Факультет нелинейных процессов
Кафедра электроники, колебаний и волн

М.В. Белоглазкина, Е.Н. Егоров, Ю.И. Левин

Компьютерный анализ данных и исследование функций

Учебно-методическое пособие

Саратов – 2008

Содержание

1. Введение 3
2. Аппроксимация и интерполирование функций 4
2.1. Интерполяционная формула Ньютона 5
2.2. Интерполяционная формула Лагранжа 8
2.3. Интерполяция полиномами Фурье 9
3. Численное интегрирование 13
3.1. Метод прямоугольников 14
3.2. Метод трапеций 17
3.3. Метод Симпсона 19
3.4. Метод Филона 20
4. Нахождение минимума функции многих переменных. Метод градиентного спуска 22
5. Практическое задание 24
6. Контрольные вопросы 26
7. Рекомендуемая литература 27

1. Введение

Математическое моделирование процессов и явлений является неотъемлемой частью исследований в различных областях науки и техники. Сложные вычислительные задачи, возникающие при исследовании физических и технических проблем, можно разбить на ряд элементарных – таких как вычисление интегралов, решение дифференциальных уравнений и т.д.

Данное учебно-методическое пособие посвящено компьютерному анализу данных и исследованию функций. Рассматриваются различные методы интерполирования функций, нахождения минимума функций многих переменных, а также разнообразные методы численного интегрирования.

2. Аппроксимация и интерполирование функций

Аппроксимацией функции называется приближенное представление сложной (имеющей громоздкое математическое представление) или заданной в виде таблицы функции $f(x)$ более простой функцией $\psi(x)$, имеющей минимальные отклонения от исходной функции в заданной области x. По сути, аппроксимация – это моделирование сложной функции более простой с вычислительной точки зрения функцией.

Если приближение строится на заданном дискретном множестве точек $\{x_i\}$, то аппроксимация называется точечной. При построении приближения на непрерывном множестве точек (например, на отрезке $[a,b]$) аппроксимация называется непрерывной (или интегральной).

Интерполяция на всем участке $[a,b]$ называется глобальной, а на отдельных участках отрезка $[a,b]$ – кусочной или локальной.

Погрешность аппроксимации функции $f(x)$ полиномом $\psi(x)$ можно оценивать по величине среднеквадратичного отклонения S_a или по значению максимального отклонения $\delta(\psi) = |\psi(x) - f(x_i)|$, $i=0,1,2,...,$ n, которые должны быть меньше заданной погрешности $\varepsilon>0$.

Среднеквадратичное отклонение $\psi(x)$ от $f(x)$ определяется выражением

$$S_a = \frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}[\psi(x) - f(x)]^2 \tag{2.1}$$

При этом коэффициенты полинома $\psi(x)$ a_i, $i=0,1,2,...,n$ подбираются из условия минимальности S_a.

На практике для аппроксимации $f(x)$ используются как степенные многочлены $\psi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 +...+ a_nx^n$, коэффициенты которых a_i,

i=0,1,2,..., n определяются из условия наименьшего отклонения $\psi(x)$ от $f(x)$, так и дробно-рациональные выражения, многочлены Чебышева, ряды Фурье и др.

Частным случаем аппроксимации является интерполяция − точечная аппроксимация, когда приближенная функция $\psi(x)$ строится на заданном множестве точек x_i, i=0,1,2,..., n. Если на отрезке $[a,b]$ заданы точки x_0, x_1,..., x_n и значения некоторой функции $y = f(x)$ в этих точках: $f(x_0)=y_0$; $f(x_1)=y_1$;...; $f(x_n)=y_n$, то можно построить функцию $F(x)$, которая принимает в точках x_i значения, равные значениям функции $f(x_i)$: $F(x_0)=y_0$, $F(x_1)=y_1$,..., $F(x_n)=y_n$. Такая функция $F(x)$ называется интерполирующей, а точки x_0, x_1,..., x_n − узлами интерполяции. Интерполяционную функцию $F(x)$ используют для вычисления значений функции $f(x)$ в промежутках между точками x_i, x_{i-1}. Процесс вычисления функции $f(x)$ в промежуточных точках между x_0, x_n называется интерполяцией, а за пределами отрезка $[a,b]$ − экстраполяцией.

2.1. Интерполяционная формула Ньютона

Перед тем как записать интерполяционную формулу Ньютона, определим некоторые понятия.

Пусть задан фиксированный шаг аргумента $\Delta x = h = const$ функции $y = f(x)$. Приращением или первой *конечной разностью* функции y для данного множества аргументов $x_i = x_0 + i\Delta x$ и соответствующих значений функции $y_i = f(x_i)$ назовём выражение

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

Вторая конечная разность имеет вид

$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = y_{i+2} - 2\, y_{i+1} + y_i.$

При этом n-я конечная разность функции y будет вычисляться по следующему рекуррентному соотношению

$\Delta^n y_i = \Delta(\Delta^{n-1} y_i) = \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i$, $i = 0,1,2,\ldots, n$; $n = 1,2,3,4,\ldots$

Отметим, что $\Delta^0 y_i = y_0$.

В случае если шаг аргумента $\Delta x = h$ не постоянен, то по аналогии с конечными разностями вводят понятие *разделённых разностей* функции:

$$\Delta_1(x_0, x_1) = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0},$$

$$\Delta_i(x_0, x_1, ..., x_i) = \frac{\Delta_{i-1}(x_1, ..., x_i) - \Delta_{i-1}(x_1, ..., x_{i-1})}{x_i - x_0}, \; i = 1,2,\ldots, n$$

Связь между конечными и разделёнными разностями в случае $\Delta x = h = const$ определяется следующим образом:

$$\Delta^n y_i = n!\, h^n \Delta_n \qquad (2.2)$$

Пусть теперь на отрезке $[a,b]$ заданы узлы интерполяции $x_0, x_1,..., x_n$ и значения функции $y = f(x)$ в этих точках: $f(x_0)=y_0$; $f(x_1)=y_1$;...; $f(x_n)=y_n$. При этом расстояния между узлами одинаковы: $\Delta x = x_i - x_{i-1} = h = const$, где h − шаг интерполяции. Требуется найти для функции $y = f(x)$ такой многочлен $P_n(x)$, что $P_n(x_i) = y_i$ и $\Delta^k P(x_0) = \Delta^k y_0$, для $k,i = 0,1,2,\ldots, n$.

Полином $P_n(x)$ будем искать в виде

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}) \qquad (2.3)$$

Для определения коэффициентов a_i, $i = 0,1,2,\ldots, n$ необходимо вычислить k-е конечные разности полинома $P_n(x)$ в точке x_0 и приравняем их значения k-м конечным разностям самой функции $f(x_0)$:

$\Delta^k P_n(x_0) = \Delta^k y_0$, $(k=0,1,\dots, n)$.

Можно показать, что при $x = x_0$ все члены $\Delta^k P_n(x_0)$, кроме первого равны нулю, тогда при $k = 0,1,2,\dots, n$:

$P_n(x_0) = y_0 \Rightarrow a_0 = y_0$;

$\Delta P_n(x_0) = a_1 h = \Delta y_0 \Rightarrow a_1 = \Delta y_0/h$;

$\Delta^2 P_n(x_0) = 2a_2h^2 = \Delta^2 y_0 \Rightarrow a_2 = \Delta^2 y_0/(2h^2)$;

. . . .

$\Delta^k P_n(x_0) = k!a_kh^k = \Delta^k y_0 \Rightarrow a_\mathrm{k} = \Delta^k y_0/(k!h^k)$.

Подставляя найденные значения a_k в полином Ньютона $P_n(x)$, имеем

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

$$+\dots+\frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \tag{2.4}$$

− *интерполяционная формула Ньютона*. Наряду с данной формой записи возможна запись полинома через разделённые разности при неравномерном задании шага h по аргументу функции. Предлагаем читателю вывести эту формулу самостоятельно.

Из соотношения (2.2) следует, что при малых h

$$\Delta_n = \frac{\Delta^n y_i}{n!h^n} = \frac{f^{(n)}(x)}{n!},$$

где $f^{(n)}(x)$ − n-я производная функции $f(x)$. В этом случае выражение (2.4) можно рассматривать как обобщение частичной суммы ряда Тейлора, записанной в конечно-разностном виде.

Отметим также, что прибавление новой пары значений (x_{n+1},y_{n+1}) означает увеличение степени полинома на единицу (прибавление одного слагаемого к полиному)[1].

2.2. Интерполяционная формула Лагранжа

Как и в предыдущем разделе зададим узлы интерполяции $\{x_i\}$ и значения функции $y=f(x)$ в этих точках $\{y_i\}$. Требуется построить полином $L_n(x)$ степени n, такой, что

$L_n(x_i) = y_i, \quad i = 0,1,\ldots, n.$

Построим вначале такой полином $P_i(x)$, что

$$P_i(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i; \\ 0, & j \neq i. \end{cases}$$

Этому условию удовлетворяет полином

$$P_i(x) = C_i\,(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n) =$$

$$= C_i \prod_{k=0,k\neq i}^{n} (x-x_k)\text{, где } C_i = \left(\prod_{k=0,k\neq i}^{n} (x_i-x_k)\right)^{-1}.$$

Используя многочлен $P_i(x)$, запишем *полином Лагранжа* следующим образом: $L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} P_i(x) y_i(x)$, или в развернутом виде

$$L_n(x) = \sum \frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})...(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)...(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})...(x_i-x_n)} y_i \qquad (2.5)$$

Очевидно, что полином Лагранжа (2.5) определяется

[1] Более подробно об интерполяции с помощью формулы Ньютона, а также об определении погрешности метода см. [3,5,6].

единственным образом. Запись интерполяционного многочлена в форме Лагранжа, как правило, приводит к меньшей величине вычислительной погрешности, чем запись в форме Ньютона.

2.3. Интерполяция полиномами Фурье

Тригонометрическим рядом называют выражение вида

$$\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + b_n \sin nx,$$

где a_n, b_n − постоянные числа ($n = 0,1,2,...$), носящие название коэффициентов ряда.

Если такой ряд сходится для всех x на $-\infty < x < +\infty$, то он изображает функцию, имеющую период 2π. Поэтому, желая изобразить функцию тригонометрическим рядом, рассматривают либо периодические функции с периодом 2π, либо берут функцию, заданную на отрезке длины 2π, а дальше продолжают ее периодически, т. е. требуют, чтобы $f(x+2\pi) = f(x)$ при любом x.

Задача о возможности изобразить функцию тригонометрическим рядом, по-видимому, впервые была поставлена Эйлером в 1753 г. в связи с появившейся в это время работой Даниила Бернулли «О колеблющихся струнах». В частности Д. Бернулли показал, что положение струны в некоторый момент времени описывается тригонометрическим рядом, откуда следовало, что «произвольная функция» может быть разложена в ряд по синусам. По мнению математиков того времени это являлось неправдоподобным следствием, а значит решение, предложенное Бернулли, являлось ошибочным.

Однако затем этот вопрос был решён однозначно в пользу Бернулли и предложенного им решения в работах Фурье[2]. Последний, решая задачу о теплопроводности, указал формулы, при помощи которых функция $f(x)$ могла быть представлена рядом вида

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin nx .$$

Позднее было показано также, что такой ряд не только существует, но и сходится к функции $f(x)$. Заслугой Фурье в данном случае является то, что он указал каким образом надо определить коэффициенты тригонометрического ряда, для того чтобы он мог иметь суммой заданную функцию.

Итак, допустим, что функция $f(x)$ является суммой тригонометрического ряда, и этот ряд равномерно сходится на $-\pi \le x \le \pi$, тогда определить его коэффициенты достаточно легко. Умножим равенство

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + b_n \sin nx$$

на $\cos kx$ или на $\sin kx$, проинтегрируем его в пределах от $-\pi$ до $+\pi$ и в результате получим

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos nx dx; \; b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin nx dx. \qquad (2.6)$$

Формулы (2.6) называются *формулами Фурье*, числа a_n и b_n − коэффициентами Фурье, а ряд, коэффициенты которого определяются по формулам Фурье, отправляясь от функции $f(x)$, носит название ряда

[2] Подробнее о заблуждениях и об открытиях математиков того времени читай в [7] и в литературе, предложенной в библиографическом списке книги.

Фурье для функции $f(x)$.

До сих пор рассматривалось разложение в тригонометрический ряд функции с периодом 2π. В случае, если функция $f(x)$ имеет период $2l$, где l − некоторое действительное число, то, производя замену переменного,

$$x = \frac{lt}{\pi}$$

мы получим функцию

$$\varphi(t) = f\left(\frac{lt}{\pi}\right),$$

которая будет иметь период 2π.

Для такой функции мы можем найти ряд Фурье

$$\varphi(t) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + b_n \sin nx,$$

где

$$a_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \varphi(t)\cos ntdt; \qquad b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \varphi(t)\sin ntdt,$$

или

$$a_n = \frac{1}{l}\int_{-l}^{l} f(x)\cos n\frac{\pi}{l}xdx; \qquad b_n = \frac{1}{l}\int_{-l}^{l} f(x)\sin n\frac{\pi}{l}xdx, \tag{2.7}$$

где n = 1,2,3…, а потому функции $f(x)$ будет отвечать ряд

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos n\frac{\pi}{l}x + b_n \sin n\frac{\pi}{l}x, \tag{2.8}$$

где числа a_n и b_n определены формулами (2.7)

В случае, если можно классифицировать исходную функцию $f(x)$ как чётную или нечётную, то выражения (2.7) и (2.8) существенно упрощаются, а именно:

если на интервале $(-l, l)$ функция $f(x)$ четная, то для всех $n = 1,2,3,\ldots$ имеют место равенства $b_n = 0$ и

$$a_n = \frac{2}{l}\int_0^l f(x)\cos n\frac{\pi}{l}xdx;$$

если на интервале $(-l, l)$ функция $f(x)$ нечетная, то для всех $n = 1,2,3,\ldots$ имеют место равенства $a_n = 0$ и

$$b_n = \frac{2}{l}\int_0^l f(x)\sin n\frac{\pi}{l}xdx.$$

В случае если функция $f(x)$ непериодическая, то для того чтобы воспользоваться разложением Фурье необходимо её периодизировать, т.е. просто полагаем, что за пределами отрезка $-\pi \le x \le \pi$ функция совпадает с самой собой внутри этого отрезка.

На практике, решая задачи аппроксимации или интерполирования на ЭВМ, или в случае задания функции $f(x)$ в табличном виде, удобно пользоваться дискретным преобразованием Фурье.

Если заданы m значений функции $y_k = f(x_k)$ при $x_k = kT/m$ $(k = 0,1,2,\ldots,\ m-1)$, то на интервале $(0, T)$ функцию $y = f(x)$ можно представить в виде тригонометрического полинома Фурье

$$F(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{n} a_j \cos j\frac{2\pi}{T}x + b_j \sin j\frac{2\pi}{T}x \quad \left(n < \frac{m}{2}\right), \qquad (2.9)$$

тогда, коэффициенты преобразования определяются по формулам

$$a_j = \frac{2}{m}\sum_{k=0}^{m-1} y_k \cos j\frac{2\pi}{T}k,$$
$$b_j = \frac{2}{m}\sum_{k=0}^{m-1} y_k \sin j\frac{2\pi}{T}k \quad \left(0 \le j < \frac{m}{2}\right). \tag{2.10}$$

Формулы (2.10) называются *дискретным преобразованием Фурье* функции $y = f(x)$.

3. Численное интегрирование

Задача численного интегрирования заключается в нахождении приближенного значения интеграла

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

где функция $f(x)$ непрерывна на интервале $[a,b]$

Сущность большинства методов вычисления определенных интегралов сводится к замене подынтегральной функции $f(x)$ аппроксимирующей функцией $\varphi(x)$, чтобы интеграл от нее легко вычислялся в элементарных функциях.

Чаще всего $f(x)$ заменяют некоторым обобщенным интерполяционным многочленом:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\varphi_i(x) + r(x)\,, \tag{3.2}$$

где $f(x_i)$ – значения функции в узлах x_i $(a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_i < \ldots < x_N = b)$, а $r(x)$ – остаточный член аппроксимации. Подставляем (2) в (1), тогда в качестве приближенного значения интеграла можно рассматривать число

$$I_N = \sum_{i=0}^{N} c_i f(x_i) + R, \tag{3.3}$$

где $c_i = \int_a^b \varphi_i(x)dx$ – весовые множители, зависящие только от узлов, но не зависящие от выбора $f(x)$, $R = \int_a^b r(x)dx$ – погрешность.

Формула (3.3) называется квадратурной формулой.

Задачей численного интегрирования является нахождение таких узлов x_i и таких весовых множителей c_i, чтобы погрешность R была минимальна.

Рассмотрим некоторые методы нахождения определенного интеграла функции.

3.1. Метод прямоугольников

Рассмотрим самую простую квадратурную формулу, когда подынтегральная функция $f(x)$ на отрезке интегрирования $[a,b]$ заменяется интерполяционным многочленом нулевого порядка, т.е. константой. Таким образом, приближенное значение интеграла определяется как площадь прямоугольника, одна из сторон которого есть длина отрезка интегрирования, а другая – аппроксимирующая константа.

Выбор аппроксимирующей константы является неоднозначным, т.к. она может быть выбрана равной значению подынтегральной функции в любой точке интервала интегрирования. В зависимости от выбора константы различают методы левых, средних и правых прямоугольников.

В методе средних прямоугольников в качестве аппроксимирующей константы выбирается значение функции в середине отрезка интегрирования $x_{cp}^{i} = \dfrac{x_{i+1} - x_i}{2}$ (рис. 1). Тогда

$$I_N = \sum_{i=0}^{N} hf\left(x_{cp}^{i}\right), \qquad (3.4)$$

где $h = x_{i+1} - x_i$ – шаг разбиения.

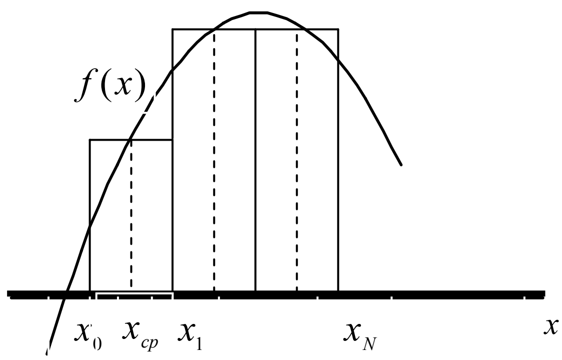

Рис. 1. Метод средних прямоугольников

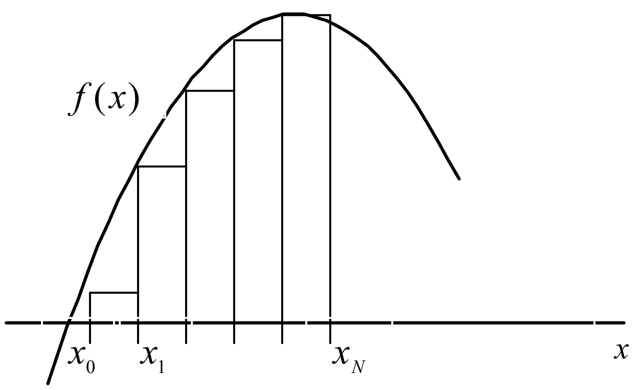

Рис. 2. Метод левых прямоугольников

В случае метода левых прямоугольников, в качестве константы берется значение функции на левой границе отрезка интегрирования, в случае метода правых прямоугольников – на правой границе. Тогда, получаем

$$I_N = \sum_{i=0}^{N-1} hf\left(x_i\right) \qquad (3.5)$$

для метода левых прямоугольников, и

$$I_N = \sum_{i=1}^{N} hf\left(x_i\right) \qquad (3.6)$$

для метода правых прямоугольников.

Оценим погрешность метода средних прямоугольников. Для этого рассмотрим выражение для интеграла на отрезке $\left[x_i, x_{i+1}\right]$:

$$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = hf(x_{cp}^i) + R_i, \qquad (3.7)$$

где R_i – погрешность метода на данном шаге. Для ее оценки разложим функцию $f(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_{cp}^i:

$$f(x) = f(x) + f'(x)(x - x_{cp}^i) + f''(x)\frac{(x - x_{cp}^i)^2}{2!} + ... \qquad (3.8)$$

Подставим разложение в ряд Тейлора (3.8) в формулу для метода средних прямоугольников (3.7) и, почленно интегрируя, получаем:

$$I = hf(x_{cp}^i) + \left.\frac{(x - x_{cp}^i)^2}{2!}\right|_{x_i}^{x_{i+1}} \cdot f'(x_{cp}^i) + \left.\frac{(x - x_{cp}^i)^3}{3!}\right|_{x_i}^{x_{i+1}} \cdot f''(x_{cp}^i) + ... = hf(x_{cp}^i) + \frac{h^3}{24} f''(x_{cp}^i) + ...$$

Следовательно, погрешность метода средних прямоугольников определяется следующим образом:

$$R = \sum_{i=0}^{N} R_i = \sum_{i=1}^{N} \left(hf(x_{cp}^i) + \frac{h^3}{24} f''(x_{cp}^i) \right) = \frac{h^2}{24} \int_{x_0}^{x_N} f''(x)dx.$$

3.2. Метод трапеций

Теперь заменим функцию на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ многочленом первого порядка (рис.3). Это равносильно замене кривой на секущую. В данном случае для каждого интервала $[x_i, x_{i+1}]$ значение интеграла криволинейной функции заменяется на площадь трапеции. Тогда из геометрических соображений следует формула трапеций:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = h\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} + R_i \tag{3.9}$$

или на интервале $[a,b]$:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N} h\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} + R. \tag{3.10}$$

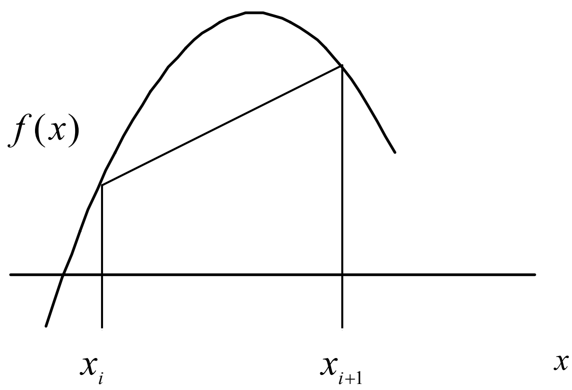

Рис. 3. Метод трапеций

Найдем погрешность этой формулы путем интегрирования тейлоровского разложения подынтегральной функции $f(x)$ в окрестности точки x_i.

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + f''(x_i)\frac{(x - x_i)^2}{2} + \ldots \tag{3.11}$$

Тогда

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = hf(x_i) + \frac{h^2}{2}f'(x_i) - \frac{h^3}{2}f''(x_i) + \ldots \tag{3.12}$$

С помощью (11) найдем $f(x)$ в точке x_{i+1}:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + \ldots$$

Следовательно,

$$hf'(x_i) = f(x_i + h) - f(x_i) - \frac{h^2}{2}f''(x_i) - \ldots \tag{3.13}$$

Подставляем (13) в (12) и получаем

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = h\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} - \frac{h^3}{12}f''(x_i) + \ldots$$

Тогда погрешность вычисляется следующим образом:

$$R_i = -\frac{h^3}{12}f''(x_i)$$

или

$$R = -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx.$$

Таким образом, мы получаем, что погрешность метода трапеций в 2 раза больше погрешности метода средних прямоугольников. По этой причине метод трапеций используют только в тех случаях, когда функция задана только в узлах сетки, а в середине интервалов неизвестна.

3.3. Метод Симпсона

Рассмотрим случай, когда в подынтегральная функция $f(x)$ заменяется интерполяционном полиномом второго порядка $P(x)$, т.е. параболой, проведенной через три узла x_0, x_1 и x_2. Таким образом,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} P(x)dx + R$$

Для записи многочлена $P(x)$ воспользуемся интерполяционной функцией Ньютона для трех узлов:

$$P(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}(x - x_0) + \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1),$$

где $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$ – расстояние между узлами. Сделаем замену $t = x - x_0$ и вычислим интеграл от полинома:

$$\int_{x_0}^{x_2} P(x)dx = \int_0^{2h}\left[f(x_0) - \frac{3f(x_0) - 4f(x_1) + f(x_2)}{h} + \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{2h^2}t^2 \right]dt$$

Таким образом,

$$\int_0^{2h} P(t)dt = \frac{h}{3}\big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big). \qquad (3.14)$$

Последнее соотношение называют формулой Симпсона или формулой парабол.

Для оценки погрешности формулы Симпсона разложим подынтегральную функцию $f(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_1 и почленно проинтегрируем в интервале $[x_0, x_2]$:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} f''(x_1) + \frac{h^5}{3 \cdot 4 \cdot 5} f^{(IV)}(x_1) + \ldots$$

Теперь просуммируем разложение в ряд Тейлора функции $f(x)$ в окрестности точки x_1 в узлах x_0 и x_2. В результате получаем:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right) - \frac{2h^5}{180} f^{(IV)}(x_1) + \ldots$$

Таким образом, главным членом погрешности при вычислении интеграла методом Симпсона на интервале $[x_0, x_2]$ является величина

$$R = -\frac{2h^5}{180} f^{(IV)}(x_1).$$

3.4. Метод Филона

Очень часто при решении радиотехнических задач встречаются быстро осциллирующие функции, т.е. функции, описывающие высокочастотное колебание $e^{j\omega x}$ с модулированной амплитудой. Рассмотренные ранее методы приводят к большому объему вычислений, т.к. для точного нахождения интеграла приходится брать настолько мелкий шаг, чтобы одна осцилляция содержала бы много узлов интегрирования.

Для уменьшения объема вычислений такие функции можно представить в виде $f(x) = y(x)\exp(j\omega x)$, где частота ω известна, а амплитуда $y(x)$ мало меняется за период основного колебания. Для построения формул Филона высокой точности приходится использовать довольно сложные аппроксимации амплитуды. Воспользуемся линейным приближением

$$y(x) = y_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}(x - x_{i-1}),$$

причем $x_{i-1} < x < x_i$. Умножив данное выражение на несущую частоту ω и проинтегрировав его по одному интервалу, получаем:

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} y(x)\exp(j\omega x)dx \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{j\omega} + \frac{2j}{\omega^2 h_i}(y_i - y_{i-1})\exp(j\omega x_i - 1/2)\sin\left(\frac{\omega h_i}{2}\right).$$

Просуммируем последнее соотношение по всем интервалам разбиения:

$$F \approx \frac{f_N - f_o}{j\omega} + \frac{2j}{\omega^2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\sin\left(\frac{\omega h_i}{2}\right)}{h_i}(y_i - y_{i-1})\exp\left(j\omega x_i - 1/2\right). \qquad (3.15)$$

Для равномерного разбиения (15) можно привести к следующему виду:

$$F \approx \frac{4}{\omega^2 h}\sin^2\left(\frac{\omega h}{2}\right)\sum_{i=1}^{N-1}\left[f_i + \left(\frac{1}{j\omega} + \frac{1-\exp(-j\omega h)}{\omega^2 h}\right)f_N - \left(\frac{1}{j\omega} + \frac{\exp(j\omega h)-1}{\omega^2 h}\right)f_0\right]. \qquad (3.16)$$

Легко проверить, что при выполнении условия $\omega h \le 1$ полученные формулы переходят в формулу трапеций.

Аналогичным образом строятся формулы Филона для квадратичных или более сложных законов изменения амплитуды. Если амплитуда почти постоянна, то применение соответствующей формулы Филона позволяет интегрировать довольно крупным шагом $h > \omega^{-1}$. Однако, следует помнить что формулы (3.15)-(3.16) применимы только в случае, если несущая частота постоянна.

4. Нахождение минимума функции многих переменных. Метод градиентного спуска.

Одним из распространенных методов поиска минимума функции многих переменных является метод градиентного спуска. Известно, что градиент функции $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ в каждой точке направлен в сторону наискорейшего локального возрастания этой функции. Следовательно, для отыскания минимума последующее приближение получается из предыдущего смещением в направлении, противоположном градиенту функции $f(x_1, x_2, ..., x_n)$. Каждое следующее приближение ищется в виде

$$x_i^{k+1} = x_i^k - a \cdot gradf(x_1^k, x_2^k, ..., x_n^k) . \quad (3.17)$$

Данные итерационный процесс будет сходиться к минимуму функции $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ из произвольной начальной точки с координатами ($x_1^0, x_2^0, ...x_n^0$).

Следует учесть, что минимизируемая функция должна быть дифференцируема и ограничена снизу. Параметр a в формуле (3.17) определяет длину шага в направлении спуска. Длину шага можно выбирать из условия минимизации функции вдоль направления, противоположного градиенту. Такой вариант градиентного метода называют методом наискорейшего спуска.

С помощью метода градиентного спуска минимум гладких функций находится значительно быстрее, чем при использования других методов. Но, наряду с вычислением функции $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ на каждой итерации данного метода приходится вычислять составляющие градиента этой функции.

Также следует учитывать, что в окрестности точки минимума составляющие градиента функции имеют малые значения, что приводит к возрастанию чувствительности итерационного процесса (3.17) к погрешностям вычислений и осложняет поиск на заключительном этапе.

5. Практическое задание

В ходе выполнении предложенных заданий студент обязан, прежде всего, ознакомиться с предложенным в задании методом, после чего должен преступить к выполнению непосредственно задания. В качестве отчёта студент представляет преподавателю программу, реализующую предложенный метод, выполненную на любом известном студенту языке программирования (предпочтительно *Pascal*, *C*++, *Fortran*). Для получения положительной оценки студент обязан отчитаться по теории изучаемого метода, а также продемонстрировать работоспособность программы, т.е. программа должна не только компилироваться без ошибок, но и выдавать в результате работы верный ответ. Ответ предложенной задачи в программе должен быть реализован в наиболее общем и наглядном виде, в противном случае преподаватели оставляют за собой право потребовать доработки программы.

В каждом задании предложен тестовый пример в качестве проверки, однако, программа должна давать возможность замены тестовой функции на любую, предложенную преподавателем. При этом студент обязан самостоятельно предусмотреть в программе возможные ограничения применимости того или иного метода к данному классу задач.

И напоследок: для успешного выполнения заданий рекомендуется ознакомиться с теорией изучаемого метода не только по данному пособию, но и по дополнительной литературе. Также, желательно знать хотя бы в общих чертах аналогичные методы, т.к. преподаватель может потребовать в ходе теоретического отчёта сравнить свойства предложенного метода с другими, применяемыми для решения задач данного типа. Отметим также, что самостоятельное выполнение всех предложенных задач способствует не только пополнению библиотеки алгоритмов численных методов, но и более глубокому понимаю студентом сути предложенного метода.

I. Построить график интерполяционной функции $f(x)$ методом:

1. полиномов Лагранжа;
2. полиномов Ньютона;
3. тригонометрических полиномов Фурье

с произвольным порядком полинома, областью интерполяции и количеством точек, по которым производится интерполяция.

Оценить точность интерполяции на данном участке методом наименьших квадратов.

Тестовый пример: $f(x) = x\sin(x)$.

II. Вычислить определенный интеграл функции методом:

1. прямоугольников;
2. трапеций;
3. Симпсона;
4. Филона.

Определить точность метода на конкретном примере, допускающем аналитическое решение. Обратить внимание на границы применимости метода.

Тестовый пример: $f(x) = \cos x$ на интервале $[0, \pi]$.

III. Реализовать процедуру нахождения минимума методом градиентного спуска для произвольной функции двух переменных.

Тестовый пример: $f(x, y) = x^2 + y^2$.

6. Контрольные вопросы

1. В чём различие процедур аппроксимации, интерполяции и экстраполяции?
2. Опишите суть методов интерполяции Ньютона и Лагранжа. В чём сходство и различие этих методов, как они связаны между собой? Какой метод точнее? Какой из двух методов требует выполнения меньшего числа арифметических операций? Как определить погрешность метода в обоих случаях?
3. В каких случаях можно применять конечные разности, а в каких разделённые?
4. Опишите суть метода интерполяции тригонометрическими полиномами (полиномами Фурье). Каковы особенности применения данного метода?
5. Что такое квадратурные формулы? Какие методы численного нахождения интеграла функций Вы знаете?
6. Опишите сущность метода прямоугольников.
7. Оцените погрешность методов правых и левых прямоугольников.
8. Опишите сущность метода трапеций. Объясните, почему погрешность данного метода больше погрешности метода прямоугольников. В каких случаях при вычислении интегралов используют метод трапеций?
9. Опишите сущность метода Симпсона. Оцените погрешность данного метода.
10. В каких случаях для вычисления интегралов применяется метод Филона? В чем он заключается?
11. Какие методы нахождения минимума функции одной и многих переменных Вы знаете? В чем состоит особенность метода градиентного спуска?

7. Рекомендуемая литература

[1] Бахвалов Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1975.

[2] Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И. Вычислительные методы. М.: Наука, 1976-1977. В 2 томах.

[3] Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.

[4] Корн Г, Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1978.

[5] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989.

[6] Мышенков В.И., Мышенков Е.В. Численные методы. Часть 1. Учебное пособие для студентов. М.: Изд. Московского государственного университета леса, 2001.

[7] Бари Н.К. Тригонометрические ряды. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961.