Л. А. Игумнов С. Ю. Литвинчук Т. В. Юрченко

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИЙ

Учебное пособие

Нижний Новгород
2018

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет»

Л. А. Игумнов С. Ю. Литвинчук Т. В. Юрченко

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИЙ

Утверждено редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия

Нижний Новгород
ННГАСУ
2018

ББК 22.19
М 54

Печатается в авторской редакции

Рецензенты:

И.А. Волков – д – р. ф - м. наук, профессор, зав. кафедрой прикладной механики и подъемно-транспортных машин ФГБОУ ВО «Волжский государственный университет водного транспорта»

И.Н. Цветкова – к. ф-м наук, доцент зав. кафедрой информатики и информационных технологий Нижегородского института управления – филиала РАНХиГС при президенте РФ

Игумнов Л. А Методы вычислительной математики. Анализ и исследование функций [Текст]: учеб. пособие / Л. А. Игумнов, С. Ю. Литвинчук, Т. В. Юрченко; Нижегор. гос. архитектур. – строит. ун-т. – Н. Новгород: ННГАСУ, 2018. – 88 с.
ISBN 978-5-528-00256-9

Пособие содержит традиционные разделы, предусмотренные программой дисциплины «Вычислительная математика». Схема представления материала включает в себя такие этапы, как постановка задачи, метод (алгоритм) решения, типовой пример и задания для самостоятельной работы. Пособие написано с учетом особенностей решения задач с использованием компьютеров. При составлении программы, позволяющей автоматизировать применение численных методов, студентам рекомендуется пользоваться языком Visual Basic for Applications (VBA). Имеется раздел, посвященный лабораторному практикуму.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению «Прикладная информатика» при изучении дисциплины «Вычислительная математика».

ББК 22.19

ISBN 978-5-528-00256-9

Содержание

Введение

В современном обществе проблемы экономики и управления требуют от специалистов решения сложных теоретических и прикладных задач, овладения навыками использования вычислительной техники. Компьютеризация научных и практических разработок позволила использовать такую технологию исследований как математическое моделирование.

Современная экономическая теория включает в методы исследований экономических явлений микро- и макроуровня как необходимый и естественный элемент методы математического моделирования. Основу математического моделирования составляют математические модели экономических объектов, методы их решения, анализ и интерпретация полученных результатов.

С помощью методов вычислительной математики решается подавляющее большинство современных задач. Целью данного пособия является детальное знакомство студентов с некоторыми численными методами решения задач, которые появляются в процессе их обучения в базовых курсах математики, линейной алгебры, экономики, статистики. В пособии изложены математические аспекты процесса моделирования, дан краткий анализ типовых задач, их классификация, математические особенности и описание методов их решения.

Пособие состоит из 6 разделов, каждый из которых посвящен отдельной проблеме. В каждом разделе присутствует теоретическое обоснование сходимости методов, исследуется оценка погрешности, описываются источники возникновения и способы уменьшения погрешностей. Последний раздел посвящен лабораторному практикуму, состоящему лабораторных работ. Каждая работа представлена в 16 вариантах и снабжена методическими указаниями к ее выполнению.

Пособие написано с учетом особенностей решения задач с использованием компьютеров. При составлении программы, позволяющей автоматизировать применение численных методов, студентам рекомендуется пользоваться языком Visual Basic for Applications (VBA). VBA является диалектом языка Visual Basic, имеющим свои особенности и предназначенным для работы с приложениями Microsoft Office. Так как электронные таблицы MS Excel являются удобным и доступным средством проведения автоматизированных расчетов, графического моделирования, то именно их использование, дополненное программированием на VBA, обеспечит детальное изучение материала курса. Выбор VBA обусловлен также его несложностью в освоении, применении и отладке готовых программ. Переход на двухуровневую систему образования, предполагает значительное увеличение доли самостоятельной работы студентов, поэтому в пособии приводятся только необходимые начальные сведения о VBA, дающие возможность дальнейшего самостоятельного освоения особенностей программирования на нем.

Пособие целесообразно использовать наряду с учебным пособием «Методы вычислительной математики. Решение уравнений и систем уравнений». Совместное использование данных пособий обеспечит полноту и глубину восприятия учебного материала курса «Вычислительная математика».

1. Приближенные числа. Виды и источники погрешностей

Методы вычислительной математики позволяют получить лишь приближенное решение задачи, причем задача должна иметь конкретные исходные данные и значения параметров. Применение компьютеров также обуславливает получение приближенных результатов. Современные процессоры позволяют обрабатывать целые числа и числа в форме с плавающей точкой. Числовое множество бесконечно. Процессор же ограничен своей разрядной сеткой и вынужден работать только с некоторым конечным подмножеством множества действительных чисел.

Числа в форме с плавающей точкой имеют вид $D = \pm m \cdot 10^n$, где m – мантисса числа, а n – его порядок. Если мантисса представлена в виде $m = 0.d_1 d_2 ... d_k$, то при $d_1 \neq 0$ число D будет представлено в нормализованной форме с плавающей точкой. Например, число -345.9 представлено в форме с фиксированной точкой. В нормализованной форме с плавающей точкой оно будет записано как $-0.3459 \cdot 10^3$.

Кроме того, необходимо учитывать, что компьютер осуществляет перевод привычных для человека десятичных чисел в числа двоичной системы. При этом разряды, выходящие за рамки разрядной сетки, не округляются, а отбрасываются. Таким образом, компьютер оперирует с приближенными значениями действительных чисел. Мерой точности приближенных чисел является погрешность. Различают два вида погрешностей: абсолютную и относительную.

Пусть A – точное число, a – приближенное число для A.

Ошибкой или погрешностью приближенного числа *a* называют разность *A*-*a* между точным и приближенным значениями.

Простейшей количественной мерой погрешности является *абсолютная погрешность*

$$\Delta(a) = |A - a| \tag{1.1}$$

Однако по значению абсолютной погрешности не всегда можно сделать правильное заключение о качестве приближения. Естественно соотнести погрешность величины и ее значение, для чего вводится понятие *относительной погрешности* (при $A \neq 0$)

$$\delta(a) = \frac{|A - a|}{|A|} = \frac{\Delta(a)}{|A|}. \tag{1.2}$$

Использование относительных погрешностей удобно, в частности, тем, что они не зависят от масштабов величин и единиц измерения.

Так как значение A неизвестно, то непосредственное вычисление величин $\Delta(a)$ и $\delta(a)$ по формулам (1.1), (1.2) невозможно. Более реальная и часто поддающаяся решению задача состоит в получении оценок погрешности вида:

$$|A - a| \le \overline{\Delta}(a), \tag{1.3}$$

$$\frac{|A - a|}{|A|} \le \overline{\delta}(a), \tag{1.4}$$

где $\overline{\Delta}(a)$ и $\overline{\delta}(a)$ – величины, которые будем называть *верхними границами* (или просто *границами*) *абсолютной и относительной погрешностей*.

Если величина $\overline{\Delta}(a)$ известна, то неравенство (1.4) будет выполнено, если положить

$$\overline{\delta}(a) = \frac{\overline{\Delta}(a)}{|A|}. \tag{1.5}$$

Точно так же, если величина $\overline{\delta}(a)$ известна, следует положить

$$\overline{\Delta}(a) = |A|\overline{\delta}(a). \tag{1.6}$$

Поскольку значение A неизвестно, при практическом применении формулы (1.5), (1.6) заменяют приближенными равенствами (1.7)

$$\bar{\delta}(a) \approx \frac{\bar{\Delta}(a)}{|a|}, \quad \bar{\Delta}(a) \approx |a|\bar{\delta}(a). \tag{1.7}$$

Вычисление погрешностей результатов вычислений при выполнении арифметических операций проводится по следующим формулам.

Абсолютные погрешности:

$\Delta(a+b) = \Delta a + \Delta b$;

$\Delta(a-b) = \Delta a + \Delta b$;

$\Delta(a \cdot b) = b \cdot \Delta a + a \cdot \Delta b$;

$\Delta\left(\dfrac{a}{b}\right) = \dfrac{a \cdot \Delta b + b \cdot \Delta a}{b^2}$.

Относительные погрешности:

$$\delta(a+b) = \frac{\Delta(a+b)}{|a+b|} = \frac{|a| \cdot \delta(a)}{|a+b|} + \frac{|b| \cdot \delta(b)}{|a+b|};$$

$$\delta(a-b) = \frac{\Delta(a-b)}{|a-b|} = \frac{|a| \cdot \delta(a)}{|a-b|} + \frac{|b| \cdot \delta(b)}{|a-b|};$$

$$\delta(a \cdot b) = \delta\left(\frac{a}{b}\right) = \delta(a) + \delta(b);$$

$$\delta(a^n) = n \cdot \delta(a).$$

Для приближенного числа, полученного округлением, *предельная абсолютная погрешность* Δ_a равна половине единицы последнего разряда числа. Например, для числа $a = 0{,}234$ $\Delta_a = 0{,}0005$.

Значащими цифрами числа a называют все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева. Например, в числе $a = 0{,}\underline{1234050}$ значащими цифрами являются все подчеркнутые цифры. Значащую цифру приближенного числа a называют *верной в узком смысле*, если абсолютная погрешность этого числа не превосходит половины единицы разряда, соответствующего этой цифре. Значащую цифру приближенного числа a называют *верной в широком смысле*, если абсолютная погрешность этого числа не превосходит единицы разряда, в котором находится значащая цифра. Например, если $a = 0{,}030587$ и $\Delta(a) = 0{,}6 \cdot 10^{-5}$, то верными в узком смысле будут подчеркнутые значащие цифры $0{,}0\underline{305}87$, а верными в широком смысле будут подчеркнутые значащие цифры $0{,}0\underline{3058}7$. Оставшиеся справа цифры считаются *сомнительными*. Однако одну или две из них принято сохранять для избегания потери точности результата при округлении.

Вычислить приближенное значение числа a с точностью до $\varepsilon = 10^{-n}$ означает необходимость сохранить верной значащую цифру, стоящую в $n-$ом разряде после запятой.

Иногда в ответе оставляют только верные цифры. Однако последняя верная цифра может стать при этом верной в нестрогом смысле, так как произойдет округление и к погрешности числа прибавится погрешность округления.

Правила округления

Округлением числа a называется замена его числом b с меньшим количеством значащих цифр.

Существует несколько способов округления числа до n значащих цифр. Наиболее простой из них – *усечение*. Состоит в отбрасывании всех цифр, расположенных справа от $n-$ой значащей цифры. Более предпочтительным является *округление по дополнению*. В простейшем варианте это правило округления состоит в следующем. Если первая слева из отбрасываемых цифр меньше 5, то сохраняемые цифры остаются без изменения. Если же она больше либо равна 5, то в младший сохраняемый разряд добавляется единица.

Абсолютное значение погрешности округления при округлении по дополнению не превышает половины единицы разряда, соответствующего последней оставляемой цифре, а при округлении усечением – единицы того же разряда.

Общая формула для погрешности

Основная задача теории погрешностей: известны погрешности некоторой системы величин, требуется определить погрешность данной функции от этих величин.

Пусть дана функция $y = f(x)$ и a - приближенное значение аргумента x, $\Delta(a)$ - его абсолютная погрешность. Тогда за абсолютную погрешность функции можно принять ее приращение или дифференциал.

$\Delta y \approx dy$, $\Delta y = |f'(a)| \cdot \Delta(a)$.

Пусть $f(X) = f(X_1, X_2, ..., X_m)$ – дифференцируемая в области G функция m переменных и пусть вычисление осуществляется при $x = (x_1, x_2, ..., x_m)$.

Введем обозначения:

$[X; x]$ – отрезок, соединяющий точки X и x;

$f'_{X_j} = \partial f / \partial X_j$.

Для абсолютной погрешности значения $y = f(x)$ оценка

$$\Delta(y) \le \sum_{j=1}^{m} \max_{[X;x]} \left| f'_{X_j} \right| \Delta(x_j).$$

Это и есть общая формула для погрешности. Если $x \approx X$, то в практике для оценки используют следующую формулу:

$$\overline{\Delta}(y) \approx \sum_{j=1}^{m} \left| f'_{X_j}(x) \right| \overline{\Delta}(x_j).$$

Пример. $y = \sin x$, a - приближенное значение x.

Тогда $\Delta y = \Delta(\sin x) = |\cos a| \cdot \Delta(a)$.

Правила подсчета цифр

Согласно техническому подходу, приближенное число должно записываться так, чтобы в нем все значащие цифры, кроме последней, были верными и лишь последняя была бы сомнительной и при этом в среднем не более чем на одну единицу.

Чтобы результаты арифметических действий над приближенными числами соответствовали этому подходу, нужно придерживаться правил:

1. При сложении и вычитании приближенных чисел в результате следует сохранять столько десятичных знаков, сколько их в приближенном данном с наименьшим количеством десятичных знаков.

2. При умножении и делении в результате следует сохранять столько значащих цифр, сколько их имеет приближенное данное с наименьшим числом значащих цифр.

3. При определении количества верных цифр в значениях элементарных функций от приближенных значений аргумента следует грубо оценить значение модуля производной функции. Если это значение не превосходит единицы или близко к ней, то в значении функции можно считать верными столько знаков после запятой, сколько их имеет значение аргумента. Если же модуль производной функции в окрестности приближенного значения аргумента превосходит единицу, то количество верных десятичных знаков в значении функции меньше, чем в значении аргумента на величину k, где k - наименьший показатель степени, при котором имеет место $|f'(x)| < 10^k$.

4. Результаты промежуточных вычислений должны иметь *1-2 запасных знака*, которые затем должны быть отброшены.

Строгий учет предельных абсолютных погрешностей

Метод строгого учета предусматривает использование правил вычисления предельных абсолютных погрешностей. При пооперационном учете ошибок промежуточные результаты так же как и их погрешности, заносятся в специальную таблицу, состоящую из двух параллельно заполняемых частей: одна для результатов, а другая для их погрешностей.

Вычисление по методу границ

Если нужно иметь абсолютно гарантированные границы возможных значений вычисляемой величины, используют специальный метод вычислений – метод границ.

Пусть $f(x,y)$ – функция непрерывная и монотонная в некоторой области допустимых значений аргументов x и y. Нужно получить ее значение $f(a,b)$, где a и b – приближенные значения аргументов, причем достоверно известно, что

$$НГ_a < a < ВГ_a; \quad НГ_b < b < ВГ_b.$$

Здесь *НГ*, *ВГ* – обозначения соответственно нижней и верхней границ значений параметров. Итак, вопрос состоит в том, чтобы найти строгие границы значения $f(a,b)$ при известных границах значений a и b.

Допустим, что функция $f(x,y)$ возрастает по каждому из аргументов x и y, тогда:

$$f(НГ_a, НГ_b) < f(a,b) < f(ВГ_a, ВГ_b).$$

Пусть теперь $f(x,y)$ возрастает по аргументу x и убывает по аргументу y.

Тогда будет строго гарантировано неравенство:

$$f(НГ_a, ВГ_b) < f(a,b) < f(ВГ_a, НГ_b).$$

Рассмотрим указанный принцип на примере основных арифметических действий. Пусть $f_1(x,y) = x + y$. Тогда очевидно, что

$$НГ_a + НГ_b < a + b < ВГ_a + ВГ_b.$$

Точно так же для функции $f_2(x,y) = x - y$ (она по x возрастает, а по y убывает) имеем

$$НГ_a - ВГ_b < a - b < ВГ_a - НГ_b.$$

Аналогично для умножения и деления:

$$НГ_a \cdot НГ_b < a \cdot b < ВГ_a \cdot ВГ_b;$$

$$\frac{НГ_a}{ВГ_b} < \frac{a}{b} < \frac{ВГ_a}{НГ_b}.$$

Источниками возникновения погрешностей могут быть:

- Математическая модель. Она может вносить существенную погрешность, если в ней не учтены какие-либо важные факторы, область применения модели. Этот вид погрешности является неустранимым.
- Погрешность исходных данных. Часто исходные данные могут быть разной точности. Этот вид погрешности считается неустранимым, так как не может быть изменен ни до начала, ни в ходе решения задачи.
- Погрешность численного метода. Данный вид погрешности может быть отрегулирован и является устранимым.
- Погрешность округления. Этот вид погрешности является устранимым.

Пример 1. Дано число $X = 4{,}2233$, все цифры которого верны в строгом смысле. Округлите данное число до трех значащих цифр, найдите предельную абсолютную и предельную относительную погрешности; в записи округленного числа укажите количество верных цифр в узком и в широком смысле.

Решение. Округлив данное число $X = 4{,}2233$ до трех значащих цифр, получаем $X_1 = 4{,}22$. Найдем абсолютную погрешность:

$$\Delta X_1 = |X - X_1| = |4{,}2233 - 4{,}22| = 0{,}0033.$$

Определим границы абсолютной погрешности (предельную погрешность), округлив с избытком до одной значащей цифры: $\Delta_{X_1} = 0{,}005$.

Найдем предельную относительную погрешность:

$$\delta_{X_1} = \frac{\Delta_{X_1}}{|X_1|} = \frac{0{,}005}{4{,}22} = 0{,}0012 = 0{,}12\%.$$

Укажем верные цифры в записи числа $X_1 = 4{,}22$ в узком и в широком смысле. Так как $\Delta_{X_1} = 0{,}005 \le 0{,}005$, то в узком смысле верными являются все цифры числа X_1. Так как $\Delta_{X_1} = 0{,}005 \le 0{,}01$, то в широком смысле так же все цифры числа X_1 являются верными.

Пример 2. Вычислите с помощью табличного процессора MS Excel значение величины $Y = \dfrac{ab - 3c}{\ln a + b}$ при заданных значениях параметров $a = 10{,}262$, $b = 0{,}6453$ и $c = 0{,}370$, используя:

1) правила подсчета цифр;
2) метод строгого учета границ абсолютных погрешностей;
3) способ границ.

Полученные результаты сравните, оцените смысл полученных числовых значений.

Решение.

1. Воспользуемся *правилами подсчета цифр*. Составим таблицу значений исходных величин и поэтапного получения результата.

a	b	c	$a \cdot b$	$3 \cdot c$	$a \cdot b - 3c$	$\ln a$	$\ln a + b$	Y
10,262	0,6453	0,370	6,622**1**	1,11**0**	5,51**2**	2,328**4**	2,973**7**	1,85**4**

В первые три столбца занесем исходные данные. Затем произведем вычисление $a \cdot b = 10{,}262 \cdot 0{,}6453 = 6{,}622069$. Воспользуемся правилом, что при умножении и делении в результате следует сохранить столько значащих цифр, сколько их имеет приближенное данное с наименьшим числом значащих цифр. Число 10,262 содержит пять значащих цифр, а число 0,6453 содержит четыре значащих цифры, значит в полученном результате следует сохранить четыре значащие цифры. Округлим результат с одно запасной цифрой и получим $a \cdot b \approx 6{,}6221$, занесем результат в таблицу. Запасная цифра в таблице выделена жирным шрифтом.

Затем произведем вычисление $3\cdot c = 3\cdot 0{,}370 = 1{,}110$. Воспользуемся правилом, что при определении количества верных цифр в значениях элементарных функций от приближенных значений аргумента следует грубо оценить значение модуля производной функции. Оценка величины производной в этой точке: $3 < 10^1$, значит в полученном значении следует сохранить на один десятичный знак меньше, чем в значении аргумента. Округляя с одной запасной цифрой, получаем 1,11**0** и заносим результат в таблицу, выделяя жирным шрифтом запасную цифру $3\cdot c \approx 1{,}110$.

Далее вычисляем $a\cdot b - 3c = 6{,}6221 - 1{,}110 = 5{,}5121$. Пользуемся правилом, что при сложении и вычитании приближенных чисел в результате следует сохранить столько десятичных знаков, сколько их в приближенном данном с наименьшим количеством десятичных знаков. Число 6,6221 содержит три десятичных знака, а число 1,110 два десятичных знака. Значит в полученном значении оставляем 2 десятичных знака. Округляя с одной запасной цифрой, получим $a\cdot b - 3c \approx 5{,}512$. В таблицу заносим результат с выделенной запасной цифрой: 5,51**2**.

Затем вычисляем $\ln a = \ln 10{,}262 = 2{,}32844775$. Пользуемся правилом, в котором сказано, что для определения количества верных цифр в значениях элементарных функций от приближенных значений аргумента следует грубо оценить значение модуля производной функции. Оценим величину производной точке a: $(\ln a)' = \dfrac{1}{a} = \dfrac{1}{10{,}262} \approx 0{,}0974489 < 10^0$. Так как значение производной не превосходит единицы, то в значении функции можно считать верными столько знаков после запятой, сколько их имеет значение аргумента. Округляя с одной запасной цифрой, получим $\ln a = \ln 10{,}262 = 2{,}32844775 \approx 2{,}3284$. Занесем в таблицу, выделяя запасную цифру 2,328**4**.

Далее находим $\ln a + b = 2{,}3284 + 0{,}6453 = 2{,}9737$. Пользуемся правилом, что при сложении и вычитании приближенных чисел в результате следует сохранить столько десятичных знаков, сколько их в приближенном данном с наименьшим количеством десятичных знаков. Число 2,3284 содержит три десятичных знака, число 0,6453 содержит четыре десятичных знака, значит в полученном результате сохраняем три десятичных знака. Округляя с одной запасной цифрой, получим 2,973**7.**

Наконец, вычисляем значение функции: $Y = \dfrac{ab - 3c}{\ln a + b} = \dfrac{5{,}512}{2{,}9737} = 1{,}853583$. Воспользуемся правилом, что при умножении и делении в результате следует сохранять столько значащих цифр, сколько их имеет приближенное данное с наименьшим числом значащих цифр. Числитель дроби имеет три значащих цифры, а знаменатель - четыре, значит сохраняем три значащие цифры, округляя с одной запасной: $Y = 1{,}853583 \approx 1{,}854$. Округляя окончательный результат без запасной цифры, получаем $Y = 1{,}85$.

2. Воспользуемся *методом строгого учета границ абсолютных погрешностей*. Для начала составим таблицу пошаговых вычислений и занесем в нее исходные числа и их предельные абсолютные погрешности.

a	10,262	Δa	0,0005
b	0,6453	Δb	0,00005
c	0,370	Δc	0,0005
$a \cdot b$	6,622**1**	$\Delta(a \cdot b)$	0,00084
$3 \cdot c$	1,11**0**	$\Delta(3 \cdot c)$	0,0015
$a \cdot b - 3c$	5,51**2**	$\Delta(a \cdot b - 3c)$	0,0023
$\ln a$	2,3284**5**	$\Delta(\ln a)$	0,000049
$\ln a + b$	2,9737**5**	$\Delta(\ln a + b)$	0,000099
Y	1,853**6**	ΔY	0,00085

Затем начнем заносить в таблицу результаты промежуточных вычислений после округления до одной запасной цифры (в таблице выделена жирным шрифтом) с учетом вычисленной одновременно величины погрешности. При этом рекомендуется округлять значения погрешностей с возрастанием до двух значащих цифр.

При подсчете предельных абсолютных погрешностей пользуемся правилами вычисления погрешностей произведения, разности, частного приближенных чисел, а также вычисления значения функции от приближенного аргумента.

Итак, округляя результат до последней верной в узком смысле цифры, а также округляя погрешность до соответствующих разрядов результата, окончательно получаем, что $Y = 1{,}854 \pm 0{,}001$.

3. Воспользуемся *способом границ*. Будем считать, что в исходных данных $a = 10{,}262$, $b = 0{,}6453$ и $c = 0{,}370$ все цифры верны в узком смысле, то есть Δa=0,0005; Δb=0,00005; Δc=0,0005. Установим границы исходных данных:

$10{,}2615<a<10{,}2625$; $0{,}64525<b<0{,}64535$; $0{,}3695<c<0{,}3705$.

При выполнении промежуточных вычислений и округлении результатов используем все рекомендации правил подсчета цифр, при этом округление нижних границ производим по недостатку, а верхних границ – по избытку. При округлении окончательных результатов используем то же правило, округляя до последней верной цифры.

1) $НГ_{ab}=НГ_a \cdot НГ_b=10{,}2615 \cdot 0{,}64525=6{,}621232875 \approx 6{,}6212\mathbf{3}$;

$ВГ_{ab}=ВГ_a \cdot ВГ_b=10{,}2625 \cdot 0{,}64535=6{,}622904375 \approx 6{,}6229\mathbf{0}$**;**

2) $НГ_{3c}=3 \cdot НГ_c=3 \cdot 0{,}3695=1{,}108\mathbf{5}$; $ВГ_{3c}=3 \cdot ВГ_c=3 \cdot 0{,}3705=1{,}111\mathbf{5}$;

3) $НГ_{ab-3c}=НГ_{ab}-ВГ_{3c}=6{,}6212\mathbf{3}\mathbf{-}1{,}111\mathbf{5}=5{,}50973 \approx 5{,}509\mathbf{7}$;

$ВГ_{ab-3c}=ВГ_{ab}-НГ_{3c}=6{,}6229\mathbf{0}\mathbf{-}1{,}108\mathbf{5}=5{,}514\mathbf{4}$;

4) $НГ_{lna}=ln(НГ_a)=ln(10{,}2615)= 2{,}328399028 \approx 2{,}3283\mathbf{9}$;

$ВГ_{lna}=ln(ВГ_a)=ln(10{,}2625)= 2{,}328496475 \approx 2{,}3284\mathbf{9}$;

5) НГ$_{lna+b}$=НГ$_{lna}$+НГ$_{b}$=2,3283**9**+0,64525=2,97364;

ВГ$_{lna+b}$=ВГ$_{lna}$+ВГ$_{b}$=2,3284**9**+0,64535=2,97384;

6) НГ$_{Y}$=НГ$_{ab\text{-}3c}$/ВГ$_{lna+b}$=5,509**7**/2,97384=1,852722406≈1,852**7**;

ВГ$_{Y}$=ВГ$_{ab\text{-}3c}$/НГ$_{lna+b}$=5,514**4**/2,97364=1,854427570≈1,854**4**;

Значит, результат вычислений значения величины Y по методу границ представим в виде неравенства: 1,852**7**<Y<1,854**4**.

Итак, вычислив величину Y тремя способами, получили результаты:

1) по правилу подсчета цифр Y≈1,85;
2) по методу строгого учета границ абсолютных погрешностей $Y = 1{,}854 \pm 0{,}001$;
3) по методу границ 1,852**7**<Y<1,854**4**.

2. Методы функциональной интерполяции

2.1. Понятие о приближении функций

На практике часто нет возможности записать связь между x и y в виде $y = f(x)$. Наиболее распространенным и практически важным случаем является задание этой связи в виде таблицы $\{x_i; y_i\}$. Дискретному множеству значений аргумента $\{x_i\}$ поставлено в соответствие множество значений функции $\{y_i\}$, $i = \overline{0, n}$. Значения появляются либо в результате расчетов, либо экспериментальных данных. Для построения таблицы значений функции $y = f(x)$ берется отрезок $[a; b]$ из области определения и выбираются точки

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b,$$

в которых определяются значения функции y_i.

На практике часто необходимо знать значения функции в точках, отличных от узлов x_i таблицы.

Этой цели служит задача аппроксимации (приближения) функции: данную функцию $y = f(x)$ требуется приближенно заменить (аппроксимировать) некоторой функцией $y = \varphi(x)$ так, чтобы отклонение значений этих функций в заданной области было наименьшим. Функция $y = \varphi(x)$ при этом называется *аппроксимирующей*. Аппроксимация, при которой приближение строится на заданном дискретном множестве точек $\{x_i\}$, называется *точечной*. К ней относится интерполирование, среднеквадратичное приближение и др.

Интерполирование – один из основных видов точечной аппроксимации. Оно состоит в следующем: для заданной функции $y = f(x)$ построить интерполянту $y = \varphi(x)$, принимающую в заданных точках x_i те же значения y_i, что и функция $y = f(x)$, то есть $\varphi(x_i) = y_i$, $i = \overline{0, n}$. При этом предполагают, что среди значений x_i нет одинаковых, т.е. $x_i \neq x_k$ при $i \neq k$. Точки x_i называют *узлами интерполяции*.

Интерполирующая функция $\varphi(x)$ может быть построена сразу для всего рассматриваемого интервала изменения x или для отдельных его частей. В первом случае говорят о *глобальной* интерполяции, во втором случае – о *кусочной* (локальной) интерполяции.

2.2. Интерполяционный полином Лагранжа

Наибольшее распространение получило так называемое алгебраическое интерполирование, когда приближающая функция ищется среди полиномов.

Пусть функция $y = F(x)$ задана таблицей

x	$F(x)$
x_0	y_0
x_1	y_1

…	…
x_n	y_n

Искомый интерполяционный полином $L_N(x)$ может быть записан следующим образом:

$$L_N(x)=\sum_{j=1}^{N}F(x_j)\prod_{\substack{i=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{(x-x_i)}{(x_j-x_i)},$$

где $L_N(x)$– называется интерполяционным полиномом в форме Лагранжа. Рассмотрим еще одну форму того же полинома. Введем обозначение $\omega_N(x)=\prod_{i=1}^{N}(x-x_i)$. Очевидно $\omega'_N(x)=\sum_{j=1}^{N}\prod_{\substack{i=1\\ j\neq i}}^{N}(x-x_i)$. $\omega'_N(x_j)=\prod_{i=1}^{N}(x_j-x_i)$,

тогда $\prod_{\substack{i=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{(x-x_i)}{(x_j-x_i)}=\frac{\omega_N(x)}{(x-x_j)\omega'_N(x_j)}$ и, следовательно, полином можно представить в виде:

$$L_N(x)=\sum_{j=1}^{N}F(x_j)\frac{\omega_N(x)}{(x-x_j)\omega'_N(x_j)}.$$

2.3. Оценка остаточного члена интерполяционного полинома Лагранжа

Предположим, что функция $F(x)$ имеет непрерывную производную порядка N. Рассмотрим функцию $\varphi(z)=F_N(z)-L_N(z)-k\omega(z)$. Константу k для каждой точки $x\in[x_1,x_N]$ определим из условия $\varphi(x)=0$. Тогда $k=\frac{F(x)-L_N(x)}{\omega_N(x)}$. При таком выборе k функция $\varphi(z)$ обращается в ноль в $N+1$ точке $x_1,x_2,...,x_N,x$. Легко показать, что $\varphi^N[\xi]=0$. Здесь ξ– некоторая точка, принадлежащая отрезку $[y_1,y_2]$.

$y_1 = \min(x, x_1, x_2, ..., x_N)$, $y_2 = \max(x, x_1, x_2, ..., x_N)$. Поскольку $L_N(z)$ – полином степени $N-1$ $(L_N^{(N)}(z) = 0)$, а $\omega_N(z)$ – полином степени N с коэффициентом 1 при $z^N (\omega_N^{(N)}(x) = N!)$, то из выражения $\varphi(z) = F_N(z) - L_N(z) - k\omega(z)$ получаем $\varphi^{(N)}(\xi) = F^{(N)}(\xi) - kN!$. Так как $\varphi^{(N)}(\xi) = 0$, то $k = \dfrac{F^{(N)}(\xi)}{N!}$. Поскольку $\varphi(x) = F_N(x) - L_N(x) - k\omega(x) = 0$ и $k = \dfrac{F^{(N)}(\xi)}{N!}$, окончательно получаем

$$F(x) - L_N(x) = \frac{F^{(N)}(\xi)}{N!}\omega_N(x).$$

Заметим, что ξ в этом выражении, вообще говоря, зависит от точки x в которой рассматривается разность $F_N(x) - L_N(x)$. Следовательно,

$$\left|F_N(x) - L_N(x)\right| \le \frac{\max\limits_{x\in[y_1, y_2]}\left|F^{(N)}(x)\right|}{N!}\left|\omega_N(x)\right|.$$

Правую часть называют остаточным членом полинома Лагранжа и обозначают $R_N(x)$:

$$R_N(x) = \frac{F^{(N)}(\xi)}{N!}\omega_N(x).$$

2.4. Интерполяционный полином Ньютона

Предположим, что табличные аргументы равноотстоят друг от друга, то есть $x_{i+1} - x_i = h = const$, $i = \overline{0, n-1}$. Расстояние между узлами интерполяции $h > 0$ называется шагом таблицы.

Конечные разности первого порядка – это разности между соседними табличными значениями:

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0,\ \Delta y_1 = y_2 - y_1,\ \ldots,\ \Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}. \qquad (2.1)$$

Конечные разности второго порядка – это разности вида

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i, \quad i = \overline{0, n-2}. \tag{2.2}$$

Конечные разности $k-$ого порядка имеют вид

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i,\ i = \overline{0, n-k}. \tag{2.3}$$

Обычно конечные разности располагают в виде таблицы (табл. 1). По таблице конечных разностей часто удается находить наилучшую степень интерполяционного многочлена. Если разности $k-$ого порядка на каком-то участке таблицы практически постоянны, то это значит, что здесь табличная функция наиболее близка к полиному $k-$ой степени.

Таблица конечных разностей Таблица 1

x	$f(x)$	Δy	$\Delta^2 y$	$\cdots$	$\Delta^n y$
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\cdots$	$\Delta^n y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	$\cdots$	
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	
x_{n-2}	y_{n-2}	Δy_{n-2}	$\Delta^2 y_{n-2}$		
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-1}			
x_n	y_n				

Первым интерполяционным многочленом Ньютона («интерполирование вперед») называется следующий многочлен:

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1) + .. + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_0)...(x - x_{n-1}).$$

Вторым интерполяционным многочленом Ньютона («интерполирование назад») называется следующий многочлен:

$$P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{h}(x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x - x_n)(x - x_{n-1}) +$$

$$\frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3!h^3}(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + ... + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_n)(x - x_{n-1})...(x - x_1).$$

Если ввести переменную t, такую, что $t=\dfrac{x-x_0}{h}$, то можно преобразовать выражения для полиномов Ньютона. Так первый интерполяционный полином Ньютона примет вид:

$$P_n = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \ldots + \frac{t(t-1)\ldots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0. \qquad (2.4)$$

График интерполяционного полинома $y=P_n(x)$ проходит через заданные точки, то есть значения полинома и данной функции $y=f(x)$ в узлах интерполяции совпадают $P_n(x_i)=f(x_i)$, $i=\overline{0,n}$. В точках отличных от узлов интерполяции значения полинома и функции будут отличаться, причем $R_n(x)=f(x)-P_n(x)$. Данная разность называется *остаточным членом интерполяционной формулы* и представляет собой погрешность интерполяции. Для оценки его значения применяют оценочную функцию $V_n(x)$, которая определяется следующей формулой:

$$R_n(x) \le V_n(x), \qquad (2.5)$$

$$V_n(x) = M_{n+1} \cdot \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}\left|t(t-1)\ldots(t-n)\right|, \qquad (2.6)$$

$$M_{n+1} = \max_{[a;b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|. \qquad (2.7)$$

Для оценки погрешности линейной интерполяции могут быть применимы формулы:

$$V_1(x) = \frac{M_2 h^2}{2}\left|t(t-1)\right|, \qquad (2.8)$$

$$M_2 = \max_{[x_0;x_1]}\left|f''(x)\right| \qquad (2.9)$$

или

$$\left|R_1(x)\right| \approx \frac{1}{8}\left|\Delta^2 y_0\right|,\ x\in[x_0;x_1]. \qquad (2.10)$$

Кроме оценки погрешности замены функции полиномом, необходимо проводить оценку погрешности вычислений. Таким образом, абсолютная погрешность приближенного значения функции будет складываться из суммы двух оценок $\Delta = V_n(x) + v$, где v – погрешность вычислений.

Пример. Пусть дана таблица значений функции $y = \ln x$ с верными значащими цифрами (табл. 2). Вычислить $\ln 1{,}64$ с помощью первого интерполяционного многочлена Ньютона и оценить погрешность результата.

Решение. Дополним исходную таблицу столбцами конечных разностей первого и второго порядка, произведя необходимые вычисления, согласно формулам (2.1)-(2.3). Анализируя полученные результаты, приходим к выводу, что вторые разности практически постоянны, значит хорошее приближение может дать полином Ньютона второй степени. Выберем следующие узлы интерполяции: $x_0 = 1{,}6$, $x_1 = 1{,}7$, $x_2 = 1{,}8$.

Таблица значений функции и конечных разностей Таблица 2

x	$\ln x$	Δy	$\Delta^2 y$
1,5	0,405	0,065	-0,004
1,6	0,470	0,061	-0,004
1,7	0,531	0,057	-0,003
1,8	0,588	0,054	
1,9	0,642		

Интерполируем на отрезке $[1{,}6;1{,}8]$ по формуле (2.4) при $n = 2$.

$$\ln x \approx P_2(x) = 0{,}470 + t \cdot 0{,}061 - \frac{t(t-1)}{2} 0{,}004, \quad t = \frac{x - 1{,}6}{0{,}1}.$$

По условию задачи $x = 1{,}64$, значит $t = 0{,}4$ и

$$\ln 1{,}64 \approx 0{,}470 + 0{,}4 \cdot 0{,}061 - \frac{0{,}4(-0{,}6)}{2} \cdot 0{,}004 \approx 0{,}4949.$$

Оценим погрешность этой формулы. Поскольку $\left|\ln'''(x)\right| \le 0{,}49$ для $x \in [1{,}6;1{,}8]$, то берем $M_3 = 0{,}49$,

тогда $V_2(1{,}64) = \dfrac{0{,}49 \cdot (0{,}1)^3}{3!} \cdot \left|0{,}4(0{,}4-1)\cdot(0{,}4-2)\right| = 0{,}32 \cdot 10^{-4}$.

Получилось, что погрешность интерполяции на порядок меньше погрешности таблицы $0{,}5 \cdot 10^{-3}$, точность результата определяется точностью табличных данных.

Найдем оценку точности приближения v, $0{,}4949 \approx P_2(1{,}64)$, $\left|P_2(1{,}64) - 0{,}4949\right| \le v$. Считая число $t = 0{,}4$ точным, найдем абсолютные погрешности табличных данных по верным цифрам значений y_i, у которых они равны 0,0005, у первых разностей – 0,001, у вторых – 0,002. Тогда $v = 0{,}0005 + 0{,}001 \cdot 0{,}4 + 0{,}002 \cdot \dfrac{0{,}4 \cdot 0{,}6}{2} = 0{,}0012$.

Суммарная оценка погрешности приближения составит: $\left|\ln 1{,}64 - 0{,}4949\right| \le V_2(1{,}64) + v \le 0{,}0013$.

Значит, получается, что число 0,4949 имеет только две верные значащие цифры. Однако, если привести искомое значение логарифма с пятью значащими цифрами, найденное, например, с помощью табличного процессора MS Excel, то получим $\ln 1{,}64 \approx 0{,}49470$ и $\left|0{,}49470 - 0{,}4949\right| = 0{,}0002$, то есть результат содержит три верные значащие цифры. Это несоответствие произошло в силу завышения оценки вычислительных погрешностей конечных разностей. На самом же деле точность результата совпадает с точностью таблицы.

Пример. Построить интерполяционные многочлены Лагранжа и Ньютона, совпадающие с функцией $f(x) = 3^x,\ x \in [-1, 1]$, в точках $x_0 = -1,\ x_1 = 0,\ x_2 = 1$. Вычислить значение сеточной функции и оценить погрешность многочленной интерполяции в точке $x^* = 0{,}5$.

Решение. Составим сеточную функцию и занесем ее в таблицу. Поскольку $n = 2$, то необходимо построить интерполяционные многочлены $L_2(x)$ и $N_2(x)$:

x_i	$x_0 = -1$	$x_1 = 0$	$x_2 = 1$
y_i	$y_0 = 1/3$	$y_1 = 1$	$y_2 = 3$

$$L_2(x) = y_0 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + y_1 \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} +$$
$$+ y_2 \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + 1.$$

Проверим условия интерполяции $L_2(-1) = 1/3;\ L_2(0) = 1;\ L_2(1) = 3$.

Для определения конечных разностей, входящих в интерполяционный многочлен Ньютона, удобно пользоваться таблицей конечных разностей, в которую конечная разность k-го порядка в узле x_i определяется как $\Delta^{(k)} y_i = \Delta^{(k-1)} y_{i+1} - \Delta^{(k-1)} y_i$, $k = 1,2,\ldots;\ i = \overline{0,n}$.

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$
-1 0 1	$\underline{1/3}$ 1 3	$\underline{1 - 1/3 = 2/3}$ $3 - 1 = 2$	$2 - 2/3 = \underline{4/3}$

Тогда

$$N_2(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_1) =$$
$$= \frac{1}{3} + \frac{2/3}{1 \cdot 1}(x+1) + \frac{4/3}{2!1^2}(x+1)(x-0) = \frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + 1.$$

Здесь использованы конечные разности в узле x_0 (подчеркнуты в таблице). Получен результат, подтверждающий теорему о единственности многочленной интерполяции, поскольку $L_2(x) \equiv N_2(x)$.

Значение сеточной функции в точке $x^* = 0{,}5$ вычислим по интерполяционному многочлену $y(0{,}5) \approx L_2(0{,}5) = 1{,}8333$.

Верхняя оценка погрешности интерполяционного многочлена:

$$\left| f(x^*) - L_2(x^*) \right| \le \frac{\max\limits_{x\in[-1,1]} \left| f'''(x) \right|}{3!} \left| (x^* - x_0)(x^* - x_1)(x^* - x_2) \right|;$$

$$\max_{x\in[-1,1]} \left| f'''(x) \right| = \max_{x\in[-1,1]} \left| 3^x \cdot \ln^3 3 \right| = 3^1 \cdot \ln^3 3 = 3{,}978;$$

$$\left| 3^{0,5} - \left(\frac{2}{3} \cdot 0{,}25 + \frac{4}{3} \cdot 0{,}5 + 1 \right) \right| \le \frac{3{,}978}{6} \left| (0{,}5+1)(0{,}5-0)(0{,}5-1) \right| = 0{,}249.$$

Поскольку функция $f(x) = 3^x$ известна, то можно вычислить точное значение абсолютной погрешности в точке $x^* = 0{,}5$:

$$\left| 3^{x^*} - L_2(x^*) \right| = \left| 3^{0,5} - \left(\frac{2}{3} \cdot 0{,}25 + \frac{4}{5} \cdot 0{,}5 + 1 \right) \right| = 0{,}1012,$$

т.е. верхняя оценка погрешности примерно в 2,5 раза превышает абсолютную погрешность в точке $x^* = 0{,}5$.

2.5. Приближение табличных функций методом наименьших квадратов

Пусть в результате экспериментов получена таблица с произвольным расположением аргументов. Аналитическое выражение табличной функции $f(x)$ может быть неизвестным. На основе этой таблицы требуется найти формулу $y = p(x)$, приближенно описывающую зависимость между экспериментальными данными таблицы.

Полученное для этой цели соотношение $y = p(x)$ называется *эмпирической формулой*, а функция $p(x)$ – *эмпирической функцией*.

Возможным вариантом решения задачи является интерполирование. Однако этот способ, требующий обязательного совпадения значений табличной и приближающей функций во всех табличных аргументах, в данном случае малопригоден. При большом количестве узлов он является неудобным и сложным, ибо потребует отыскания либо многочлена большой степени, либо другой громоздкой функции с «извилистым» графиком, проходящим через все табличные точки. В этой связи следует учесть замечание о том, что высокая степень интерполяционного многочлена не оправдана.

Кроме того, экспериментальные данные в силу ряда причин могут иметь трудно учитываемые случайные или систематические ошибки. В этих условиях интерполирование вообще становится сомнительным. Вместо того чтобы «сглаживать» случайные ошибки, интерполирующая функция включает в себя вместе с данными все их погрешности и может в результате оказаться слишком грубым приближением. Часто с помощью какой-либо простой функции с проходящим около табличных точек графиком удается добиться эффекта сглаживания ошибок и получить более точное приближение.

По этим причинам впредь не будем требовать от функции $p(x)$ обязательного выполнения равенств $p(x_i) = y_i$. Главное, чтобы она была достаточно простой, учитывала характер табличной функции и в точках x_i имела близкие к y_i, значения при всех $i = \overline{1, n}$.

Поиск эмпирической формулы начинается с определения класса функций, которые лучше всего отражают связь между табличными данными. Эффективным методом для этого являются графические соображения. На координатной плоскости отмечаются определяемые данной таблицей точки, а затем по характеру их расположения подбирается вид приближения из числа известных элементарных функций.

В перечень наиболее часто используемых классов функций входят, например, многочлены, тригонометрические функции $y = \sin kx$, $y = \cos kx$

и их линейные комбинации, логарифмические функции $y = \ln x + b$, показательные функции $y = ae^x + b$, дробно-линейные функции $y = \dfrac{1}{ax+b} + c$ и некоторые другие.

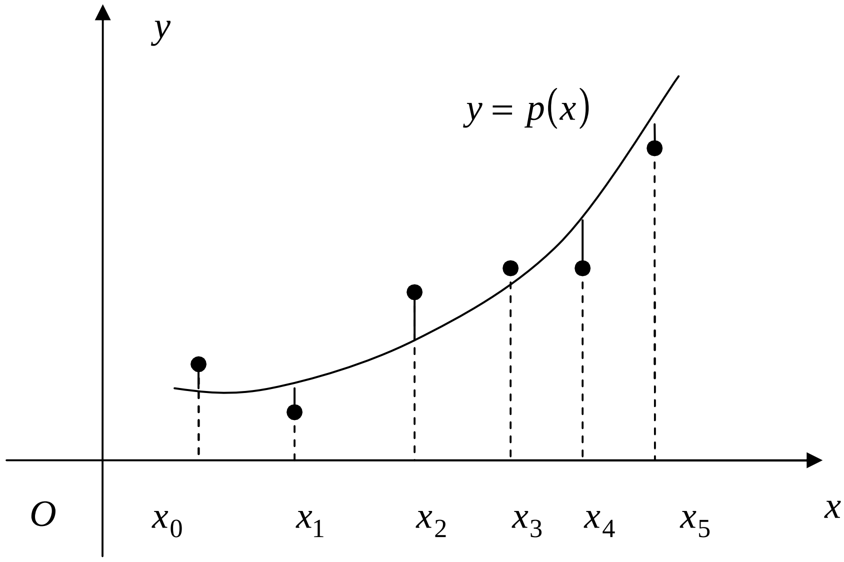

Рис. 1. Квадратичное приближение табличной функции

На рис. 1 вблизи точек таблицы проведена линия $y = p(x)$, напоминающая часть квадратной параболы. В этом случае искомой эмпирической формулой будет $y = ax^2 + bx + c$ при некоторых значениях коэффициентов a, b, c. Как видно из рисунка, для данной таблицы можно выбрать и более простое приближение в виде линейной функции $y = ax + b$.

Пусть тип эмпирической формулы $y = p(x)$ выбран, причем, как мы заметили, функция $p(x)$ на самом деле зависит от одного или нескольких числовых параметров. Чтобы найти функцию из выбранного класса, график которой в каком-либо смысле ближе всех расположен к табличным точкам, надо определить соответствующие значения этих параметров.

Есть несколько способов поиска. Мы рассмотрим следующий: возьмем в качестве меры близости функций $p(x)$ и $f(x)$ на отрезке

$[x_0, x_n]$ «расстояние» $\overline{\rho}(p, f)$ между ними и наилучшей функцией $p(x)$ будем считать ту, для которой $\overline{\rho}(p, f)$ имеет наименьшее значение.

При определении «расстояния» $\overline{\rho}$ будем пользоваться евклидовым расстоянием между векторами-значениями $(y_0,..., y_n)$ и $(p(x_0),..., p(x_n))$:

$$\overline{\rho}(p, f) = \sqrt{\sum_{i=0}^{n} (p(x_i) - y_i)^2}. \qquad (2.11)$$

Числа $\upsilon_i = p(x_i) - y_i$ называют *уклонениями*, а вычисленное по формуле (4.11) «расстояние» $\overline{\rho}(p, f)$ – *среднеквадратичным уклонением* функции $p(x)$ от табличной функции $f(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$. Абсолютные величины уклонений равны длинам отрезков между точками (x_i, y_i) и соответствующими точками графика $y = p(x)$ (на рис. 1 эти отрезки отмечены сплошными вертикальными линиями).

Ясно, что задача минимизации «расстояния» (2.11) сводится к минимизации подкоренного выражения.

Теперь, после всех уточнений, можно сформулировать задачу приближения по методу наименьших квадратов.

Пусть связь между аргументами x_i, и значениями y_i приближенно описывается формулой $y = (x, a_1,..., a_k)$ с числовыми параметрами $a_1,..., a_k$. Требуется определить такие значения этих параметров, при которых сумма квадратов уклонений

$$\sum_{i=0}^{n} \upsilon_i^2 = \sum_{i=0}^{n} (p(x_i, a_i,..., a_k) - y_i)^2 \qquad (2.12)$$

будет наименьшей.

Если $\overline{a}_1,..., \overline{a}_k$ – искомые значения параметров, то их называют наилучшими параметрами, соотношение $y = p(x, \overline{a}_1,..., \overline{a}_k)$ – наилучшей эмпирической формулой данного класса, а функцию $p(x)$ – наилучшей функцией из данного класса функций.

Здесь не ставится задача оценки погрешностей приближенного равенства $f(x) \approx p(x, \bar{a}_1, ..., \bar{a}_k)$ во всех точках между x_0 и x_n. При интерполировании для этого были получены соответствующие формулы, но там предполагалось, что функция $f(x)$ имеет достаточно хорошее аналитическое выражение. В случае эмпирических таблиц, с которыми имеем дело в данном разделе, никакой информации об $f(x)$, кроме ее значений в точках x_i, может не оказаться.

По этой причине ограничимся выбором наилучшей функции $p(x)$ из некоторого класса функций и нахождением модулей погрешностей ее значений в точках x_i равных $|\upsilon_i|$, а также глобальной характеристики близости $p(x)$ к табличной функции – среднеквадратичного уклонения $\bar{\rho}(f, p)$.

Если для таблицы можно указать несколько классов эмпирических функций, то сначала из каждого класса отыскивается наилучшая функция, а затем из них выбирается та, которая дает наименьшее среднеквадратичное уклонение.

2.6. Полиномиальное приближение по методу наименьших квадратов

Рассмотрим поиск наилучших эмпирических функций на примере многочленов.

Итак, возьмем многочлен $k-$й степени

$$P_k(x) = a_k x^k + ... + a_1 x + a_0 \tag{2.13}$$

и выведем правило нахождения его наилучших коэффициентов.

Отметим также, что значение k степени многочлена (2.13) не влияет на способ решения задачи.

Если взять $k \geq n$, то наименьшее значение $\bar{\rho}(f, P_k) = 0$ дают интерполяционные многочлены, ибо для них $P_k(x_i) = y_i$, при всех $i = \overline{1, n}$. При $k = n$ такой многочлен единственный, а при $k > n$ их бесконечное множество, поэтому будем считать $k < n$. Независимо от количества табличных данных на практике обычно ограничиваются многочленами степени не выше трех.

Сумма квадратов уклонений для многочлена (2.13) представляет собой неотрицательную функцию от переменных $a_0, \ldots a_k$. Обозначим ее F:

$$F(a_0, \ldots, a_k) = \sum_{i=0}^{n} (a_k x_i^k + \ldots + a_1 x_i + a_0 - y_i)^2 . \tag{2.14}$$

Требующиеся нам наилучшие коэффициенты многочлена должны давать минимум функции F. Из курса математического анализа известно, что необходимым условием экстремума дифференцируемой функции многих переменных является равенство нулю ее частных производных по всем переменным. Вычислим их и приравняем к нулю:

$$\begin{cases} F'_{a_0} = 2\sum (a_k x_i^k + \ldots + a_1 x_i + a_0 - y_i) = 0, \\ F'_{a_1} = 2\sum (a_k x_i^k + \ldots + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i = 0, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ F'_{a_k} = 2\sum (a_k x_i^k + \ldots + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i^k = 0. \end{cases} \tag{2.15}$$

Проведя суммирование, собрав коэффициенты при $a_0, \ldots, a_k$. и перенеся не содержащие их суммы в правую часть, получим систему линейных уравнений относительно неизвестных $a_0, \ldots, a_k$

$$\begin{cases} a_k \sum x_i^k + \ldots + a_1 \sum x_i + a_0 (n+1) = \sum y_i \\ a_k \sum x_i^{k+1} + \ldots + a_1 \sum x_i^2 + a_0 \sum x_i = \sum y_i x_i \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_k \sum x_i^{2k} + \ldots + a_1 \sum x_i^{k+1} + a_0 \sum x_i^k = \sum y_i x_i^k . \end{cases} . \tag{2.16}$$

Обозначим

$$M_y = \sum_{i=0}^{n} y_i,\ M_{x^m} = \sum_{i=0}^{n} x_i^m,\ M_{yx^m} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^m\ (m \geq 1) \tag{2.17}$$

и перепишем систему (1.16) в виде:

$$\begin{cases} M_{x^k} a_k + ... + M_x a_1 + (n+1)a_0 = M_y, \\ M_{x^{k+1}} a_k + ... + M_{x^2} a_1 + M_x a_0 = M_{yx}, \\ .... \\ M_{x^{2k}} a_k + ... + M_{x^{k+1}} a_1 + M_{x^k} a_0 = M_{yx^k}. \end{cases} \tag{2.18}$$

Пусть решением системы (2.18) является вектор $(\overline{a}_0, ..., \overline{a}_k)$. Он действительно дает наименьшее значение для суммы (2.14), т.е. является точкой минимума функции F. Это означает, что из всех многочленов $k-$й степени многочлен $P_k(x) = \overline{a}_k x^k + ... + \overline{a}_1 x + \overline{a}_0$ будет самым хорошим приближением к рассматриваемой нами табличной функции (по методу наименьших квадратов).

В случае линейной функции $y = ax + b$ система (2.18) и ее коэффициенты запишутся так:

$$\begin{cases} M_x a + (n+1)b = M_y, \\ M_{x^2} a + M_x b = M_{yx}, \end{cases} \tag{2.19}$$

где $M_x = \sum_{i=0}^{n} x_i,\ M_{x^2} = \sum_{i=0}^{n} x_i^2,\ M_y = \sum_{i=0}^{n} y_i,\ M_{yx} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i.$

3. Численное интегрирование

3.1. Простейшие квадратурные формулы

Пусть необходимо вычислить значение определенного интеграла

$$I = \int_a^b f(x)dx. \tag{3.1}$$

Обычно для вычисления значения определенного интеграла применяют специальные численные методы. Широко используются *квадратурные формулы*. В этих случаях применяется приближенное равенство вида:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i), \tag{3.2}$$

где c_i – числовые коэффициенты (веса квадратурной формулы), x_i – точки из отрезка $[a,b]$ (узлы квадратурной формулы); $n \geq 0$ – целое число.

Сумма в правой части приближенного равенства называется квадратурной суммой. Разность между левой и правой частями приближенного равенства называется остаточным членом квадратурной формулы.

Квадратурная формула (2.2) точна для многочлена $P_m(x)$ степени m, если для любого многочлена степени m и выше формула дает точное значение интеграла. Последнее можно записать следующим образом:

$$\int_a^b P_m(x)dx = \sum_{i=0}^{n} c_i P_m(x_i).$$

Замечание. Среди двух квадратурных формул, вычисляющих интеграл с заданной точностью, как правило, более эффективной считается та, в которой используется меньшее число узлов.

Традиционно интеграл (3.1) интерпретируют как площадь криволинейной трапеции, ограниченной кривой $y = f(x)$, осью x и прямыми $x = a,\ x = b$. Разобьем отрезок $[a,b]$ на элементарные отрезки $[x_{i-1}, x_i]$ точками $x = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$. Интеграл (3.1) можно представить тогда в виде следующей суммы

$$I = \sum_{i=1}^{n} I_i, \quad I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx.$$

Введем обозначения: $f_i = f(x_i), \quad f_{i-1/2} = f(x_{i-1/2}) = f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right).$

Пусть шаг $h = x_i - x_{i-1}$ постоянная величина.

3.1.1. Формула прямоугольников

Заменим приближенно элементарную площадь под кривой площадью элементарного прямоугольника.

Элементарная квадратурная формула прямоугольников выглядит следующим образом:

$$I_i \approx hf_{i-1/2}.$$

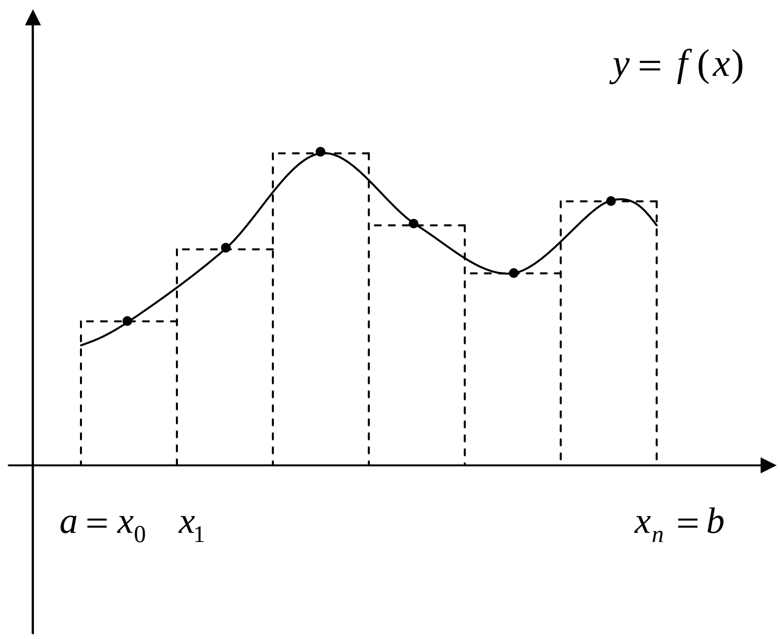

Рис. 2. Метод прямоугольников (центральный).

Составная квадратурная формула прямоугольников выглядит следующим образом:

$$I \approx I_{\text{пр}}^{h} = h(f_{1/2} + f_{3/2} + \ldots + f_{n-1/2}) = h\sum_{i=1}^{n} f_{i-1/2}\,,$$

где $h = (b-a)/n, \quad x_k = a + kh \quad (k = 0,1,2,\ldots,n)$.

Формула соответствует приближенной замене исходной площади площадью ступенчатой фигуры, изображенной на рис. 2.

Иногда используют формулы:

$$I \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f_i\,,\ I \approx h\sum_{i=1}^{n} f_i\,,$$

называемые соответственно составными квадратурными формулами левых и правых прямоугольников.

Геометрические иллюстрации приведены на рис. 3, 4.

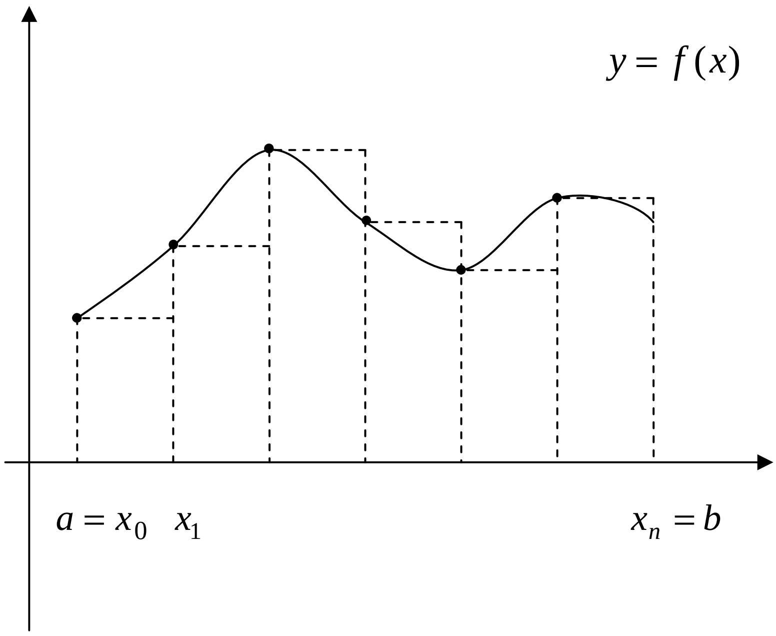

Рис. 3. Метод прямоугольников (левый)

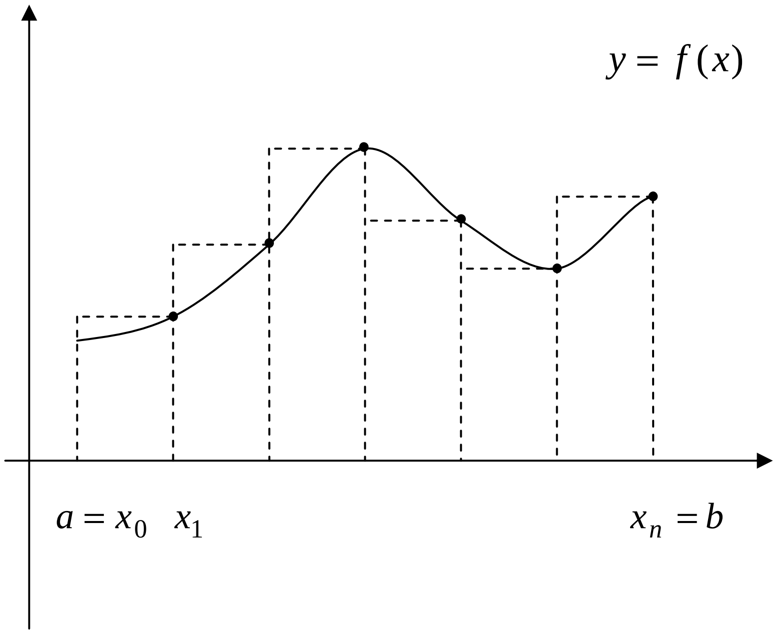

Рис. 4. Метод прямоугольников (правый)

Пример. По формулам прямоугольников, прияв n=4, вычислить $\int_0^8 \frac{dx}{2x+1}$.

Решение. В данном случае $f(x)=1/(x+3)$, $a=0$, $b=8$. С помощью формул находим:

$$h=2,\ x_0=0,\ x_1=2, x_2=4, x_3=6, x_4=8\ (x_0=a=0, x_4=b=8);$$

$$y_0=f(x_0)=\frac{1}{2x_0+1}=\frac{1}{0+1}=1,\ y_1=f(x_1)=\frac{1}{2x_1+1}=\frac{1}{4+1}=\frac{1}{5},$$

$$y_2=f(x_2)=\frac{1}{9},\ y_3=f(x_3)=\frac{1}{13},\ y_4=f(x_4)=\frac{1}{19}.$$

Получаем: $I_Л=h(y_0+y_1+y_2+y_3)=2\left(1+\frac{1}{5}+\frac{1}{9}+\frac{1}{13}\right)=2{,}7761,$

$$I_П=h(y_1+y_2+y_3+y_4)=2\left(\frac{1}{5}+\frac{1}{9}+\frac{1}{13}+\frac{1}{19}\right)=0{,}88133.$$

3.1.2. Формула трапеций

Суть метода в том, что подинтегральная функция на частичных отрезках заменяется на соответствующий полином, найденный с помощью линейной интерполяции. Геометрически это означает замену криволинейной трапеции ступенчатой фигурой, состоящей из прямоугольных трапеций. Приближенное значение интеграла – сумма площадей полученных трапеций (рис. 5):

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_n = h\left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + ... + y_{n-1}\right).$$

Оценка погрешности осуществляется по формулам:

$$\left|I - I_n\right| = \left|R_n\right| \le V_n,\ V_n = M_2 \cdot \frac{(b-a)^3}{12n^2},\ M_2 = \max_{[a;b]}\left|f''(x)\right|.$$

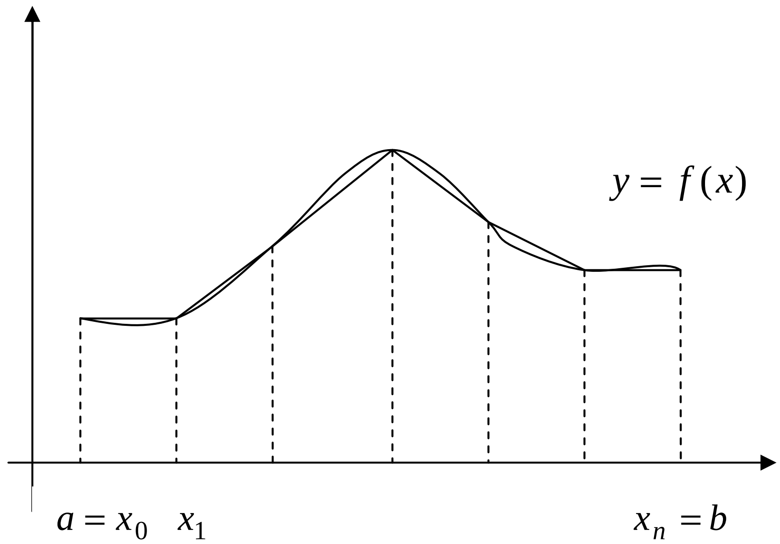

Рис. 5. Метод трапеций

Пример. Вычислить приближенно интеграл $\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$ по формуле трапеций, приняв $n = 5$.

Решение.

В данном случае по расчетной формуле

$x_k = x_0 + kh\ (k = 1,2,...,5)$, где $h = (1-0)/5 = 0,2$,

получаем $x_1 = 0 + 1 \cdot 0,2 = 0,2;\ x_2 = 0,4;\ x_3 = 0,6;\ x_4 = 0,8;\quad x_5 = 1$. Так как $y = 1/(1+x)$, то $y_k = 1/(1+x_k)\ (k = 0,1,...,5)$.

Находим значение y_k: $y_0 = 1/(1+x_0) = 1;$ $y_1 = 1/(1+x_1) = 1/1{,}2 = 0{,}833;$ $y_2 = 1/(1+x_2) = 1/1{,}4 = 0{,}714;$ $y_3 = 0{,}635;$ $y_4 = 0{,}556;$ $y_5 = 0{,}500$.

Получаем

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} \approx 0{,}2(0{,}500 + 0{,}833 + 0{,}714 + 0{,}625 + 0{,}556 + 0{,}250) = 0{,}696.$$

3.1.3. Формула Симпсона

Если через точки (x_{i-1}, f_{i-1}), $(x_{i-1/2}, f_{i-1/2})$, (x_i, f_i) провести параболу

$$P_2(x) = f_{i-1/2} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}(x - x_{i-1/2}) + \frac{f_i - 2f_{i-1/2} + f_{i-1}}{h^2/2}(x - x_{i-1/2})^2,$$

то ее интегрирование позволяет получить элементарную формулу Симпсона I_i. Покажем это.

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} P_2(x)dx = hf_{i-1/2} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i - x_{i-1/2})dx +$$

$$+\frac{f_i - 2f_{i-1/2} + f_{i-1}}{h^2/2}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i - x_{i-1/2})dx = hf_{i-1/2} + \frac{h}{3}(f_i - 2f_{i-1/2} + f_{i-1}) =$$

$$= \frac{h}{3}(f_{i-1} - 4f_{i-1/2} + f_i),$$

$$I_i = \frac{h}{3}(f_{i-1/2} + 4f_{i-1/2} + f_i).$$

Составная квадратурная формула Симпсона имеет вид:

$$I \approx I_{\text{симп}} = \frac{h}{3}\left(f_0 + f_n + 4\sum_{i=1}^{n} f_{i-1/2} + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i\right).$$

Если число элементарных отрезков разбиения четно $(n = 2m)$, то можно формулу записать в следующем виде:

$$I \approx I_{\text{симп}} = \frac{h}{3}\left(f_0 + f_{2m} + 4\sum_{i=1}^{m} f_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} f_{2i}\right).$$

В этой формуле роль элементарного отрезка играет отрезок $[x_{2i-1}, x_{2i}]$, длина такого отрезка равна $2h$.

3.1.4. Оценка погрешности

Введем следующее обозначение $M_k = \max\limits_{[a,b]} \left| f^{(k)}(x) \right|$.

Если функция f дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$, то для составных квадратурных формул прямоугольников и трапеций справедливы следующие оценки погрешности:

$$\left| I - I_{\text{пр}} \right| \le \frac{M_2(b-a)}{24} h^2,$$

$$\left| I - I_{\text{тр}} \right| \le \frac{M_2(b-a)}{12} h^2.$$

Такие оценки показывают, что формулы прямоугольников и трапеций имеют второй порядок точности относительно h. Однако формулы левых и правых прямоугольников имеют первый порядок точности относительно h. Для них справедливо следующая оценка погрешности:

$$\left| I - I_{\text{пр}} \right| \le \frac{(b-a)M_1}{2} h.$$

Если функция f имеет на отрезке $[a,b]$ непрерывную производную четвертого порядка, то тогда для формулы Симпсона справедлива оценка погрешности:

$$\left| I - I_{\text{симп}} \right| \le \frac{M_4(b-a)}{180} h^4.$$

Такая оценка показывает, что формула Симпсона имеет четвертый порядок точности относительно h.

3.2. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса

Будем строить квадратурные формулы для вычисления следующего интеграла:

$$I = \int_a^b f(x)\rho(x)dx,$$

где $f(x)$ – любая функция из некоторого заранее оговоренного класса, а $\rho(x)$ – некоторая фиксированная функция, называемая весовой. Заменим $f(x)$ интерполяционным полиномом и положим

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \cong \int_a^b L_n(x)\rho(x)dx.$$

Обозначим:

$$R_n(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx - \int_a^b L_n(x)\rho(x)dx = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]\rho(x)dx =$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!}\rho(x)\omega_n(x)dx.$$

При записи последнего равенства использовано хорошо известное представление остаточного члена интерполяционного полинома Лагранжа. В приведенных формулах удобно сделать замену переменных, перейдя от отрезка $[a,b]$ к отрезку $[-1,1]$: $x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t$. При этой замене узлы интерполирования x_j перейдут в узлы d_j. Тогда будем иметь:

$$\int_a^b L_n(x)\rho(x)dx = \int_a^b \sum_{j=1}^n f(x_j)\prod_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^n \frac{(x-x_i)}{(x_j - x_i)}\rho(x)dx =$$

$$= \int_a^b \sum_{j=1}^n f(x_j)\prod_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^n \frac{(t-d_i)}{(d_j - d_i)}\rho^\circ(t)\frac{b-a}{2}dt = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^n D_j f(x_j).$$

Здесь принято обозначение:

$$D_j = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \frac{(t-d_i)}{(d_j - d_i)} \rho^*(t)dt\,, \quad \rho^*(t) = \rho\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t\right).$$

Итак,

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)\rho(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} D_j f(x_j)\,, \tag{3.3}$$

$$\left|R_n(f)\right| \le D(d_1, d_2, ..., d_n) \max_{[a,b]}\left|f^{(n)}(x)\right|\left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1}, \tag{3.4}$$

Здесь

$$D(d_1, d_2, ...d_n) = \int_{-1}^{1} \frac{\left|\omega(t)\rho^*(t)\right|}{n!}dt, \tag{3.5}$$

$$\omega(t) = (t-d_1)(t-d_2)...(t-d_n).$$

Заметим, что при построении квадратуры (3.3) было использовано представление интерполяционного полинома в форме Лагранжа, которое предполагает выполнения условия $x_i \neq x_j$ при $i \neq j$.

Положим, $\rho(x) \equiv 1$ и рассмотрим несколько конкретных формул.

3.2.1. Формула прямоугольников с кратными узлами

$n = 2,\ d_1 = d_2 = 0.$

Оценка погрешности может быть сделана по выведенной ранее формуле, а квадратурную формулу необходимо построить заново, т.к. в данном случае должен быть использован интерполяционный полином Эрмита.

$$D = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} t^2 dt = \frac{1}{3},$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b G_2(x)dx = \int_a^b \left[f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\right]dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$R_2(f)=\frac{1}{3}f''(\xi)\left(\frac{b-a}{2}\right)^3,$$

$$\left|R_2(f)\right|\le\frac{1}{3}\max_{[a,b]}\left|f''(x)\right|\left(\frac{b-a}{2}\right)^3.$$

3.2.2. Ньютоново правило трех восьмых

$$n=4,\ d_1=-1,\ d_2=-\frac{1}{3},\ d_3=\frac{1}{3},\ d_4=1.$$

$$D=\int_{-1}^{1}\frac{\left|(t^2-1)(t^2-1/9)\right|}{24}dt=\frac{1513}{87480},$$

$$D_1=\int_{-1}^{1}\frac{(t+1/3)(t-1/3)(t-1)}{(-1+1/3)(-1-1/3)(-1-1)}dt=\frac{1}{4},$$

$$D_2=\int_{-1}^{1}\frac{(t+1)(t-1/3)(t-1)}{(-1/3+1)(-1/3-1/3)(-1/3-1)}dt=\frac{3}{4},$$

$$D_3=\int_{-1}^{1}\frac{(t+1)(t+1/3)(t-1)}{(1/3+1)(1/3+1/3)(1/3-1)}dt=\frac{3}{4},$$

$$D_4=\int_{-1}^{1}\frac{(t+1)(t+1/3)(t-1/3)}{(1+1)(1+1/3)(1-1/3)}dt=\frac{1}{4}.$$

$$\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b L_4(x)dx=\frac{b-a}{8}\left[f(a)+3f\left(a+\frac{b-a}{3}\right)+3f\left(a+\frac{2(b-a)}{3}\right)+f(b)\right].$$

$$R_4(f)=\frac{1513}{87480}f^{(IV)}(\xi)\left(\frac{b-a}{2}\right)^5,$$

$$\left|R_4(f)\right|\le\frac{1513}{2799360}\max_{[a,b]}\left|f^{(IV)}(\xi)\right|(b-a)^5.$$

Большая часть машинного времени при решении задач на ЭВМ тратится на вычисление функции, поэтому может показаться, что приведенная формула является менее эффективной, чем формула Симпсона. Дело в том, что при той же степени полиномов, для которых эта формула точна, она требует на одно вычисление функции больше, чем формула Симпсона. Можно, однако, показать, что выведенная оценка погрешности является завышенной. Для данной формулы справедливо:

$$R_4(f) = -\frac{1}{6480} f^{(IV)}(\xi)(b-a)^5.$$

Для построения составной ньютоновой формулы трех восьмых разобьем отрезок $[a,b]$ на $3m$ отрезков точками:

$$x_0 = a, x_1, x_2, \ldots, x_{3m} = b, x_{i+1} - x_i = h, h = \frac{b-a}{3m}.$$

К каждому из отрезков $[x_{3i}, x_{3i+3}]$ применим ньютоново правило трех восьмых:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(x_{3i+3} - x_{3i})}{8} [f(x_{3i}) + 3f(x_{3i+1}) + 3f(x_{3i+2}) + f(x_{3i+3})] =$$

$$= \frac{2h}{8} [f(x_0) + f(x_{3m}) + 3\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{3i+1}) + 3\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{3i+2}) + 2\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{3i}),$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_h = \frac{3h}{8}[I_1 + 3I_3 + 2I_2].$$

Здесь $I_1 = f(a) + f(b), I_2 = \sum_{i=1}^{m-1} f(x_{3i}), I_3 = \sum_{i=0}^{m-1} f(x_{3i+1}) + f(x_{3i+2}).$

Оценка погрешности:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(x_{3i+3} - x_{3i})}{8} [f(x_{3i}) + 3f(x_{3i+1}) + 3f(x_{3i+2}) + f(x_{3i+3})] =$$

$$= \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_{3i}}^{x_{3i+3}} f(x)dx - \frac{(x_{3i+3} - x_{3i})}{8} \cdot [f(x_{3i}) + 3f(x_{3i+1}) + 3f(x_{3i+2}) + f(x_{3i+3})] =$$

$$= -\sum_{i=0}^{m-1} \frac{(3h)^5}{6480} f^{(IV)}(\xi_i) = -\frac{(3h)^4 3mh}{6480} \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} f^{(IV)}(\xi_i) = -\frac{3^4 h^4 (b-a)}{6480} f^{(IV)}(\bar{\xi}) = Kh^4,$$

где $K = -\frac{3^4 (b-a)}{6480} f^{(IV)}(\bar{\xi}), \bar{\xi} \in [a,b], \xi_i \in [x_{3i}, x_{3i+3}].$

3.3. Апостериорные оценки погрешности

3.3.1. Главный член погрешности

Пусть нам надо вычислить следующий интеграл:

$$I = \int_a^b f(x)dx.$$

Применение квадратурной формулы на сетке отрезка $[a,b]$ с шагом $h = (b-a)/n$, позволит получить приближенное значение I^h вычисляемого интеграла. Предположим, что погрешность квадратурной формулы может быть записана в следующем виде:

$$I - I^h = Ch^k + o(h^k),$$

где величины $C \neq 0$ и $k > 0$ не зависят от *h*.

Величина Ch^k называется главным членом погрешности квадратурной формулы. Число *k* называется порядком точности квадратурной формулы.

Для достаточно гладкой функции *f* существует главный член погрешности каждой составной квадратурной формулы:

$$I \approx I^h = \sum_{i=0}^{n} h \sum_{j=0}^{n} a_j f(x_{i-1/2} + t_j h/2). \tag{3.6}$$

Теорема. Пусть $\sum_{j=0}^{m} a_j = 1$ и *k* – минимальное среди натуральных чисел, для которых величина

$$\sigma_k = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} t^k dt - \sum_{j=0}^{m} a_j t_j^k$$

отлична от нуля. Если функция *f* непрерывно дифференцируемая *k* раз на отрезке $[a,b]$, то для погрешности квадратурной формулы (3.6) справедливо представление:

$$I - I^h = Ch^k + o(h^k),$$

$$C = \frac{\sigma_k}{2^k k!} \int_a^b f^{(k)}(x) dx = \frac{\sigma_k}{2^k k!} \left(f^{(k-1)}(b) - f^{(k-1)}(a) \right).$$

Следствие 1. Для квадратурной формулы прямоугольников справедливо следующее представление:

$$I - I_{пр}^h = C_{пр} h^2 + o(h^2),\ C_{пр} = \frac{1}{24} \int_a^b f''(x) dx.$$

Для квадратурной формулы трапеций справедливо следующее представление

$$I - I_{тр}^h = C_{тр} h^2 + o(h^2),\ C_{тр} = -\frac{1}{12} \int_a^b f''(x) dx.$$

Для квадратурной формулы Симпсона справедливо следующее представление:

$$I - I_C = C_C h^4 + o(h^4),\ C_C = -\frac{1}{2880} \int_a^b f^{(4)}(x) dx.$$

Следствие 2. Уменьшение шага h в M раз приводит к уменьшению погрешности квадратурной формулы примерно в M^k раз. Если $h_1 = h / M$, то

$$I - I^{h_1} \approx C h_1^k = \frac{1}{M^k} C h^k \approx \frac{1}{M^k} (I - I^h).$$

Частным случаем этого результата является результат с уменьшением шага h в два раза: уменьшение шага h в два раза приводит к уменьшению погрешности примерно в 2^k раз:

$$I - I^{h/2} \approx \frac{1}{2^k} C h^k \approx \frac{1}{2^k} (I - I^h).$$

3.3.2. Правило Рунге оценки погрешности

Непосредственное использование формул из теоремы для оценки погрешности $I - I^h$ неудобно. На практике поступают по-другому.

Так как

$$I - I^{h} \approx Ch^{k},\ C = \text{const}$$

и, кроме того, справедливо

$$I - I^{h/2} \approx \frac{1}{2^{k}} Ch^{k},$$

то можем получить

$$I^{h/2} - I^{h} \approx \frac{1}{2^{k}} Ch^{k} (2^{k} - 1).$$

Учитывая в последнем выражении, что

$$I - I^{h} \approx Ch^{k},$$

получаем

$$I^{h/2} - I^{h} \approx (I - I^{h/2})(2^{k} - 1).$$

Окончательно можем записать

$$I - I^{h/2} \approx \frac{I^{h/2} - I^{h}}{2^{k} - 1}.$$

Использование этой формулы на практике называют правилом Рунге или правилом двойного пересчета.

Замечание 1. Так как

$$I - I^{h/2} \approx \frac{1}{2^{k}} Ch^{k} \approx \frac{1}{2^{k}} (I - I^{h}),$$

то можем записать

$$I - I^{h} \approx 2^{k} (I - I^{h/2}).$$

Используя формулу правила Рунге

$$I - I^{h/2} \approx \frac{I^{h/2} - I^{h}}{2^{k} - 1},$$

можем получить следующее представление

$$I - I^{h} \approx \frac{2^{k} (I^{h/2} - I^{h})}{2^{k} - 1}.$$

Если формула правила Рунге используется для апостериорной оценки погрешности значения $I^{h/2}$, то полученная формула может быть использована для приближенной оценки погрешности значения I^{h}.

Замечание 2. Заменив h на $2h$ формула правила Рунге приводится к виду:

$$I - I^{h} \approx \frac{I^{h} - I^{2h}}{2^{k} - 1}.$$

Так как для формул прямоугольников и трапеций $k = 2$, а для формулы Симпсона $k = 4$, то можем записать:

$$I - I_{пр}^{h} \approx \frac{1}{3}(I_{пр}^{h} - I_{пр}^{2h}),$$

$$I - I_{тр}^{h} \approx \frac{1}{3}(I_{тр}^{h} - I_{тр}^{2h}),$$

$$I - I_{C}^{h} \approx \frac{1}{15}(I_{C}^{h} - I_{C}^{2h}).$$

Простейшие апостериорные оценки погрешности не по правилу Рунге

Так как по следствию 1 из теоремы можем записать:

$$C_{тр} = -2C_{пр},$$

то

$$I_{тр}^{h} - I_{пр}^{h} = (C_{пр} - C_{тр})h^{2} \to o(h^{2}) \approx 3C_{пр}h^{2},$$

что позволяет записать:

$$I - I_{пр}^{h} \approx \frac{1}{3}(I_{тр}^{h} - I_{пр}^{h}),$$

$$I - I_{тр}^{h} \approx -\frac{2}{3}(I_{тр}^{h} - I_{пр}^{h}).$$

Экстраполяция Ричардсона

Так как мы имеем $I - I^{h/2} \approx \frac{1}{2^{k}}Ch^{k}$, $\frac{Ch^{k}}{2^{k}} \approx \frac{I^{h/2} - I^{h}}{2^{k} - 1}$, то тогда можем записать:

$$I \approx I^{h/2} = \frac{1}{2^k - 1}(I^{h/2} - I^h)\,. \qquad (3.7)$$

Таким образом, квадратурная формула I^h порождает новую квадратурную формулу (3.7), имеющую более высокий порядок точности.

Предположим, что для погрешности квадратурной формулы справедливо представление:

$$I - I^h = C_1 h^{k_1} + C_2 h^{k_2} + \ldots + C_N h^{k_N} + o(h^{k_N})$$

при всех $N = 1,2,...,$ причем $0 < k_1 < k_2 < ... < k_N < ....$ Такое представление приводит к методу экстраполяцию Ричардсона. Пусть шаг h измельчается по правилу:

$$h_j = h_{j-1}/2, j = 1,2,..., N,$$

тогда, положив

$$I_0^h = I^h,$$

вычисления последующих приближений осуществляют по рекуррентному соотношению:

$$I_N^h = I_{N-1}^{h/2} + \frac{1}{2^{k_N} - 1}(I_{N-1}^{h/2} - I_{N-1}^h), N = 1,2,... \,.$$

3.3.3. Метод Ромберга

Для формулы трапеций представление экстраполяции Ричардсона применимо при $k_1 = 2,\, k_2 = 4,...,\, k_N = 2N$. Метод, применяющий экстраполяцию Ричардсона для формулы трапеций, называется методом Ромберга. Первый шаг метода Ромберга приводит к следующему уточнению квадратурной формулы трапеций:

$$I_{тр}^{h/2}+\frac{1}{3}(I_{тр}^{h/2}-I_{тр}^{h})=\frac{4}{3}I_{тр}^{h/2}-\frac{1}{3}I_{тр}^{h}=$$
$$=\frac{2h}{3}\left[\frac{f_0+f_n}{2}+\sum_{i=1}^{2n-1}f_{i/2}\right]-\frac{h}{3}\left[\frac{f_i+f_n}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f_i\right]=$$
$$=\frac{h}{6}\left(f_0+f_n+4\sum_{i=1}^{h}f_{i-1/2}+2\sum_{i=1}^{h-1}f_i\right)=I_C^h.$$

Таким образом, получили формулу Симпсона.

Вывод квадратур Ромберга основывается на аппроксимации интеграла по составной формуле трапеций в следующем виде:

$$I=I^h+C_2^{(0)}h^2+C_4^{(0)}h^4+...+C_{2m}^{(0)}h^{2m}+o(h^{2m}), \qquad (3.8)$$

где величины $C_i^{(0)}, i=2,4,...$ не зависят от h.

Определим теперь новую аппроксимацию интеграла следующей формулой:

$$I_1=\frac{1}{3}\left[4I^{h/2}-I^h\right].$$

Коэффициенты этой линейной комбинации выбраны таким образом, чтобы при вычислении с помощью экстраполяционной формулы Ричардсона (3.8) ошибки аппроксимации формула I_1 коэффициент при h^2 обращалась в ноль. Следовательно,

$$I_1=I^h+C_4^{(1)}h^4+\ldots+o(h^{2m}).$$

Интеграл аппроксимируется с четвертым порядком точности (метод Симпсона). Процесс можно продолжить, выводя новую аппроксимацию I_2 как линейную комбинацию I_1^h и $I_1^{h/2}$, разложение которой по h не будет содержать члена порядка h^4. В общем случае мы можем построить треугольный массив:

$$
\begin{array}{l}
I^{h} \\
I^{h/2} I_1^{h} \\
I^{h/4} I_1^{h/2} I_2^{h} \\
\dots,
\end{array}
$$

где

$$I_k^{h/2^{j-1}} = \left[4^j I_{k-1}^{h/2^j} - I_{k-1}^{h/2^{j-1}}\right] / (4^j - 1).$$

Элементы i-го столбца этого массива сходятся к значению интеграла со скоростью порядка h^{2i}.

3.4. Квадратурные формулы Гаусса

Поставим следующую оптимизационную задачу.

При заданном числе n узлов интерполяции построить квадратуру, точную для многочленов наиболее высокой степени.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx S_n(f) = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} D_j f(x_j). \tag{3.9}$$

В отличие от предыдущих пунктов в квадратуре s будем считать неизвестными коэффициенты d и узлы j интерполирования x_j. Квадратуры, построенные таким образом, будем называть квадратурами Гаусса.

Пусть имеется квадратурная формула, точная для любого многочлена $P_m(x)$ степени m.

$$I(P_m) = S_n(P_m).$$

Имеем:

$$R_n(f) = R_n(P_m + f - P_m) = R_n(P_m) + R_n(f - P_m),$$

$$\left|R_n(f)\right| \le \int_a^b \left| f(x)\rho(x)\right| dx + \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n}\left|D_j\right|\left| f(x_j)\right| \le V_n \sup_{[a,b]}\left| f(x)\right|,$$

где $V_n = \int_a^b \left|\rho(x)\right| dx + \left(\frac{b-a}{2}\right)\sum_{j=1}^{n}\left|D_j\right|.$

Отсюда

$$\left|R_n(f)\right| \le V_n \sup_{[a,b]}\left|f(x)\right|.$$

Взяв нижнюю грань по всем многочленам степени m, получим оценку:

$$\left|R_n(f)\right| \le V_n E_m(f), \text{где}$$

$$E_n(f) = \inf_{P_m} \sup_{[a,b]}\left|f(x) - P_m(x)\right|.$$

Отсюда следует, что постановка оптимизационной задачи разумна.

При $P_m(x) = \sum_{q=0}^{m} a_q x^q$ имеем:

$$R_n(P_m) = \sum_{q=0}^{m} a_q R_n(x^q).$$

Чтобы квадратура была точна для многочленов степени m необходимо и достаточно, чтобы она была точна для всех функций $x_q, q = 0,..., m.$ Следовательно, должны выполняться соотношения:

$$R_n(x^q) = \int_a^b x^q \rho(x)dx - \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} D_j \cdot x_j^q = 0, q = 0,...m.$$

Получили систему из m+1 уравнения относительно 2n неизвестных $x_1, x_2,..., x_n, D_1, D_2,...D_n$.

Займемся построением квадратур, соответствующих максимальному значению m = 2n-1.

Лемма 1. Если $x_1,..., x_n$ – узлы квадратуры, точной для всех многочленов степени 2n-1, то

$$\int_a^b \omega_n P_{n-1}(x)\rho(x)dx = 0.$$

При $\omega_n(x) = (x - x_1)(x - x_2)...(x - x_n)$ и $P_{n-1}(x)$ – произвольном многочлене степени n-1.

Рассмотрим $Q_{2n-1}(x) = \omega_n(x)P_{n-1}(x)$. Квадратура точна для этого полинома.

$$\int_a^b \omega_n P_{n-1}(x)\rho(x)dx = \int_a^b Q_{2n-1}(x)\rho(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} D_j Q_{2n-1}(x_j) = 0,$$

т.к. $Q_{2n-1}(x_j) = (x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)P_{n-1}(x)\big|_{x=x_j} = 0.$

Предположим далее, что $P(x) > 0$ почти всюду на $[a,b]$. Можно построить требуемую квадратурную формулу. Для этого зададимся узлами интерполяции $x_1,...,x_n, \Psi_n(x_j) = 0$ и построим квадратуру Ньютона-Котеса.

Получим требуемую квадратуру:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} G_j f(x_j). \tag{3.10}$$

При нашем предположении $(\rho(x) > 0)$ не существует квадратуры, точной для многочленов степени $2n$.

В самом деле, возьмем $Q_{2n}(x) = (x-x_1)^2...(x-x_n)^2$, тогда левая часть (5.9) примет вид:

$$\int_a^b ((x-x_1)^2...(x-x_n)^2)\rho(x)dx > 0,$$

а правая равна 0, т.к. $f(x_j) = Q_{2n}(x) = (x-x_1)^2...(x-x_n)^2\Big|_{x=x_j} = 0.$

Докажем положительность коэффициентов G_j.

$\left(\dfrac{\Psi_n(x)}{x-x_\ell}\right)^2$ – многочлен степени $2n$-2, обращающийся в нуль во всех точках $x_j \neq x_\ell$.

Квадратура (5.10) будет точна для $f(x)=1$, поэтому $\int_a^b \rho(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} G_j$

или $\int_a^b \rho(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} \left|G_j\right|$.

Возвращаясь к формулам оценки погрешности, получим:

$$V_n = \int_a^b \rho(x)dx + \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n}\left|G_j\right| = 2\int_a^b \rho(x)dx,$$

$$\left|R_n(f)\right| \le 2\left(\int_a^b \rho(x)dx\right)E_{2n-1}(f). \qquad (3.11)$$

Приведем еще одну оценку погрешности формул Гаусса через $\max\limits_{[a,b]}\left|f^{(n)}(x)\right|$.

Пусть $L_{2n}(x)$ – интерполяционный многочлен Лагранжа с двукратными узлами интерполяции $x_1, x_2, ... x_n$, т.е.

$$L_{2n}(x_j) = f(x_j), L'_{2n}(x_j) = f'(x_j).$$

Так как

$$f(x) - L_{2n}(x) = f(x; x_1; x_1; ... x_n, x_n)\Psi_n^2(x).$$

Поскольку $R_n(L_{2n}(x)) = 0(L_{2n}(x)$ – многочлен степени 2*n*-1), то

$$R_n(f) = R_n(f(x; x_1; x_1; ... x_n, x_n)\Psi_n^2(x)) = \int_a^b f(x; x_1; x_1; ... x_n, x_n)\Psi_n^2(x)\rho(x)dx -$$

$$-\frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{n} G_j f(x_j; x_1; x_1; ... x_n, x_n)\Psi_n^2(x_j).$$

Воспользовавшись неотрицательностью $\Psi^2(x)\rho(x)$, применим обобщенную формулу Лагранжа, получим:

$$R_n(f) = f(\xi; x_1; x_1; ... x_n, x_n)\int_a^b \Psi_n^2(x)\rho(x)dx.$$

Выразив $f(\xi; x_1; x_1; \ldots x_n, x_n)$ через производную получим окончательно:

$$R_n(f) = f^{(2n)}(\overline{\xi}) \int_a \frac{\Psi_n(x)}{(2n)!} \rho(x) dx. \qquad (3.12)$$

Приведем узлы и коэффициенты некоторых квадратур Гаусса.

Пусть $p(x) \equiv 1$, $[a,b] \equiv [-1;1]$, Тогда имеют место следующие соотношения:

$$n = 1, \quad \Psi_1(x) = x + \alpha,$$

$$\int_{-1}^{1} 1(x + \alpha) dx = 0,$$

$$\frac{x^2}{2} + \alpha x \Big|_{-1}^{1} = 2\alpha = 0 \text{ только при } \alpha = 0,$$

$$\Psi_1(x) = x, d_1 = 0,$$

$$G_1 = \frac{2}{1-(-1)} \int_{-1}^{1} 1 dx = 2.$$

$$n = 2, \quad \Psi_2(x) = x^2 + \alpha x + \beta,$$

$$\int_{-1}^{1} (x^2 + \alpha x + \beta) 1 dx = \frac{x^3}{3}\Big|_{-1}^{1} = \alpha \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = \beta x\Big|_{-1}^{1} =$$

$$= \frac{2}{3} + 2\beta = 0, \beta = -\frac{1}{3},$$

$$\int_{-1}^{1} (x^2 + \alpha x + \beta) x dx = \int_{-1}^{1} (x^3 + \alpha x^2 + \beta x) x dx =$$

$$= \frac{x^4}{4}\Big|_{-1}^{1} + \alpha \frac{x^3}{3}\Big|_{-1}^{1} + \beta\Big|_{-1}^{1} \frac{2}{3} = \frac{2}{3}\alpha = 0, \alpha = 0,$$

$$x^2 - \frac{1}{3} = 0, x = \pm\frac{\sqrt{3}}{3} \approx 0.57735026,$$

$$G_1 = \frac{2}{2}\int_{-1}^{1} \frac{x - \frac{\sqrt{3}}{3}}{-\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{\sqrt{3}}{3}} dx = -\frac{3}{2\sqrt{3}}\left[\frac{x^2}{2}\bigg|_{-1}^{1} - \frac{\sqrt{3}}{3} x\bigg|_{-1}^{1} \right] = -\frac{3}{2\sqrt{3}}\left(-\frac{\sqrt{3}}{3} 2 \right) = 1,$$

$$G_2 = \frac{2}{2}\int_{-1}^{1} \frac{x + \frac{\sqrt{3}}{3}}{\frac{\sqrt{3}}{3} - \left(-\frac{\sqrt{3}}{3} \right)} dx = -\frac{3}{2\sqrt{3}}\left[\frac{x^2}{2}\bigg|_{-1}^{1} + \frac{\sqrt{3}}{3} x\bigg|_{-1}^{1} \right] = 1.$$

Продолжая дальше, получим:

$n = 1$

$d_1 = 0, \quad G_1 = 2.$

$n = 2$

$d_1 = -0.5773502691896258, \quad d_2 = 0.5773502691896258,$

$G_1 = 1, \quad G_2 = 1.$

$n = 3$

$d_1 = -0.7745966692414834, d_2 = 0,$

$d_1 = 0.7745966692414834,$

$G_1 = \frac{5}{9} = 0.5555555556, G_2 = \frac{8}{9} = 0.8888888889,$

$G_1 = \frac{5}{9} = 0.5555555556.$

$n = 4$

$d_1 = -0.8611363115940526,$

$d_2 = -0.3399810435848563,$

$\mathrm{d}_3 = 0.3399810435848563,$

$d_4 = 0.8611363115940526,$

$G_1 = 0.3478548451,$

$G_2 = 0.6521451549,$

$G_3 = 0.6521451549,$

$G_4 = 0.3478548451.$

$n = 5$

$d_1 = -0.9061798459386640,$

$d_2 = -0.5384693101056830 9,$

$d_3 = 0,$

$d_4 = 0.5384693101056830 9,$

$d_5 = 0.9061798459386640,$

$G_1 = 0.2369268851,$

$G_2 = 0.4786286705,$

$G_3 = 0.5688888888,$

$G_4 = 0.4786286705,$

$G_5 = 0.2369268851.$

$n = 6$

$-d_1 = d_6 = 0.9324695142031520,$

$-d_2 = d_5 = 0.6612093864662645,$

$-d_3 = d_4 = 0.2386191860831970,$

$G_1 = G_6 = 0.1713244924,$

$G_2 = G_5 = 0.3607615730,$

$G_3 = G_4 = 0.4679139346.$

$n = 7$

$-d_1 = d_7 = 0.9491079123427585,$

$-d_2 = d_6 = 0.7415311855993944,$

$-d_3 = d_5 = 0.4058451513773972,$

$d_4 = 0,$

$G_1 = G_7 = 0.1294849661688696 9,$

$G_2 = G_6 = 0.2797053914892767,$

$G_3 = G_5 = 0.3818300505051189,$

$G_4 = 0.4179591836734693 8.$

4. Численное дифференцирование

Методы численного дифференцирования используют в тех случаях, когда нахождение производной очень сложно, требует длинных и громоздких расчетов, а также в случае таблично заданных функций.

4.1.1. Простейшие формулы численного дифференцирования

Вычисление первой производной. Предположим, что в окрестности точки *x* функция *f* дифференцируема достаточное число раз. Исходя из определения производной

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x},$$

естественно попытаться использовать для ее вычисления две простейшие приближенные формулы:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \qquad \text{(правая)} \tag{4.1}$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \qquad \text{(левая)} \tag{4.2}$$

соответствующие выбору фиксированных значений $\Delta x = h$ и $\Delta x = -h$. Здесь $h > 0$ – малый параметр (шаг). Разностные отношения в правых частях формул (4.1) и (4.2) часто называют правой и левой разностными производными.

Для оценки погрешностей:

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

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

формул численного дифференцирования (погрешностей аппроксимации) воспользуемся формулами Тейлора:

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(\xi_\pm)}{2} h^2. \tag{4.3}$$

Здесь и ниже ξ_+ и ξ_- – некоторые точки, расположенные на интервалах $(x, x+h)$ и $(x-h, x)$ соответственно. Подставляя разложения (4.3) в выражения для $r_\pm$, получаем $r_+(x,h) = -\frac{1}{2} f''(\xi_+)h,\ r_-(x,h) = \frac{1}{2} f''(\xi_-)h$. Следовательно,

$$|r_+(x,h)| \le \frac{1}{2} M_2 h, \quad M_2 = \max_{[x,x+h]} |f''(\xi)|,$$

$$|r_-(x,h)| \le \frac{1}{2} M_2 h, \quad M_2 = \max_{[x-h,x]} |f''(\xi)|.$$

Таким образом, формулы (4.1), (4.2) имеют первый порядок точности по h. Иначе говоря, правая и левая разностные производные аппроксимируют производную $f'(x)$ с первым порядком точности.

Соответствующая приближенная формула центральной разностной производной имеет вид:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Величину в правой части этой формулы часто называют центральной разностной производной.

Подставляя в выражение для погрешности

$$r_0(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

соответствующие разложения по формуле Тейлора

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(x)}{2} h^2 \pm \frac{f^{(3)}(\xi_\pm)}{6} h^3,$$

получим $r_0(x,h) = -\frac{f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)}{12} h^2$. Следовательно, справедлива оценка погрешности

$$|r_0(x,h)| \le \frac{M_3}{6} h^2, \quad M_3 = \max_{[x-h,x+h]} |f^{(3)}(\xi)|.$$

Таким образом, центральная разностная производная аппроксимирует производную $f'(x)$ со вторым порядком точности относительно h.

Вычисление второй производной. Наиболее простой и широко применяемой для приближенного вычисления второй производной является следующая формула:

$$f''(x) \approx \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}. \tag{4.4}$$

Величину в правой части этого приближенного равенства часто называют второй разностной производной.

Подставляя в выражение для погрешности

$$r(x,h) = f''(x) - \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2},$$

соответствующие разложения по формуле Тейлора

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 \pm \frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_\pm)}{24}h^4,$$

получим $r(x,h) = -\dfrac{f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)}{24}h^2$.

Следовательно, $|r(x,h)| \le \dfrac{M_4}{12}h^2$, $M_4 = \max\limits_{[x-h,\, x+h]} \left| f^{(4)}(\xi) \right|$.

Таким образом, формула (4.4) имеет второй порядок точности.

Использование разложения в ряд Тейлора не позволяет развить идею численного дифференцирования на табличные функции для целей построения производной требуемого порядка точности.

Для вычисления $f'(x)$ и $f''(x)$ могут потребоваться формулы любого порядка точности. В таких формулах с ростом порядка точности возрастает и число используемых значений функции. В качестве примера приведем формулы:

$$f'(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h},$$

$$f''(x) \approx \frac{-f(x-2h)+16f(x-h)-30f(x)+16f(x+h)-f(x+2h)}{12h^2},$$

имеющие четвертый порядок точности.

Опишем другой подход. Пусть функция $f(x)$ задана на отрезке $[a;b]$ таблицей значений в точках $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$. Можно решать два вида задач:

1) найти приближенное значение производной $k-$ого порядка функции $f(x)$ в произвольной точке $x \in [a;b]$;

2) найти таблично заданную функцию, являющуюся приближением к производной $f^{(k)}$ на отрезке $[x_0^*; x_m^*] \subset [a;b]$.

Первая задача является основной. Вторая после определения аргументов x_i^* сводится к первой. Поэтому будем считать, что задача численного дифференцирования сводится к вычислению приближенного значения производной в точке $x \in [a;b]$ и оценке ее погрешности. Для решения этой задачи функцию $f(x)$ заменяют аналитическим приближением, которое имеет $k-$ую производную, то есть

$$f(x) \approx p(x),\ x \in [a;b],\ f^{(k)}(x) \approx p^{(k)}(x),\ \ x \in [a;b].$$

При дифференцировании приближенных формул может произойти существенная потеря точности, то есть погрешность формулы $f^{(k)}(x) \approx p^{(k)}(x),\ \ x \in [a;b]$ будет значительно больше погрешности исходного приближения $f(x) \approx p(x),\ x \in [a;b]$. Задача численного дифференцирования относится к числу задач, неустойчивых по исходным данным, т.е. таких, решение которых при малых погрешностях исходных данных приводит к большим погрешностям в результате.

4.1.2.Дифференцирование полинома Ньютона

Если функция задана при помощи таблицы с постоянным шагом h, а ее приближение производится первым интерполяционным полиномом Ньютона, то для произвольной точки $x \in [x_0; x_1]$ и $t = \dfrac{x - x_0}{h}$ получим:

$$f'(x) \approx P_n'(x) = \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2 - 6t + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \ldots\right).$$

Если производная вычисляется в табличном аргументе, то $x = x_0$, $t = 0$ и производная может быть найдена по формуле:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \ldots\right).$$

Погрешность найденного $P_n'(x)$ равна производной остаточного члена формулы:

$$f(x) \approx P_n(x) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{3!}\Delta^3 y_0 + \ldots$$

При малых h приближенное значение искомой погрешности будет находиться по формуле:

$$R_n'(x) \approx \frac{\Delta^{n+1} y_0}{h^{n+1}(n+1)!} Q_{n+1}'(x),$$

где $Q_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$.

Погрешность производной, найденной в точке $x = x_0$, можно вычислить по формуле:

$$R_n'(x) \approx (-1)^n \frac{\Delta^{n+1} y_0}{h(n+1)},$$

так как при этом $Q_{n+1}'(x_0) = (-1)^n n! h^n$.

Приведем еще один подход получения производных функции на основе полинома Ньютона. Запишем полином в виде:

$$P(t) = a_0 + a_1(t - t_0) + a_2(t - t_0)(t - t_1),$$

где $a_0 = f(t_0), a_1 = (f(t_1) - f(t_0))/(t_1 - t_0)$, и

$$a_2 = \frac{\dfrac{f(t_2) - f(t_1)}{t_2 - t_1} - \dfrac{f(t_1) - f(t_0)}{t_1 - t_0}}{(t_2 - t_0)}.$$

Производная $P(t)$ равна

$$P'(t) = a_1 + a_2((t - t_0) + (t - t_1)), \tag{4.5}$$

и если ее вычислить в точке $t = t_0$, то в результате можно получить

$$P'(t_0) = a_1 + a_2(t_0 - t_1) \approx f'(t_0). \tag{4.6}$$

Рассмотрим разные варианты.

Если $t_0 = x, t_1 = x + h$ и $t_2 = x + 2h$, то

$$a_1 = \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$
$$a_2 = \frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{2h^2}.$$

Затем подставив эти значения в (3.6), получим:

$$P'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{-f(x) + 2f(x+h) - f(x+2h)}{2h}.$$

Упростим выражение и получим

$$P'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} \approx f'(x). \tag{4.7}$$

Это и есть формула правой разности второго порядка для $f'(x)$.

Если $t_0 = x, t_1 = x + h$ и $t_2 = x - h$, то

$$a_1 = \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$
$$a_2 = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{2h^2}.$$

Затем подставим эти значения в (4.6) и получим:

$$P'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{-f(x+h) + 2f(x) - f(x-h)}{2h}.$$

Упростив это выражение, получим:

$$P'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \approx f'(x),$$

формулу центрированной разности второго порядка для $f'(x)$.

Если $t_0 = x, t_1 = x - h$ и $t_2 = x - 2h$, то

$$a_1 = \frac{f(x) - f(x-h)}{h},$$

$$a_2 = \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{2h^2}.$$

Подставим эти значения в (4.7) и упростим, тогда получим

$$P'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} \approx f'(x),$$

формулу левой разности второго порядка для $f'(x)$.

4.1.3. Дифференцирование полинома Лагранжа

Для вычисления значения функции в абсциссе, которая лежит с одной стороны от точки x_0, нельзя использовать формулу центрированной разности. Формулы для равноотстоящих абсцисс, которые лежат справа (или слева) от точки x_0, называют формулами для правых (или левых) разностей. Эти формулы можно получить дифференцированием интерполяционного полинома Лагранжа. Ниже приведены некоторые общие формулы для правых и левых разностей.

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h} \qquad \text{(правая разность),}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{3f_0 + 4f_{-1} - f_{-2}}{2h} \qquad \text{(левая разность),}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2} \qquad \text{(правая разность)},$$

$$f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_{-1} + 4f_{-2} - f_{-3}}{h^2} \qquad \text{(левая разность)}.$$

В качестве примера опишем способ построения следующей формулы:

$$f''(x_0) \approx \frac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2}.$$

Начнем с интерполяционного полинома Лагранжа для $f(t)$, построенного по точкам x_0, x_1, x_2, x_3:

$$f(t) \approx f_0 \frac{(t-x_1)(t-x_2)(t-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} + f_1 \frac{(t-x_0)(t-x_2)(t-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} +$$
$$+ f_2 \frac{(t-x_0)(t-x_1)(t-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + f_3 \frac{(t-x_0)(t-x_1)(t-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}.$$

Продифференцируем дважды произведения в числителях и получим:

$$f''(t) \approx f_0 \frac{2((t-x_1)+(t-x_2)+(t-x_3))}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} + f_1 \frac{2((t-x_0)+(t-x_2)+(t-x_3))}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} +$$
$$+ f_2 \frac{2((t-x_0)+(t-x_1)+(t-x_3))}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + f_3 \frac{2((t-x_0)+(t-x_1)+(t-x_2))}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}.$$

Затем подстановка $t = x_0$ и тот факт, что $x_i - x_j = (i-j)h$, дадут

$$f''(x_0) \approx f_0 \frac{2((x_0-x_1)+(x_0-x_2)+(x_0-x_3))}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} +$$
$$+ f_1 \frac{2((x_0-x_0)+(x_0-x_2)+(x_0-x_3))}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + f_2 \frac{2((x_0-x_0)+(x_0-x_1)+(x_0-x_3))}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} +$$
$$+ f_3 \frac{2((x_0-x_0)+(x_0-x_1)+(x_0-x_2))}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} =$$

$$= f_0 \frac{2((-h)+(-2h)+(-3h))}{(-h)(-2h)(-3h)} + f_1 \frac{2((0)+(-2h)+(-3h))}{(h)(-h)(-2h)} +$$

$$+ f_2 \frac{2((0)+(-h)+(-3h))}{(2h)(h)(-h)} + f_3 \frac{2((0)+(-h)+(-2h))}{(3h)(2h)(h)} =$$

$$= f_0 \frac{-12h}{-6h^3} + f_1 \frac{-10h}{2h^3} + f_2 \frac{-8h}{-2h^3} + f_3 \frac{-6h}{6h^3} = \frac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2}.$$

Пример. Дана сеточная функция (табл. 3), являющаяся сеточным представлением функции $y(x) = \dfrac{1}{x}$.

Таблица 3

			x_2	x_3	x_4	x_5
i	0	1	2	3	4	5
x_i	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
f_i	1,000000	0,83333333	0,7142857	0,6250000	0,5555555	0,500000

Заданы также порядок $t = 2$ относительно шага h, который необходимо обеспечить при решении задачи, и точка $x_j = 1{,}4$.

Требуется вычислить значение первой производной $f'(1{,}4)$ и второй производной $f''(1{,}4)$ с помощью различных узлов и соответствующих формул.

Так как шаг задания сеточной функции постоянный $h = x_{i+1} - x_i = 0{,}2$, точка $x_j = 1{,}4$ находится внутри сетки Ω_n, то для вычисления производной в этой точке выбирается формула центральной разностной производной, имеющая второй порядок аппроксимации относительно шага h. При этом центральная точка шаблона совпадает с точкой $x_j = 1{,}4$.

Выберем следующие узлы:

$$x_i = 1{,}4\,(i = 2);\ x_{i-1} = 1{,}2\,(i - 1 = 1);\ x_{i+1} = 1{,}6\,(i + 1 = 3).$$

Подсчитаем искомое значение производной по формуле:

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{0{,}6250000 - 0{,}8333333}{2 \cdot 0{,}2}.$$

Прежде чем выполнить вычисление, необходимо определить количество знаков, которое сохраняется при этом. Ошибка метода определяется по формуле $\frac{h^2}{6} M_{3,i}$. Для ее вычисления необходимо сначала определить $M_{3,i} = \max\limits_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} |f'''(x)|$. Поэтому воспользуемся интерполяционным многочленом Ньютона с конечными разностями:

$$f_i''' \approx N_3'''(x_i) = \frac{\Delta^3 f}{h^3},$$

где $\Delta^3 f$ – конечная разность третьего порядка. Эта разность может быть вычислена по значениям функции f_i в четырех точках. Возьмем точки x_2, x_3, x_4, x_5. При этом будем считать, что $M_{3,i} \approx f'''(x_i)$.

Вычисление дает $f'''(x_i) \approx -\frac{0{,}005935}{0{,}008} = -0{,}74405$. Тогда остаточное слагаемое по модулю будет равно $\frac{0{,}04 \cdot 0{,}74405}{6} \approx 0{,}0049 < 0{,}01$.

На основе полученного приближенного значения остаточного слагаемого можно заключить, что в вычислениях ожидается одна верная цифра после запятой. Обычно в расчетах оставляют еще одну или две дополнительные цифры (в нашем примере это составляет всего 3 цифры). Оставляя три цифры после запятой, получаем результат: $\hat{f}'(x)\big|_{x=1,4} = -0{,}521$.

Фактическая абсолютная погрешность составляет:

$$\left| -0{,}521 + \frac{1}{1{,}4^2} \right| = |-0{,}521 + 0{,}5102| = 0{,}0108,$$

т.е. относительная погрешность равна $\frac{0{,}0108}{0{,}5102} \cdot 100\% = 2{,}1\%$. Если эта погрешность не устраивает вычислителя, необходимо повышать порядок точности относительно h, например, до $t = 3$.

4.1.4. Выбор оптимального шага численного дифференцирования

Общая погрешность вычисления производной может рассматриваться как сумма погрешности метода и погрешности округления. С уменьшением шага h погрешность метода убывает, а погрешность округления возрастает. Можно найти оптимальный шаг как компромисс этих двух процессов. Так для центрально-разностной производной первого порядка погрешность метода не превосходит следующей величины:

$$\frac{h^2}{6} M_3 = \frac{h^2}{6} \max_{(x_{-1}, x_1)} \left| f'''(x) \right|.$$

Погрешность округления для такой формулы оценивается величиной $\frac{2\varepsilon}{2h} = \frac{\varepsilon}{h}$, где ε – абсолютная погрешность исходных значений функции.

Суммарная погрешность ε_Σ следующая:

$$\varepsilon_\Sigma(h) = \frac{h^2}{6} M_3 + \frac{\varepsilon}{h}.$$

Величина ε_Σ достигает наименьшего значения при условии:

$$\varepsilon'_\Sigma(h) = \left(\frac{h^2}{6} M_3 + \frac{\varepsilon}{h} \right)' = \frac{h}{3} M_3 - \frac{\varepsilon}{h^2} = 0.$$

Это условие дает значение h, которое называют оптимальным шагом:

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M_3}}.$$

Для каждой формулы численного дифференцирования свой оптимальный шаг.

5. Основы программирования на VBA

5.1. Язык VBA

Язык VBA является версией популярного языка Visual Basic, ориентированной на приложения. Его основные отличия:

1. VB предназначен для разработки приложений, VBA – для автоматизации существующих приложений;
2. VB имеет собственную среду разработки, VBA использует среду приложения;
3. для выполнения приложения, созданного в VB, не обязательно иметь доступ к самому VB, а выполнение VBA-приложений требует доступа к родительским приложениям, в которых они были созданы.

Код VBA содержится в модуле. Модуль – совокупность объявлений (описательная часть) и процедур, хранящихся как единое целое. Существуют два типа модулей: модули классов и стандартные модули. В непосредственной работе по решению задач численных методов используются стандартные модули. Процедурами стандартных модулей являются процедуры-функции и процедуры-подпрограммы.

VBA позволяет создавать собственные объекты. Модули классов содержат описание таких объектов.

Процедура – любая совокупность кода VBA, рассматриваемая как единое целое, идентифицируется уникальным именем. Процедура-подпрограмма выполняет один или несколько операторов и не возвращает значение, например, код макроса. Процедура-функция возвращает значение. Чтобы попасть в редактор VBA, нужно нажать комбинацию клавиш Alt+F11.

В левом окне редактора VBA находится список модулей и форм, входящих в создаваемый проект. Модуль – лист, в котором набирается код

VBA. У каждого рабочего листа EXCEL есть свой модуль. Чтобы добавить модуль в проект, нужно выполнить команду Insert/Module.

В общем случае функция пользователя имеет вид:

Function **name** (*arglist*)

[*statements*]

End Function,

где **name** – имя функции пользователя,

arglist – список аргументов,

statements – последовательность инструкций, выполняемых при нахождении значения функции. В совокупности они образуют тело функции.

Носителем возвращаемого значения является имя функции. Поэтому среди инструкций должна присутствовать хотя бы одна, которая является оператором присваивания имени функции значения какого-либо выражения.

Встроенные функции языка VBA Таблица 1

Функция	Возвращаемое значение
Abs (*число*)	Возвращает абсолютное значение *числа* (модуль числа)
Atn (*число*)	Возвращает арктангенс *числа* (угол, измеряемый в радианах)
Cos (*число*)	Возвращает косинус *числа*, понимаемого как угол, измеряемый в радианах
Exp (*число*)	Возвращает константу e в степени, равной заданному *числу* ($e \approx 2{,}718282$)
Fix (*число*)	Возвращает целую часть *числа*. Для отрицательного числа функция возвращает ближайшее отрицательное целое число, большее либо равное указанному

Продолжение таблицы 1

Функция	Возвращаемое значение
Int (*число*)	Возвращает целую часть *числа*. Для отрицательного числа функция возвращает ближайшее отрицательное целое число, меньшее либо равное указанному
Log (*число*)	Возвращает натуральный логарифм *числа*, значение с плавающей точкой двойной точности
Rnd (*число*)	Возвращает случайное *число*, значение с плавающей точкой одинарной точности
Sgn (*число*)	Возвращает знак *числа*: 1 – число положительное, 0 – равное нулю, -1 – число отрицательное
Sin (*число*)	Возвращает синус *числа*, понимаемого как угол, измеренный в радианах
Sgr *(число)*	Возвращает квадратный корень из *числа*
Tan (*число*)	Возвращает тангенс *числа*, понимаемого как угол, измеренный в радианах

Процедура на VBA имеет синтаксис:

Sub **name** (*arglist*)

[*statements*]

End Sub

Типы данных в VBA Таблица 2

Тип	Размер	Диапазон значений
Byte (Байт)	1 байт	От 0 до 256
Boolean (Булевый)	2 байта	True (истина) или false (ложь)
Integer (Целое)	2 байта	От -32768 до 32767
Long (Длинное целое)	4 байта	От -2147483648 до 2147483647

Продолжение таблицы 2

Тип	Размер	Диапазон значений
Single (С плавающей точкой одинарной точности)	4 байта	От -3,402823E+38 до -1,401298E-45 для отрицательных значений; от 1,401298E-45 до 3,402823E+38 для положительных значений
Double (С плавающей точкой двойной точности)	8 байт	От -1,79769313486232E+308 до -4,94065645841247E-324 для отрицательных значений; от 4,94065645841247E-324 до 1,79769313486232E+308 для положительных значений
Currency (Денежный, масштабированное целое значение)	8 байт	От -922337203685477,5808 до 922337203685477,5807
Decimal (Десятичное)	14 байт	±79228162514264337593543950335 без десятичной точки или 28 цифр после десятичной точки
Date (Дата)	8 байт	От 1 января 100 года до 31 декабря 9999 года
Object (Объектный)	4 байта	Любая ссылка на объект
String (Строка переменной длины)	10 байт +длина строки	От 0 до приблизительно 2 миллиардов символов

String (Строка фиксированной длины)	Длина строки	От 0 до приблизительно 65400 символов
Variant (Вариантный числовой)	16 байт	Любое числовое значение вплоть до границ диапазона типа Double
Variant (Вариантный строковый)	22 байта + длина строки	От 0 до приблизительно 2 миллиардов символов
User-defined (Определяемый пользователем)	Любой	Определяется в соответствии с заданным типом данных

Объявление переменной:

Dim **varname** As *type*

где **varname** – имя переменной

type – тип данных переменной.

Например, Dim N As Integer. По умолчанию переменным присваивается тип Variant.

Область видимости переменной:

1) уровня процедуры – распознаются только в процедуре, в которой они объявлены, объявляются операторами Dim или Static, их называют локальными;

2) уровня модуля – вызываются только в модуле, в котором описаны, объявляются операторами Dim или Private в области описания модуля, то есть перед описанием процедур;

3) уровня модуля, но объявленные оператором Public, – доступны для всех процедур проекта, их называют открытыми.

Комментарии в программе можно добавить в любом месте, комментарий начинается с апострофа.

Инструкции VBA:

1. Оператор присваивания (=).
2. Операторы перехода и выбора.

   a. Оператор условного перехода

   If [условие] Then [действие]

   Else [действие]

   End If

   b. Оператор выбора Select Case выполняет одну из нескольких групп инструкций в зависимости от значения выражения. Он эффективен, если надо проверить одну переменную, принимающую несколько значений.

   c. Оператор безусловного перехода Go To задает переход на указанную строку внутри процедуры. Для его использования необходимо присвоить метку той строке, на которую планируется осуществить безусловный переход. Метка должна начинаться с буквы и заканчиваться двоеточием.

3. Операторы повтора

   a. Оператор For Next повторяет выполнение группы инструкций указанное число раз, а именно, пока переменная цикла изменяется от начального значения до конечного с указанным шагом.

   b. Оператор For Each повторяет выполнение группы инструкций для каждого элемента массива или семейства.

   c. Оператор While выполняет последовательность инструкций, пока заданное условие возвращает значение True. Оператор повтора While в отличии от оператора For Next выполняется не заданное число раз, а пока выполняется заданное условие.

   d. Оператор Do повторяет выполнение набора инструкций, пока условие имеет значение True (случай While) или пока оно не примет значение True (случай Until).

5.2. Пример программы на VBA

Рассмотрим, как можно решить задачу уточнения корня нелинейного уравнения методом половинного деления с помощью программы, составленной на VBA.

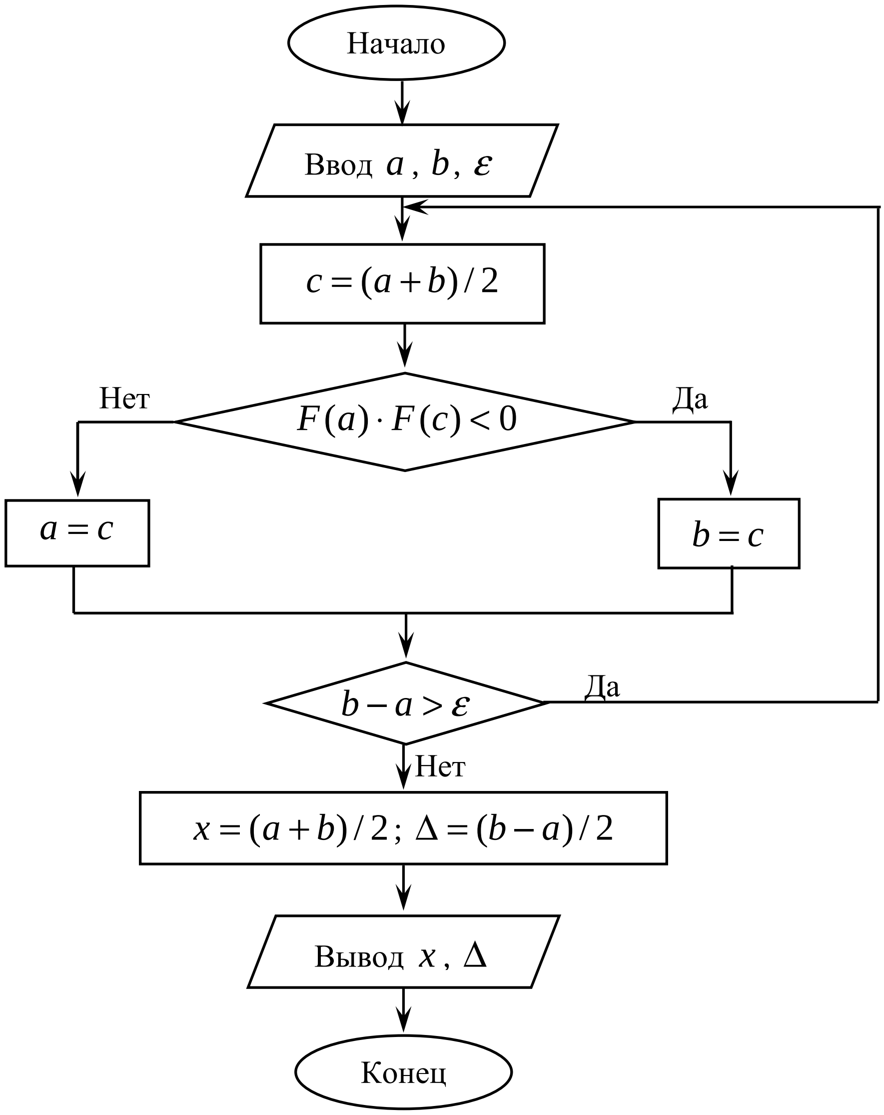

Рис. 3. Блок-схема алгоритма уточнения корня уравнения $F(x)=0$ на отрезке $[a;b]$ с точностью ε методом половинного деления

Код программы на языке VBA, реализующей алгоритм метода половинного деления, может быть представлен следующим образом.

```
Sub Bisection()
Dim x As Double, a As Double, b As Double, e As Double, c As Double
Dim i As Integer, n As Integer
a=0
b=1
n=0
e=0,00025
For i=1 To 20
n=n+1
c=(a+b)/2
    If (b-a)/2<e Then GoTo Finish
         If f(a)*f(c)<0 Then
         a=a
         b=c
         Else
         a=c
         b=b
    End If
Next i
finish:
x=c
Debug.Print «корень уравнения x=»; x; «точность вычисления»; (b-a)/2
Debug.Print «число итераций»; n
End Sub
Private Function f(x As Double) As Double
f=x-Cos(x)
End Function
```

6. Лабораторный практикум

Практикум предназначен для более глубокого усвоения и детального изучения теоретического материала, для приобретения практических навыков решения математических задач с помощью соответствующих численных методов.

6.1. Требования к письменному оформлению лабораторных работ

В каждой лабораторной работе должны быть указаны:

1. Порядковый номер, название работы, номер варианта.
2. Цель работы.
3. Краткое изложение сути исследуемого вычислительного алгоритма.
4. Блок-схема алгоритма (если необходимо).
5. Пошаговое описание алгоритма.
6. Программа на языке VBA (если необходимо).
7. Результаты выполнения программы с заданной точностью.

6.2. Лабораторная работа № 1. Погрешности. Округление чисел

Дано число X и величина Y, зависящая от параметров a, b и c.

1. Число X, все цифры которого верны в строгом смысле, округлите до трех значащих цифр. Для полученного числа X′≈X найдите предельную абсолютную и предельную относительную погрешности. В записи полученного числа укажите количество верных цифр (в узком и широком смысле).

2. Вычислите с помощью электронных таблиц Excel значение величины Y при указанных значениях параметров a, b и c тремя способами:

по правилам подсчета цифр, по методу строгого учета границ абсолютных погрешностей и по способу границ. При вычислениях всеми тремя методами ведите подробную регистрацию вычислений по образцу (Пример 1 и Пример 2 параграфа 1).

Вариант	X	Y	a	b	c
1	0,057136	$\dfrac{(a+c)^2}{\ln b - 2c}$	1,208	5,342	3,26
2	0,31265	$\dfrac{\ln(a+c)}{b-a}$	0,875	12,382	0,751
3	8,34528	$\dfrac{\ln b + a}{c^2 - a}$	0,2399	4,895	1,562
4	0,008277	$\dfrac{(b-c)^2}{3a - \ln c}$	11,456	0,60728	8,67021
5	10,9761	$\dfrac{\sqrt{c-a}}{\cos b + 2c}$	2,098	7,54	5,0076
6	1,005683	$\dfrac{a - \sin b}{b^2 + c}$	3,751	2,215	1,0141
7	21,3497	$\dfrac{\sqrt{ab}}{\ln(c+b)}$	2,3411	1,876	1,3452
8	0,001654	$\dfrac{b - \sin a}{a + 3c}$	3,672	3,863	0,1098
9	11,2675	$\dfrac{\ln c - 2a}{b^2 + c}$	0,1164	0,10176	54,321
10	27,6451	$\dfrac{b + \cos a}{c^2 - a}$	3,0012	1,604	11,231
11	67,54321	$\dfrac{b+3c}{\sqrt{a-b}}$	4,765	1,8765	12,671
12	0,0100245	$\dfrac{\sqrt{c-a}}{\sin b + 3c}$	0,876	5,674	2,8721

13	2,463501	$\dfrac{\ln b - a}{c^2 + 4a}$	9,8721	1,0984	3,762
14	34,2876	$\dfrac{(b + c)^2}{3a - \cos c}$	2,9875	7,542	0,231
15	0,009873	$\dfrac{\sqrt{a + b}}{(c - b)^2}$	0,0231	2,8675	8,907
16	2,9807	$\dfrac{(a - c)^2}{2a + \ln b}$	5,432	1,876	2,0981

6.3. Лабораторная работа № 2. Интерполирование табличных функций

Дана таблица значений функции $f(x) = e^x - \sin x$ с верными цифрами:

x	$f(x)$	x	$f(x)$
0	1	1,0	1,8768
0,1	1,0053	1,1	2,1130
0,2	1,0227	1,2	2,3881
0,3	1,0543	1,3	2,7057
0,4	1,1024	1,4	3,0696
0,5	1,1693	1,5	3,4842
0,6	1,2575	1,6	3,9536
0,7	1,3695	1,7	4,4823
0,8	1,5082	1,8	5,0758
0,9	1,6763	1,9	5,7396

1. Вычислите приближенное значение $f(a)$ с помощью первого интерполяционного многочлена Ньютона второй степени, определите его абсолютную погрешность и верные значащие цифры.

2. Линейным интерполированием найдите значения функции f для аргументов a, b и определите их верные значащие цифры с помощью таблицы конечных разностей. Все исходные данные считать точными числами.

Вариант	a	b	Вариант	a	b
1	0,38	0,35	9	0,71	0,75
2	1,02	1,07	10	0,85	0,83
3	1,15	1,18	11	0,96	0,92
4	1,22	1,24	12	0,12	0,18
5	1,36	1,31	13	0,23	0,26
6	0,59	0,54	14	1,58	1,55
7	0,63	0,68	15	0,44	0,47
8	0,73	0,79	16	1,73	1,79

6.4. Лабораторная работа №3. Квадратичное приближение табличных функций по методу наименьших квадратов

По данной таблице найти многочлен второй степени $P_2(x)$, являющийся наилучшим приближением к соответствующей табличной функции по методу наименьших квадратов. Построить графики таблицы и найденного многочлена. Найти все уклонения от табличных значений и среднеквадратичное уклонение.

Вариант 1

x	0,10	0,30	0,40	0,60	0,70	0,80
y	0,25	0,50	0,65	0,55	0,42	0,30

Вариант 2

x	-2,00	-1,80	-1,70	-1,60	-1,40	-1,30
y	5,10	4,00	3,20	3,90	4,80	6,10

Вариант 3

x	1,30	1,40	1,60	1,70	2,00	2,10
y	2,40	1,80	1,20	1,40	2,30	2,90

Вариант 4

x	0,40	0,70	0,90	1,10	1,40	1,60
y	0,15	0,83	1,65	1,52	0,90	0,31

Вариант 5

x	2,00	2,50	2,70	2,90	3,20	3,40
y	-0,11	-0,81	-1,05	-0,90	-0,23	-0,05

Вариант 6

x	-0,50	-0,30	-0,20	0,10	0,40	0,80
y	2,30	1,20	1,05	0,90	1,20	2,10

Вариант 7

x	1,10	2,00	2,50	2,90	3,50	4,00
y	0,32	0,05	-0,10	-0,12	0,12	0,27

Вариант 8

x	0,30	0,50	0,80	0,90	1,20	1,40
y	1,10	0,60	0,40	0,38	0,65	0,90

Вариант 9

x	-0,40	-0,10	0,10	0,20	0,50	0,70
y	1,30	3,50	4,20	4,00	2,80	1,60

Вариант 10

x	1,20	1,40	1,50	1,60	1,80	2,10
y	0,90	3,30	4,10	3,90	2,80	1,10

Вариант 11

x	-0,90	-0,80	-0,50	-0,40	-0,20	-0,10
y	0,15	0,61	1,20	1,10	0,70	0,22

Вариант 12

x	-1,00	-0,80	-0,70	-0,40	-0,30	-0,20
y	1,40	0,90	0,65	0,51	0,78	1,30

Вариант 13

x	0,20	0,30	0,50	0,70	0,90	1,20
y	-2,10	-0,50	1,15	1,30	-0,60	-2,70

Вариант 14

x	2,20	2,50	2,60	2,80	3,10	3,20
y	1,70	0,80	0,52	0,30	0,91	1,50

Порядок выполнения

1. На координатной плоскости постройте точки таблицы и убедитесь в том, что их расположение локализуется вблизи некоторой квадратичной параболы.

2. Напишите в общем виде систему уравнений для определения коэффициентов многочлена $P_2(x)$ и выражения для коэффициентов системы.

3. Составьте программу вычисления коэффициентов и решения системы по правилу Крамера.

4. Найдите $P_2(x)$ (при этом округлите коэффициенты до двух знаков в дробной части) и постройте график $P_2(x)$ на той же координатной плоскости, где отмечены точки таблицы.

5. Найдите все уклонения и среднеквадратичное уклонение многочлена $P_2(x)$ от табличной функции.

6.5. Лабораторная работа № 4. Приближенное вычисление определенных интегралов

Задание

1. Вычислите данный интеграл по формуле трапеций при $n=3$ и при $n=6$. Оцените погрешность приближения $I_6^{(T)}$ методом двойного пе-

ресчета, а затем найдите абсолютную погрешность этого приближения по формуле строгой оценки погрешности.

2. Вычислите данный интеграл по формуле Симпсона с точностью до $\varepsilon = 0{,}5 \cdot 10^{-4}$.

3. Вычислите интеграл по формуле Ньютона-Лейбница с максимальной точностью, которая возможна при используемых вычислительных средствах.

4. Сравните полученные результаты по их точности.

Варианты заданий

Вариант	Интеграл	Вариант	Интеграл
1	$\int_0^{\pi/2} \cos(1-2x)\,dx$	2	$\int_0^{1{,}5} \cos x\,dx$
3	$\int_0^2 e^{2x}dx$	4	$\int_{\pi/6}^{\pi/2} \cos 3x\,dx$
5	$\int_0^{\pi/2} \sin 2x\,dx$	6	$\int_{-1}^1 \left(x - e^{2x}\right)dx$
7	$\int_0^2 \sqrt{1+x}\,dx$	8	$\int_{-1}^1 (3x + \cos x)dx$
9	$\int_{-1}^2 e^{x/2}\,dx$	10	$\int_0^2 \sin(x+1)dx$
11	$\int_0^{1{,}5} \left(1 + x + x^4\right)dx$	12	$\int_0^3 e^{-3x}\,dx$
13	$\int_0^2 \ln(2x+3)dx$	14	$\int_1^3 \sqrt{x-1}\,dx$

Указания к работе. При вычислении по формуле Симпсона нужно сначала определить число n, при котором формула обеспечивает точность

ε, затем составить программу реализации формулы и с ее помощью найти $I_n^{(C)}$. Чтобы не учитывать вычислительные погрешности, шаг разбиения и значения функций следует брать с двумя запасными цифрами.

6.6. Лабораторная работа №5. Численное дифференцирование с помощью первого интерполяционного полинома Ньютона второй степени

Вычислить производную в точке $x = x_i$ от дискретно заданной функции (см. таблицу значений), оценить погрешность производной.

Вариант 1

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	4,2	8,8	16,3	24,6	36,5	48,4

$i = 2$

Вариант 2

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	3,2	7,8	15,3	23,6	35,5	47,5

$i = 1$

Вариант 3

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,9	5,2	9,8	17,3	25,7	37,5

$i = 0$

Вариант 4

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,1	3,9	9,2	16,8	25,3	35,7

$i = 0$

Вариант 5

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,1	4,9	11,2	18,8	29,3	40,7

$i=1$

Вариант 6

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	3,2	7,8	15,3	23,6	35,5	47,5

$i=0$

Вариант 7

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,9	5,2	9,8	17,3	25,7	37,5

$i=2$

Вариант 8

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,1	3,9	9,2	16,8	25,3	35,7

$i=1$

Вариант 9

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	4,2	8,8	16,3	24,6	36,5	48,4

$i=0$

Вариант 10

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1,1	4,9	11,2	18,8	29,3	40,7

$i=2$

Литература

1. Бахвалов, Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. – 592 с.

2. Гарнаев, А.Ю. Самоучитель VBA/А.Ю.Гарнаев. – СПб. БХВ-Петербург, 2004. – 560 с.

3. Демидович, Б. П. Основы вычислительной математики : учебное пособие / Б. П. Демидович, И. А. Марон. – 8-е изд., стер. – СПб.: Лань, 2011. – 672 с.

4. Копченова, Н.В., Марон, И.А. Вычислительная математика в примерах и задачах / Н.В. Копченова, И.А. Марон – СПб.: Лань, 2008. – 368 с.

5. Костомаров, Д.П. Вводные лекции по численным методам: Учеб. пособие/Д.П.Костомаров, А.П.Фаворский. – М.:Логос, 2006. – 184с.

6. Лапчик, М.П. Численные методы / М.П.Лапчик, М.И.Рагулина, Е.К.Хеннер. – М.: Academia, 2009. – 384 с.

7. Рябенький, В.С. Введение в вычислительную математику: учебное посо-бие для студ. вузов / В.С. Рябенький. – 3-е изд.,испр. и доп. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 288 с.

8. Турчак, Л.И. Основы численных методов: Учебное пособие/ Л.И.Турчак, П.В.Плотников. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 304 с.

9. Формалеев, В.Ф. Численные методы/ В.Ф.Формалеев, Д.Л.Ревизников. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 400 с.

Игумнов Леонид Александрович
Литвинчук Светлана Юрьевна
Юрченко Татьяна Владиславовна

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИЙ

Учебное пособие

Подписано в печать ______ Формат 60х90 1/16 Бумага газетная. Печать трафаретная.
Уч. изд. л. 5, 2. Усл. печ. л. 5,5. Тираж 300 экз. Заказ №
Государственное образовательное учреждение высшего образования
«Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет»
603950, Н.Новгород, Ильинская, 65
Полиграфцентр ННГАСУ, 603950, Н.Новгород, Ильинская, 65
http://www. nngasu.ru, srec@nngasu.ru