa_l линейно:

$$-2 \sum_{i=0}^{n} \left\{ \left(y_i - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \varphi_k(x_i) \right) \cdot \left(\sum_{l=0}^{m} \Delta a_l \varphi_l(x_i) \right) \right\} =$$
$$= -2 \sum_{l=0}^{m} \Delta a_l \left\{ \sum_{i=0}^{n} y_i \varphi_l(x_i) - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \sum_{i=0}^{n} \varphi_k(x_i) \varphi_l(x_i) \right\} = \qquad (102)$$
$$= -2 \sum_{l=0}^{m} \Delta a_l \left\{ b_l - \sum_{k=0}^{m} \overline{a}_k \gamma_{lk} \right\} = 0.$$

Здесь мы поменяли местами порядок суммирования и воспользовались тем, что коэффициенты $\overline{a}_k$, удовлетворяют системе уравнений (95).

С учетом (102) будем иметь

$$J\left(\overline{a}_0 + \Delta a_0, \overline{a}_1 + \Delta a_1, \ldots, \overline{a}_m + \Delta a_m \right) =$$
$$= J\left(\overline{a}_0, \overline{a}_1, \ldots, \overline{a}_m \right) + \sum_{i=0}^{n} \left(\sum_{k=0}^{m} \Delta a_k \varphi_k(x_i) \right)^2 > J\left(\overline{a}_0, \overline{a}_1, \ldots, \overline{a}_m \right). \qquad (103)$$

Формула (103) показывает, что функция $F(x)$ (91) с коэффициентами $\overline{a}_k$ (100), полученными в результате решения уравнений (95), действительно минимизирует суммарную квадратичную погрешность J. Если мы возьмем любой другой набор коэффициентов (100), отличный от (99), то согласно формуле (103) к погрешности $y(\overline{a}_0, \overline{a}_1, \ldots, \overline{a}_m)$ добавится положительное слагаемое и она увеличится.

Итак, чтобы построить наилучшее приближение (91) сеточной функции (1), (2) по методу наименьших квадратов, нужно взять в качестве коэффициентов разложения a_k решение системы линейных уравнений (95).

Задача 7

Сеточная функция задана таблицей 1

.

Таблица 1:

i	x_i	y_i
0	*0,0*	*0,95*
1	*0,5*	*1,54*
2	*1,0*	*2,04*
3	*1,5*	*2,46*
4	*2,0*	*2,95*

Построить линейную функцию

$$F(x) = a_0 + a_1 x\,, \tag{104}$$

которая дает для нее наилучшее приближение по методу наименьших квадратов.

В рассматриваемом случае имеем:

$$n = 4, \quad m = 1, \quad \varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = x\,.$$

Для определения коэффициентов a_0 и a_1 составим систему уравнений (95). Элементы $\gamma_{lk}(l = 0{,}1, \quad k = 0{,}1)$ матрицы Грама вычисляются по формуле (96)

$$\gamma_{0,0} = \sum_{i=0}^{4} \varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i) = 5\,,$$

$$\gamma_{0,1} = \gamma_{1,0} = \sum_{i=0}^{4} \varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i) = 5\,,$$

$$\gamma_{1,1} = \sum_{i=0}^{4} \varphi_1(x_i).\varphi_1(x_i) = 7.5\,.$$

Числа b_0 и b_1, стоящие в правой части уравнений (95), находим по формуле (97)

$$b_0 = \sum_{i=0}^{4} \varphi_0(x_i) y_i = 9{,}94\,,$$

$$b_1 = \sum_{i=0}^{4} \varphi_1(x_i) y_i = 12{,}40\,.$$

В результате система (95) принимает в рассматриваемом случае вид

$$\begin{aligned} 5a_0 + 5a_1 &= 9.94 \\ 5a_0 + 7{,}5a_1 &= 12.40. \end{aligned} \tag{105}$$

Определитель системы (105) $\Delta = 12{,}5 \neq 0$, так что система имеет единственное решение

$$\overline{a}_0 = 1{,}004, \qquad \overline{a}_1 = 0{,}984\,.$$

В результате мы получаем следующую линейную аппроксимацию рассматриваемой табличной функции

$$F(x) = 1{,}004 + 0{,}984x\,. \tag{106}$$

Теперь, когда функция (106) построена, можно подсчитать погрешность аппроксимации в точках сетки:

$$\delta_i = y_i - (1,004 + 0,984 x_i)\,,\ i = 0,1,2,3,4\,.$$

В результате получаем

$$\delta_0 = -0,054,\ \ \delta_1 = -0,044,\ \ \delta_2 = 0,052,\ \ \delta_3 = -0,020,\ \ \delta_4 = -0,022\,. \qquad (107)$$

Отметим, что наибольшая по модулю погрешность достигается в точке $x_0 = 0$: $|\delta_0| = 0.054 > |\delta_i|$, $i = 1,2,3,4$.

В заключение сделаем важное замечание. Обычно бывает известна точность ε, с которой задаются значения функции y_i. Например, если речь идет об экспериментальных данных, то ошибка в определении y_i зависит от методики проведения измерений и точности приборов.

Предположим, что в разобранном примере числа y_i заданы с точностью $\varepsilon = 0,1$. В этом случае построенная линейная функция согласуется с доступной нам информацией о функции $y(x)$: погрешности (107) по модулю не превышают ε. В результате мы можем утверждать, что в пределах точности задания таблицы зависимость y от x можно принять линейной.

Это видно на рис.4. На нем показаны точки (x_i, y_i), соответствующие рассматриваемой таблице. Для каждой из них указан доверительный интервал $y_i - 0.1 \le y \le y_i + 0.1$, в пределах которого может реально находится значение функции $y(x_i)$ с учетом точности задания величины y_i. Прямая (106) везде проходит внутри доверительных интервалов, что подтверждает сделанный выше вывод.

Рассмотрим теперь противоположный случай: будем считать, что величины y_i заданы с более высокой точностью $\varepsilon = 0,01$. При такой точность построенная линейная аппроксимация (106) не согласуется с данными таблицы: погрешность аппроксимации (107) превышает по модулю ε. В этом случае нужно либо увеличить число членов в разложении функции $F(x)$, добавив к линейной функции квадратичный член $a_2 x^2$, либо заменить систему функций $\varphi_k(x)$, по которым ведется разложение, на какую-нибудь другую.