Sissejuhatus

Looduse uurimisel kasutatakse arvutusmeetodeid järgmise skeemi kohaselt:

1) uuritakse objekti, nähtust, protsessi. Mõned olulisemad: soojuse levimine kehas, elektrivool pooljuhtides, vedeliku imbumine läbi pinnase, ilm, merelainetus, tuumareaktor, põlemine (üldisemalt: keemiline reaktsioon), väärtpaberite hind börsil.

2) koostatakse matemaatiline mudel. Need on näiteks funktsioon, võrrand (võrrandisüsteem), diferentsiaalvõrrand (seal hulgas harilik või osatuletistega) ja selle algtingimustega ülesanne või rajaülesanne, integraalvõrrand, juhuslik protsess, optimiseerimisülesanne. Enamasti tuginetakse siin loodusseadustele.

3) uuritakse matemaatilist mudelit: funktsiooni omadused, võrranditel lahendi olemasolu ja ühesus, lahendite omadused. Selle osaga tegelevad klassikalised distsipliinid – algebra, analüüs, geomeetria, tõenäosusteooria.

4) lahendi (funktsiooni) tegelik leidmine. Peaaegu alati praktikas ettetulevatel juhtudel toimub see ligikaudselt. Kasutatakse arvutit.

Arvutusmeetodid tegelevad 4. etapiga. Eesmärk on vastata küsimusele: kuidas on kõige parem 4. etappi teostada.

Käesoleva aine peamised teemad on

1) võrrandite lahendamine;
2) võrrandisüsteemide lahendamine;
3) funktsioonide lähendamine;
4) määratud integraalide ligikaudne leidmine.

Enne peamiste teemade käsitlemist

<u>Lühiülevaade vigadest</u>

Vead ei tähenda halba, vaid paratamatust. Vea olemasolu tähendab, et praktiliselt ehk tegelikult leitud lahend erineb absoluutselt täpsest lahendist.

Halvad on eksimused: midagi tehakse valesti, aga saab teha õigesti.

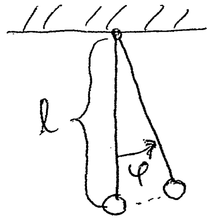
<u>1. Vigade liigid</u>

1) Matemaatilise formuleeringu viga ehk mudeli viga. See tekib sellest, et mudel (võrrand, võrrandisüsteem) kirjeldab reaalset nähtust ligikaudselt.

<u>Näide</u>. Diferentsiaalvõrrand

$$l \frac{d^2\varphi}{dt^2} + k \frac{d\varphi}{dt} + g \sin\varphi = 0$$

kirjeldab pendli võnkumist. Seejuures on



t aeg

φ pendli vertikaalasendist kõrvalekalde nurk

l pendli pikkus

k hõõrdetegur õhus

g raskuskiirendus

Otsitav on tavaliselt funktsioon $\varphi = \varphi(t)$.

Võrrandi koostamisel eeldatakse, et gravitatsiooniväli on paralleelsete jõujoontega, tegelikult on tsentraalsümmeetriline; õhutakistusjõud $k \frac{d\varphi}{dt}$ sõltub võrdeliselt kiirusest ($\frac{d\varphi}{dt}$ on võrdeline joonkiirusega), kuid see on nii väikestel kiirustel. Parameetrid l, k, g tuleb mõõta ja seda saab teha vaid ligikaudselt. Väikeste võnkumiste korral $\sin\varphi \approx \varphi$, selline asendus lihtsustab võrrandit, sest saadakse konstantsete kordajatega lineaarne võrrand, aga see on järjekordne ligikaudsus.

2) Meetodi viga. Meetodid jaotatakse täpseteks ja ligikaudseteks. Täpseks nimetatakse meetodit, mis lõpliku arvu aritmeetiliste tehete täpsel sooritamisel annab täpse lahendi. Vastasel korral nimetatakse meetodit ligikaudseks. Täpne meetod on näiteks lineaarse võrrandisüsteemi lahendamine determinantide meetodil.

Käesolev kursus käsitleb just ligikaudseid meetodeid ja selgub, et need on palju mugavama praktilise täitmisega kui ~~ligikaud-sed~~ täpsed meetodid.

3) Ümardamisvead. Tegelikul lahendi leidmisel kasutatakse enamasti arvutit, kuid konkreetne arvuti saab opereerida lõpliku hulga ratsionaalarvudega. Seepärast ei saa ilma reaalarvude (või kompleksarvude reaal- ja imaginaarosa) ümardamiseta.

Matemaatilise formuleeringu viga nimetatakse tingimatuks veaks, meetodi viga ja ümardamisviga tinglikuks veaks. Tingimatut viga ei saa muuta, see on mudeli poolt määratud. Tinglikku viga võib muuta väiksemaks (see kaasneb küll praktikas suuremate kuludega), kuid ei ole mõistlik seda teha palju väiksemaks tingimatust veast. Selleks peab olema mingisugunegi ettekujutus tingimatu vea suurusest.

2. Arvu absoluutne ja relatiivne viga.

Olgu teada arv a, mis on ligikaudne väärtus arvust A. Arvu A nimetame täpseks arvuks ja seda praktikas tavaliselt ei õnnestu leida. Tõeline viga on $\Delta a = A - a$, mis on väljendatav ka võrdusega $A = a + \Delta a$.

Def. Ligikaudse arvu a absoluutseks veaks nimetatakse suvalist arvu $\Delta > 0$, mis rahuldab võrratust $|A-a| \le \Delta$ ehk $|\Delta a| \le \Delta$.

On selge, et absoluutne viga ei ole üheselt määratud. Näiteks, kui $A = \pi$, $a = 3{,}14$, siis $\Delta = 1$ või $\Delta = 0{,}0016$ või $\Delta = 0{,}001593$.

Võrratus $|A-a| \le \Delta$ on samaväärne sellega, et $-\Delta \le A-a \le \Delta$ ehk $a-\Delta \le A \le a+\Delta$. Seda olukorda tähistatakse veel $A = a \pm \Delta$ ja selle sisuline mõte on ikka selles, et $A \in [a-\Delta, a+\Delta]$.

Tõeline relatiivne (ehk suhteline) viga on $\delta a = \dfrac{\Delta a}{a}$.

Def. Ligikaudse arvu a relatiivseks veaks nimetatakse suvalist arvu $\delta > 0$, mis rahuldab võrratust $\left|\dfrac{\Delta a}{a}\right| \le \delta$ ehk $|\delta a| \le \delta$.

Kui Δ on teada, siis võib võtta $\delta = \dfrac{\Delta}{|a|}$. Kui δ on teada, siis sobib $\Delta = \delta \cdot |a|$.

Absoluutse vea Δ ühik on sama, mis a või A ühik, relatiivne viga δ on ühikuta, tihti esitatakse see protsentides.

Kontekstist on selge, et eeldatakse tingimuste $A \ne 0$ ja $a \ne 0$ täidetust.

3. Funktsiooni väärtuse vea leidmine

Antud on funktsioon $u = u(x_1, \dots, x_n)$, ligikaudsed arvud $x_1, \dots, x_n$ kui täpsete arvude $X_1, \dots, X_n$ lähendid, arvude

$x_1, \dots, x_n$ absoluutsed vead $\Delta_1, \dots, \Delta_n$.
Leitakse $u(x_1, \dots, x_n)$ ja küsitakse: milline on selle absoluutne viga Δ_u, samuti relatiivne viga δ_u.

Eeldame, et funktsioon u on diferentseeruv. Teame, et $X_i = x_i + \Delta x_i$, $|\Delta x_i| \le \Delta_i$, $i = 1, \dots, n$.
Siis

$$\cancel{\Delta u = u(x_1 + \Delta x_1, \dots,}$$

$$\Delta u = u(X_1, \dots, X_n) - u(x_1, \dots, x_n) =$$
$$= u(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_n + \Delta x_n) - u(x_1, \dots, x_n) =$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i}(x_1, \dots, x_n)\Delta x_i + R,$$

kus viimane võrdus tähendab Taylori või Lagrange'i valemit, mis kehtib u diferentseeruvuse tõttu, R on aga jääkliige.

Eeldame täiendavalt, et Δ_i on väikesed. Siis on väikesed Δx_i ja u diferentseeruvuse tõttu on väike ka R.
Ignoreerides jääkliiget R, saame

$$\cancel{|\Delta u| \le \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|}$$

$$\cancel{|\Delta u| \lesssim \left|\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i\right|}$$

$$|\Delta u| \approx \left|\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i\right| \le \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i| \le$$
$$\le \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| \Delta_i .$$

Võtame

$$\Delta_u \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| \Delta_i,$$

kusjuures ligikaudsusmärk tähendab siin seda, et $|R|$ võrra võime siin ka absoluutset viga alla hinnata. Lisaks saame

$$\delta_u = \frac{1}{|u|}\Delta_u \approx \frac{1}{|u|}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right|\Delta_i = \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial}{\partial x_i}\ln u\right|\Delta_i$$

ehk

$$\delta_u \approx \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial}{\partial x_i}\ln u\right|\Delta_i .$$

Ülal lahendasime absoluutse ja relatiivse vea leidmise probleemi funktsiooni väärtuse arvutamisel ligikaudselt, aga see on loomulik, arvestades olukorra üldisust.

Näited. 1) olgu $u = x_1 + \ldots + x_n$, siis $\frac{\partial u}{\partial x_i} = 1$ ja $\Delta_u = \Delta_1 + \ldots + \Delta_n$.

2) olgu $u = x_1 - x_2$, siis $\left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| = 1$ ja $\Delta_u = \Delta_1 + \Delta_2$.

Ülesanded. 1) tõestada, et liitmise ja lahutamise absoluutse vea leidmise valemid on täpsed (ilma ligikaudsuseta ainevalt üldjuhust) ja kehtivad igasuguste vigade korral (mitte ainult väikeste).

2) tõestada, et kui liidetavad on sama märgiga, siis $\delta_u \le \max_{1\le i\le n} \delta_i$ ehk summa relatiivne viga ei ületa liide-

tavete relatiivsetest vigadest maksimaalset. Ka siin kehtib väide muutujate vigade kohal.

3) olgu $S = ab$, ligikaudsed arvud $a = 3$ ja $b = 4$ teada absoluutsete vigadega $\Delta_a = 2$ ja $\Delta_b = 3$. Leida korrutise absoluutne viga Δ_S. Arvestada, et siin ei ole argumentide absoluutsed vead väikesed.

4. Funktsiooni argumentide vigade leidmine

Antud on funktsioon $u = u(x_1, \dots, x_n)$, ligikaudsed arvud $x_1, \dots, x_n$ ja Δ_u. Leida on vaja argumentide $x_1, \dots, x_n$ absoluutsed vead $\Delta_1, \dots, \Delta_n$ või relatiivsed vead $\delta_1, \dots, \delta_n$. Kui $n \geq 2$, siis ei ole siin ühest lahendit. Mõnikord võivad osal argumentidest olla vead teada. Kasutatakse variante

1) $\Delta_1 = \dots = \Delta_n$,

2) $\delta_1 = \dots = \delta_n$,

need määravad üldise Δ_u (või δ_u) arvutamise valemi põhjal argumentide vead.

Näide. Toa põranda mõõtmed on 3 m ja 4 m. Kui täpselt peab neid mõõtma, et saada põranda pindala täpsusega ~~…~~ 0,01 m^2?

Loomulikul eeldusel, et põrand on

ristkülikukujuline, on pindala arvutatav $S = ab$, $a = 3$, $b = 4$, kusjuures on antud $\Delta_S = 0{,}01$. Siis $\Delta_S = a\Delta_b + b\Delta_a = (a+b)\Delta$, kus loeme, et $\Delta = \Delta_a = \Delta_b$, ning kasutatav Δ_S leidmise valem sobib vigade väiksuse tõttu. Siis

$$\Delta = \frac{\Delta_S}{a+b} = \frac{0{,}01}{3+4} = 0{,}0014\ldots \approx 0{,}001\,m = $$
$$= 1\,mm.$$

5. Vigade ümardamine

Funktsiooni väärtuse viga tuleb ümardada üles, argumentide vead alla. Selgitame seda põhimõtet järgmiselt. Eelnevas valguses peamiselt ~~kasutatavad täpsustused~~ silmas pidades tähendab argumentide ja funktsiooni väärtuse vigade vahekord järgmist:

$$X_i \in [x_i - \Delta_i, x_i + \Delta_i],\ i = 1, \ldots, n \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u(X_1, \ldots, X_n) \in [u(x_1, \ldots, x_n) - \Delta_u, u(x_1, \ldots, x_n) + \Delta_u].$$

Kui Δ_i suurenevad, siis $\Rightarrow$ ei kehti; samuti ei kehti $\Rightarrow$, kui Δ_u vähendada.

I Võrrandite lahendamine

Sissejuhatus

Tuntumad on algebralised võrrandid

$$a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n = 0, \quad a_0 \neq 0.$$

Sellist võrrandit saab radikaalides (juuri kasutades) lahendada, kui $n = 1, \dots, 4$. Kui $n \geq 5$, siis üldiselt ei saa. Vaatleme põhiliselt võrrandeid

$$f(x) = 0,$$

kus f on suvaline funktsioon. Praktikas ettetulevatest võrranditest rõhuv enamus lahendatakse ligikaudselt. Selleks kasutatakse peamiselt iteratsioonimeetodeid. Need on järgmised: antakse ette (valitakse) alglahendite komplekt $x_0, \dots, x_k$ (võib olla ka üks alglahend x_0). Seejärel leitakse järk-järgult järgmised lahendid

$$x_0, \dots, x_k \to x_{k+1} \to x_{k+2} \to \dots,$$

kasutades eelnevaid. Niisiis leitakse iteratsioonimeetodil jada x_n.

Iteratsioonimeetodite juures tuleb alati uurida koondumist ehk vastata küsimusele: kas jada x_n koondub lahendiks? Kui ei koondu, ei ole mõtet seda jada lahendi ligikaudseks leidmiseks kasutada.

Näide, lõigu poolitamise meetod. Olgu vaatluse all funktsioon $f:[a,b]\to\mathbb{R}$, mis on pidev, kusjuures $f(a)f(b)<0$. Siis on teada, et eksisteerib $x^*\in(a,b)$ nii, et $f(x^*)=0$ ehk x^* on võrrandi $f(x)=0$ lahend. Võtame $x_0=a$, $x_1=b$, $x_2=\frac{x_0+x_1}{2}$ ja vaatame, kas $f(x_0)f(x_2)<0$ või $f(x_2)f(x_1)<0$. Esimesel juhul olgu $x_3=\frac{x_0+x_2}{2}$, teisel juhul $x_3=\frac{x_1+x_2}{2}$. Edasi poolitatakse seda lõiku, mille otspunktides ~~on~~ funktsiooni f ~~vastandmärgilised~~ väärtused vastandmärgilised, jne. Leiab aset hinnang $|x_n-x^*|\le\frac{b-a}{2^{n-1}}\to 0$, kui $n\to\infty$. See tähendab, et viga ($\frac{b-a}{2^{n-1}}$ on absoluutne viga, $|x_n-x^*|$ on tõelise vea absoluutväärtus) kahaneb geomeetrilise progressiooni teguriga $\frac{1}{2}$, mida praktika seisukohalt loetakse aeglaseks.

§1. Harilik iteratsioonimeetod

1. Meetodi kirjeldus ja koonduvusteoreem.

Olgu antud võrrand

$$x=g(x). \tag{1}$$

Harilikus iteratsioonimeetodis on vaja ühte alglähendit x_0, seejärel leitakse

$$x_{n+1}=g(x_n),\ n=0,1,\dots .$$

Teoreem (koonduvusteoreem). Olgu

1) $g : [a,b] \to [a,b]$, s.t. $x \in [a,b] \Rightarrow g(x) \in [a,b]$,

2) g on ahendav lõigus $[a,b]$, s.t. $\exists\, q < 1$ nii, et $|g(x_1) - g(x_2)| \le q\,|x_1 - x_2|$ $\forall x_1, x_2 \in [a,b]$, $x_1 \neq x_2$, korral. Siis võrrandil (1) on lõigus $[a,b]$ parajasti üks lahend x^*, iga $x_0 \in [a,b]$ korral $x_n \to x^*$, kehtib hinnang

$$|x_n - x^*| \le \frac{q^n}{1-q}\,|x_0 - x_1|. \qquad (2)$$

Tõestus. Valime vabalt $x_0 \in [a,b]$, moodustame iteratsioonijada $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, \ldots$. Siis $x_0 \in [a,b] \Rightarrow x_1 = g(x_0) \in [a,b] \Rightarrow x_2 = g(x_1) \in [a,b] \Rightarrow \ldots$, s.t. $x_n \in [a,b]$ iga n korral. Näitame, et x_n on Cauchy jada. Kõigepealt

$$|x_n - x_{n+1}| = |g(x_{n-1}) - g(x_n)| \le q\,|x_{n-1} - x_n| \le$$
$$\le q^2\,|x_{n-2} - x_{n-1}| \le \ldots \le q^n\,|x_0 - x_1|.$$

Seejärel

$$|x_n - x_{n+p}| \le |x_n - x_{n+1}| + |x_{n+1} - x_{n+2}| + \ldots + |x_{n+p-1} - x_{n+p}| \le$$
$$\le q^n\,|x_0 - x_1| + \ldots + q^{n+p-1}\,|x_0 - x_1| \le$$
$$\le \Big(\sum_{k=n}^{\infty} q^k\Big)\,|x_0 - x_1| = q^n(1 + q + \ldots)\,|x_0 - x_1| =$$
$$= \frac{q^n}{1-q}\,|x_0 - x_1| \to 0, \qquad (2')$$

kui $n \to \infty$, sõltumata indeksist p. Sellega on jada x_n fundamentaalsus tõestatud.

Iga reaalarvudest koosnev Cauchy jada koondub, seega $\exists x^* \in \mathbb{R}$ nii, et $x_n \to x^*$. Et $[a, b]$ on kinnine, siis $x^* \in [a, b]$. Võrdusest $x_{n+1} = g(x_n)$ saame piiril $n \to \infty$ $x^* = g(x^*)$, sest g on pidev (g pidevus järeldub ahendavusest).

Näitame lahendi ühesust. Kui on olemas $x^*, x^{**} \in [a, b]$ nii, et $x^* = g(x^*)$ ja $x^{**} = g(x^{**})$, siis

$$|x^* - x^{**}| = |g(x^*) - g(x^{**})| \le q\, |x^* - x^{**}|.$$

Ilmselt $|x^* - x^{**}| = 0$ või $|x^* - x^{**}| > 0$. Teisel juhul $q\,|x^* - x^{**}| < |x^* - x^{**}|$, mis on vastuolus eespool saadud teistpidise võrratusega. Seega $|x^* - x^{**}| = 0$ ehk $x^* = x^{**}$.

Jääb tõestada võrratus (2), see aga järeldub võrratusest (2'), kus teostame piirile mineku $p \to \infty$, siis $x_{n+p} \to x^*$, $x_n - x_{n+p} \to x_n - x^*$, $|x_n - x_{n+p}| \to |x_n - x^*|$.

<u>Järeldus 1</u> (teoreemi tõestusest). Teoreem jääb kehtima, kui tema sõnastuses lõik $[a, b]$ asendada reaalarvude hulgaga $\mathbb{R}$ või poolsirgega $[a, \infty)$ või $(-\infty, b]$.

<u>Järeldus 2.</u> Teoreemis ja järelduses 1 võib ahendavuse nõude 2) asendada tingimusega, et g on diferentseeruv ja $|g'(x)| \le q < 1$ $\forall x \in [a, b]$ (või $\forall x \in \mathbb{R}, [a, \infty), (-\infty, b]$).

<u>Tõestuseks</u> märgime, et tehtud eeldusel

$$g(x_1) - g(x_2) = g'(\xi)(x_1 - x_2), \quad \xi \in (x_1, x_2),$$

ja kui $x_1, x_2 \in [a,b]$, siis $\xi \in [a,b]$ ja ahendavuse tingimuse annab võrratus $|g'(\xi)| \le q < 1$.

<u>Ülesanne 1.</u> Olgu võrrandil $x = g(x)$ lahend x^* ning g ahendav vahemikus $(x^* - \delta, x^* + \delta)$, $\delta > 0$. Tõestada, et kui $x_0 \in (x^* - \delta, x^* + \delta)$, siis harilik iteratsioonimeetod koondub lahendiks x^*.

<u>Ülesanne 2.</u> Olgu võrrandil $x = g(x)$ lahend $x^* \in [a,b]$ ning $0 \le g'(x) \le q < 1$ $\forall x \in [a,b]$. Tõestada, et iga $x_0 \in [a,b]$ korral harilik iteratsioonimeetod koondub lahendiks x^*.

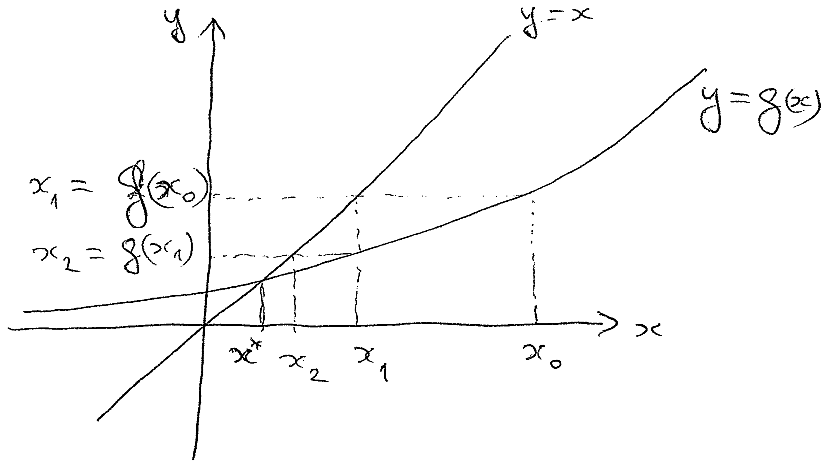
<u>Ülesanne 3.</u> Leida näide funktsioonist $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, kus $|g(x_1) - g(x_2)| < |x_1 - x_2|$ $\forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, $x_1 \ne x_2$, aga võrrandil $x = g(x)$ ei ole lahendit.

<u>Ülesanne 4.</u> Sama, mis ülesanne 3, kus $\mathbb{R}$ asemel on mingi poolsirge $[a, \infty)$.

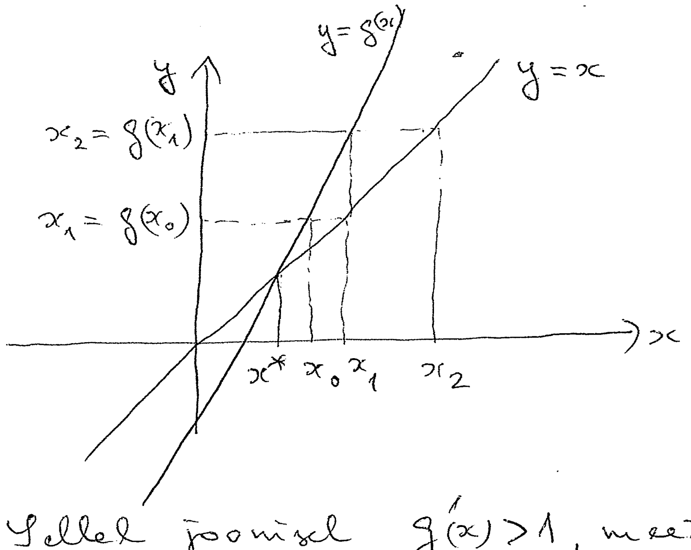
<u>Märkus.</u> Kui $g: [a,b] \to [a,b]$ ja $|g(x_1) - g(x_2)| < |x_1 - x_2|$ $\forall x_1, x_2 \in [a,b]$, $x_1 \ne x_2$, siis on olemas $x^* \in [a,b]$ nii, et $x^* = g(x^*)$.

2. Geomeetriline tõlgendus.

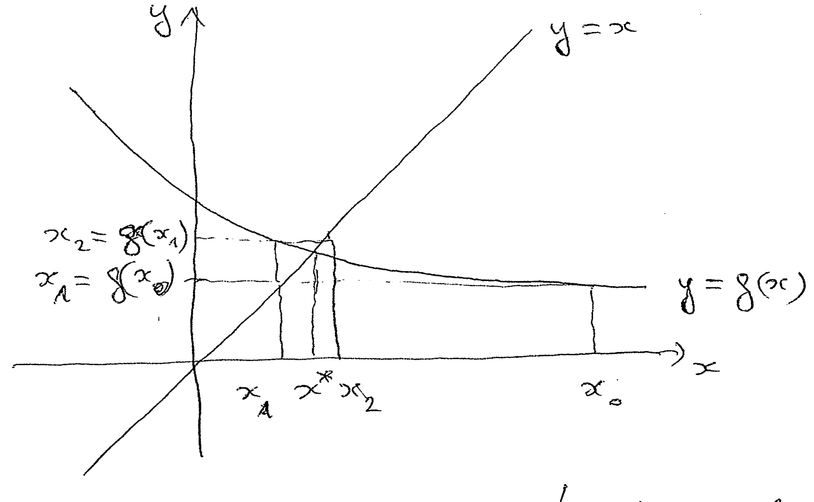
Esitame harilikku iteratsioonimeetodi käitumist iseloomustavad joonised.



Sellel joonisel $0 < g'(x) < 1$, meetod koondub



Sellel joonisel $g'(x) > 1$, meetod ei koondu



Sellel joonisel $-1 < g'(x) < 0$, meetod koondub

Ülesanne 5. Teha joonis juhul $g'(x) < -1$ kohta.

3. Harilikun iteratsioonimeetodi käitumine lahendi ümbruses.

Eeldame, et funktsioon g on pidevalt diferentseeruv. Olgu x^* võrrandi (1) lahend, s.t. $x^* = g(x^*)$. Olgu leitud iteratsioonijada x_n eeskirja $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, \ldots$ kohaselt. ~~Siis~~ Lagrange'i valemi põhjal

$$x_{n+1} - x^* = g(x_n) - g(x^*) = g'(\xi_n)(x_n - x^*),$$

kus $\xi_n \in (x_n, x^*)$ või $\xi_n \in (x^*, x_n)$ vastavalt sellele, kas $x_n < x^*$ või $x_n > x^*$. Kui $x_n \approx x^*$ (s.t. $|x_n - x^*|$ on väike), siis $\xi_n \approx x^*$ ja $g'(\xi_n) \approx g'(x^*)$, sest g' on pidev. Seega

$$x_{n+1} - x^* \approx g'(x^*)(x_n - x^*).$$

Selle vahekorra sisu on selles, et viga $x_n - x^*$ käitub lahendi x^* ümbruses ligikaudu nagu geomeetriline progressioon teguriga $g'(x^*)$.

Kui $0 < |g'(x^*)| < 1$, siis (vähemalt lahendi küllalt väikesest ümbrusest alustades) koondub harilik iteratsioonimeetod geomeetrilise progressiooni kiirusega, mille tegur on $g'(x^*)$. Kui $g'(x^*) = 0$, siis koondub harilik iteratsioonimeetod kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist, mis tähendab, et iga $q>0$ korral $\frac{|x_n - x^*|}{q^n} \to 0$, kui $n \to \infty$ (mõeldud on siin suvaliselt väikeseid q väärtusi).

Ülesanne 6. Tõestada, et kui $g'(x^*)=0$, siis iga $q>0$ korral $\frac{|x_n - x^*|}{q^n} \to 0$, kui $n \to \infty$.

Kui $|g'(x^*)|>1$, siis harilik iteratsioonimeetod ei koondu lahendiks.

Kõikidel juhtudel näitab $g'(\xi_n)$ märk, kas lähendid x_n ja x_{n+1} paiknevad ühel pool või erinevatel pooltel lahendist x^*. Eelmises punktis toodud joonised illustreerivad samuti seda väidet.

4. Näited.

Olgu vaja lahendada võrrand $x^2-a=0$, s.t. on vaja võtta ruutjuurt arvust a. Võib eeldada, et $a>0$. Vaadeldav võrrand ei ole kujul (1), esitame siin kaks võimalust kujule (1) viimiseks.

1) Esitame võrrandi kujul $x=\frac{a}{x}$, mis tähendab, et $g(x)=\frac{a}{x}$. Siis iteratsioonivalem on $x_{n+1}=\frac{a}{x_n}$. Siin $g'(x)=-\frac{a}{x^2}$ ning $(x^*)^2=a$ korral $g'(x^*)=-\frac{a}{(x^*)^2}=-1$. Eelmises punktis esitatud arutelu ei võimalda praegu väita koondumist või seda välistada. Täpsema analüüsiga, mida me siin ei tee,

saab kindlaks teha, et $a > 1$ korral jada x_n hajub, $a < 1$ korral koondub, aga aeglasemalt igast geomeetrilisest progressioonist, mis tähendab, et iga $q \in (0,1)$ korral $\frac{|x_n - x^*|}{q^n} \to \infty$, kui $n \to \infty$ (mõeldud on siin seda, et q on kuitahes lähedal arvule 1).

2) Võrrandi $x = \frac{a}{x}$ ehk $2x = x + \frac{a}{x}$ kirjutame kujul $x = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right)$, s.t. siin $g(x) = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right)$ ja iteratsioonisamm tehakse valemiga $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right)$. Sellel juhul $g'(x) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{a}{x^2}\right)$ ja $g'(x^*) = 0$, mis tähendab, et iteratsioonimeetod koondub kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist.

<u>Ülesanne 7.</u> Tõestada, et kui g on m korda diferentseeruv, $g^{(m)}$ on tõkestatud ja $g'(x^*) = 0, \ldots, g^{(m-1)}(x^*) = 0$, siis lihtsa iteratsioonimeetodis kehtib hinnang

$$|x_{n+1} - x^*| \le \text{const}\, |x_n - x^*|^m.$$

Sellise hinnanguga koondumist nimetatakse m-järku koonduvuseks, $m = 2$ korral ruutkoonduvuseks, $m = 3$ korral kuupkoonduvuseks.

~~Hinnangu~~ $\cancel{x_{n+1} - x}$

Üldisemalt, hinnangu $|x_{n+1} - x^*| \le \text{const}\, |x_n - x^*|^\alpha$, $\alpha > 1$, korral räägitakse astmelisest koonduvusest, mis on kiirem igast geomeetrilisest progressioonist.

Ülesanne 8. Tõestada ülesande 7 abil, et ruutjuure leidmise meetod $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right)$ on ruutkoonduvusega.

§2. Newtoni meetod

1. Meetodi kirjeldus.

Vaatleme võrrandit
$$f(x) = 0, \qquad (1)$$
mille juures eeldame, et f on diferentseeruv. Newtoni meetodis antakse ette alglähend x_0, järgmised lähendid leitakse valemiga
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, \dots .$$
Meetodi sammu saab sooritada, kui $f'(x_n) \neq 0$.

Newtoni meetodit saab vaadelda erijuhuna harilikust iteratsioonimeetodist, kus võrrand (1) on teisendatud kujule
$$x = g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)},$$
seejuures g on määratud funktsiooni f määramispiirkonna punktides, milles $f'(x) \neq 0$. Seepärast on rakendatavad hariliku iteratsioonimeetodi korral saadud tulemused.

Ülesanne 1. Tõestada, et kui f on kaks korda pidevalt diferentseeruv, $f(x^*) = 0$ (s.t. x^* on võrrandi (1) lahend) ja $f'(x^*) \neq 0$, siis vastava funktsiooni g korral $g'(x^*) = 0$, mis tähendab, et Newtoni meetod koondub kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist.

Ülesanne 2. Tõestada, et kui f on kolm korda pidevalt diferentseeruv, $f(x^*)=0$, $f'(x^*)\neq 0$, siis Newtoni meetod on ruutkoonduvusega. Kasutada eelmise paragrahvi ülesannet 7.

Eeldame, et võrrandi (1) lahendamisel on x_n leitud (sealhulgas võib x_n olla alles x_0). Taylori valemi põhjal

$$f(x)=f(x_n)+f'(x_n)(x-x_n)+R(x_n;x).$$

Võrrand (1) on samaväärne võrrandiga

$$f(x_n)+f'(x_n)(x-x_n)+R(x_n;x)=0.$$

Jättes jääkliikme $R(x_n;x)$ ära, saame (lineaarse) võrrandi

$$f(x_n)+f'(x_n)(x-x_n)=0,$$

mille lahend on

$$x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}=x_{n+1}.$$

Niisiis asendatakse Newtoni meetodi igal sammul algvõrrand tema lineariseeringuga, iga samm tähendab lineaarse võrrandi lahendamist. Newtoni meetod on üks lineariseerimismeetoditest.

2. Newtoni meetodi koonduvuskiirus.

Eelmises punktis olid ülesannetes näidatud harilikku iteratsioonimeetodi teooriat kasutades saadavad tulemused Newtoni meetodi koonduvuskiiruse kohta. Siin näitame, et nõudes ülesannetes tehtud eeldusi saab oluliselt nõrgendada.

Eeldame, et f on pidevalt diferentseeruv, $f(x^*) = 0$ ja $f'(x^*) \neq 0$ (lahend x^* on ühekordne). Tähistame $\varepsilon_n = x_n - x^*$. Newtoni meetodi arvutuseeskirjast saame

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Kasutades Taylori arendist

$$f(x_n) = f(x^*) + f'(\xi_n)(x_n - x^*) = f'(\xi_n)\,\varepsilon_n,$$

kus $\xi_n \in (x_n, x^*)$ või $\xi_n \in (x^*, \xi_n)$, saame

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)}\varepsilon_n = \left(1 - \frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)}\right)\varepsilon_n.$$

Kui $x_n \to x^*$, siis $\xi_n \to x^*$, $f'(\xi_n) \to f'(x^*) \neq 0$, $f'(x_n) \to f'(x^*)$, mistõttu $1 - \frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)} \to 0$. Niisiis,

$|\varepsilon_{n+1}| = q_n |\varepsilon_n|$, kus $q_n \to 0$. See tähendab koondumist kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist. Tulemuse olulisuse rõhutamiseks sõnastame ~~s~~selle eraldi.

<u>Lause</u>. Kui f on pidevalt diferentseeruv, siis ühekordse lahendi korral koondub Newtoni meetod kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist.

Eeldame, et f' rahuldab Lipschitzi tingimust, s.t. mingi arvu L korral $|f'(x)-f'(y)| \le L|x-y|$. Siis

$$\left|1-\frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)}\right| = \frac{|f'(x_n)-f'(\xi_n)|}{|f'(x_n)|} \le \frac{L|x_n-\xi_n|}{|f'(x_n)|} \le$$

$$\le \frac{L|\varepsilon_n|}{\frac{1}{2}|f'(x^*)|} = \text{const}\,|\varepsilon_n|,$$

sest $|x_n-\xi_n| \le |x_n-x^*| = |\varepsilon_n|$ ja koondumise $f'(x_n)\to f'(x^*)$ tõttu $|f'(x_n)| \ge \frac{1}{2}|f'(x^*)|$, kui x_n on lahendile x^* küllalt lähedal. Seega $|\varepsilon_{n+1}| \le \text{const}\,|\varepsilon_n|^2$, mille sõnastame jälle eraldi.

<u>Lause</u>. Kui f' rahuldab Lipschitzi tingimust, siis ühekordse lahendi korral on Newtoni meetod ruutkoonduvusega.

Märgime, et f' rahuldab Lipschitzi tingimust, kui f'' on pidev (üldisemalt, f'' on tõkestatud), sest $f'(x)-f'(y) = f''(\xi)(x-y)$, $\xi\in(x,y)$.

<u>3. Newtoni meetodi koonduvuskiirus kordse lahendi korral.</u>

Olgu f m korda pidevalt diferentseeruv ja $f(x^*)=0$, $f'(x^*)=0, \dots, f^{(m-1)}(x^*)=0$, $f^{(m)}(x^*)\ne 0$. Sel juhul nimetame lahendit x^* m-kordseks. Newtoni meetodi ~~[illegible]~~ arvutuseeskirjast saadud võrdus

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

arendame $f(x_n)$ ja $f'(x_n)$ Taylori valemi järgi punktis x^*, saades

$$f(x_n) = f(x^*) + f'(x^*)(x_n - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2!}(x_n - x^*)^2 + \dots +$$

$$+ \frac{f^{(m)}(\xi_n)}{m!}(x_n - x^*)^m = \frac{f^{(m)}(\xi_n)}{m!}\varepsilon_n^m, \quad \xi_n \in (x_n, x^*),$$

$$f'(x_n) = f'(x^*) + f''(x^*)(x_n - x^*) + \dots + \frac{f^{(m)}(\eta_n)}{(m-1)!}(x_n - x^*)^{m-1} =$$

$$= \frac{f^{(m)}(\eta_n)}{(m-1)!}\varepsilon_n^{m-1}, \quad \eta_n \in (x_n, x^*).$$

Siis

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \frac{f^{(m)}(\xi_n)\,(m-1)!}{m!\; f^{(m)}(\eta_n)}\varepsilon_n = \left(1 - \frac{1}{m}\frac{f^{(m)}(\xi_n)}{f^{(m)}(\eta_n)}\right)\varepsilon_n .$$

Kui $x_n \to x^*$, siis $\xi_n \to x^*$, $\eta_n \to x^*$, $f^{(m)}(\xi_n) \to f^{(m)}(x^*) \neq 0$, $f^{(m)}(\eta_n) \to f^{(m)}(x^*)$, seega $\varepsilon_{n+1} = q_n \varepsilon_n$, kus $q_n \to 1 - \frac{1}{m}$ (näiteks $m = 2$ korral $q_n \to \frac{1}{2}$, $m = 3$ korral $q_n \to \frac{2}{3}$), mida suurem m, seda aeglasem on koondumine.

<u>Lause</u>. Kui f on m korda pidevalt diferentseeruv, siis m-kordse lahendi korral koondub Newtoni meetod geomeetrilise progressiooni kiirusega, mille tegur on $1 - \frac{1}{m}$.

Olukorra parandamiseks kasutatakse Newton-Schröderi meetodit

$$x_{n+1} = x_n - m\,\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, \ldots,$$

kus m on lahendi kordsus.

<u>Ülesanne 3.</u> Näidata, et kui $f^{(m)}$ on pidev, siis Newton–Schröderi meetod koondub kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist, kui aga $f^{(m)}$ rahuldab Lipschitzi tingimust, siis Newton–Schröderi meetod on ruutkoonduvusega.

Loomulik on küsida, mida saab leida Newton–Schröderi meetodis kasutatava lahendi kordsust, lähtudes algselt antud nõuandist (1) ehk funktsioonist f, kuna lahend x^* ei ole teada (seda praktikas ei leitagi, leitakse vaid lähisväärtus) ja ei saa leida f tuletisi kohal x^*.

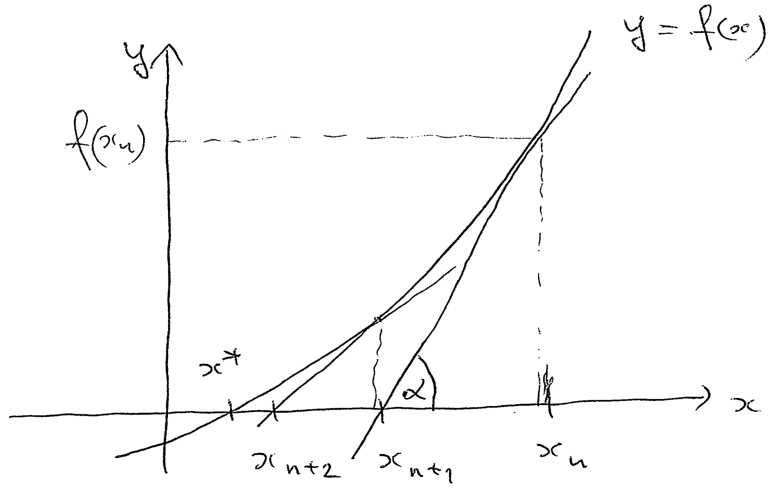
<u>Ülesanne 4.</u> Tõestada, et m-kordse lahendi puhul, kui x_n on leitud Newtoni meetodiga, siis $\dfrac{x_{n+1}-x_n}{x_n - x_{n-1}} \to 1 - \dfrac{1}{m}$ ja

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{-x_{n+1} + 2x_n - x_{n-1}} \to m.$$

Niisiis võib alustada lahendamist Newtoni meetodiga ja kui mõningate arvu sammude järel on lahendi kordsus teada, võib üle minna Newton–Schröderi meetodile.

4. Newtoni meetodi geomeetriline tõlgendus.

Selles punktis kujutame Newtoni meetodit geomeetriliselt. Vaatame joonist



Punktis x_n tõuseme vertikaalselt graafikuni, tõmbame sellele seal puutuja ja vaatleme järgnevas, et puutuja lõikepunkt x-teljega annab x_{n+1}. Saame

$$\frac{f(x_n)}{x_n - x_{n+1}} = \tan \alpha = f'(x_n),$$

milles esimene võrdus tuleb täisnurksest kolmnurgast, teine võrdus aga on tuletise geomeetriline tõlgendus. Saadud võrdusest (ilma vahepealse liikmeta $\tan \alpha$) saame võrduse $x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$. Esitatud joonisel $f'(x) > 0$, $f''(x) > 0$, $x_n > x^*$.

<u>Ülesanne 5.</u> Teha joonised juhtudeks

1) $f'(x) > 0$, $f''(x) < 0$; 2) $f'(x) < 0$, $f''(x) > 0$; 3) $f'(x) < 0$, $f''(x) < 0$.

Kõikidel juhtudel vaadelda olukorda

$x_n > x^*$ ja $x_n < x^*$. Ikanda joonisele vähemalt kolm järjestikust lähendit x_n, x_{n+1}, x_{n+2}.

<u>Ülesanne 6.</u> Leida geomeetriline pilt kus

a) võrrandil $f(x)=0$ on lahend olemas, aga Newtoni meetod ei ole rakendatav, sest $f'(x_n)=0$;

b) võrrandil $f(x)=0$ on lahend olemas, kõik jada x_n liikmed on Newtoni meetodil leitavad, aga jada x_n on tõkestamata ja seega ei koondu;

c) võrrandil $f(x)=0$ on lahend olemas, kõik jada x_n liikmed on Newtoni meetodil leitavad, jada x_n on tõkestatud, aga ei koondu.

Geomeetrilist tõlgendust aluseks võttes nimetatakse Newtoni meetodit veel puutujate meetodiks.

5. Modifitseeritud Newtoni meetod.

Modifitseeritud Newtoni meetodi arvutuseeskiri võrrandi (1) lahendamisel on

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)}, \quad n = 0, 1, \ldots,$$

s.t. igal sammul kasutatakse algelähendil x_0 leitud tuletist $f'(x_0)$. Võttes $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x_0)}$, näeme, et modifitseeritud Newtoni meetod on harilike iteratsioonimeetodi erijuht. Seejuures $g'(x) = 1 - \frac{f'(x)}{f'(x_0)}$ ja $g'(x^*) = 1 - \frac{f'(x^*)}{f'(x_0)}$.

Üldiselt $f'(x^*) \neq f'(x_0)$, seepärast $g'(x^*) \neq 0$ ja modifitseeritud Newtoni meetod koondub geomeetrilise progressiooni kiirusega eeldusel et koondumine leiab aset.

6. Näited.

1) Vaatleme nõuandit $f(x) = x^2 - a = 0$. Siis $f'(x) = 2x$, Newtoni meetod on

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - a}{2x_n} = \frac{2x_n^2 - x_n^2 + a}{2x_n} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right).$$

See on tuttav harilikus iteratsioonimeetodi käsitlemisest, teame, et ta on ruutkoondumusega. Meetod koondub iga alglähendi $x_0 \neq 0$ korral.

2) Olgu $f(x) = x^3 - a = 0$, siis $f'(x) = 3x^2$ ja iteratsiooniesmiini on

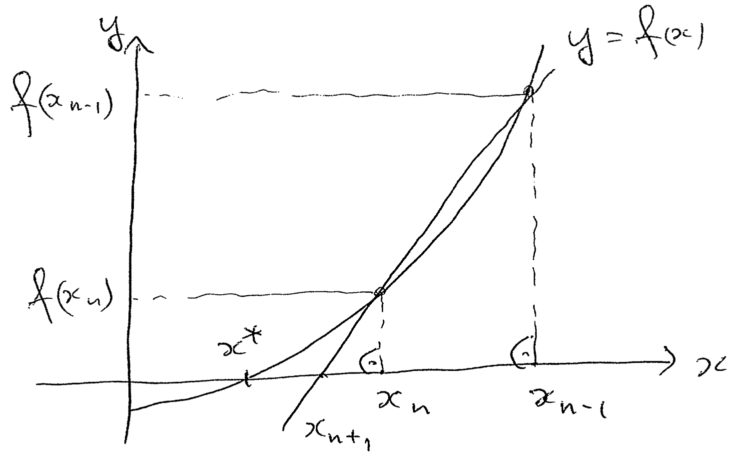
$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 - a}{3x_n^2} = \frac{1}{3}\left(2x_n + \frac{a}{x_n^2}\right).$$

Ülesanne 7. Leidi palju ~~[illegible]~~ on näites 2) alglähendeid ja millised need on, mis Newtoni meetod ei koondu? Soovitus: vaadelda geomeetrilist tõlgendust.

§ 3. Teisi iteratsioonimeetodeid

1. Lõikajate meetod.

Vaatleme võrrandit $f(x)=0$. Olgu antud alglähendid x_0, x_1, $x_0 \neq x_1$. Ühendame punktid $(x_0, f(x_0))$ ja $(x_1, f(x_1))$ sirgega. Selle sirge lõikepunkti x-teljega esimene koordinaat olgu x_2. Sama protseduuri kordame lähenditega x_1, x_2, jne. Tuletame arvutuseeskirja, mis lähendite x_{n-1} ja x_n abil leitakse x_{n+1}.



Täisnurksetest kolmnurkadest saame

$$\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} = \frac{x_{n-1} - x_{n+1}}{x_n - x_{n+1}}.$$

Sellest

$$f(x_{n-1})(x_n - x_{n+1}) = f(x_n)(x_{n-1} - x_{n+1}),$$

$$(f(x_n) - f(x_{n-1}))\, x_{n+1} = x_{n-1} f(x_n) - x_n f(x_{n-1}),$$

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1} f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})},$$

mida võime rakendada x_{n+1} leidmiseks.

Liites lugejale $\pm x_n f(x_n)$, saame

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n).$$

Kui f on diferentseeruv, siis Lagrange'i valemi põhjal $f(x_n) - f(x_{n-1}) = f'(\xi_n)(x_n - x_{n-1})$, $\xi_n \in (x_n, x_{n-1})$, seega

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(\xi_n)}.$$

Viimane valem näitab, et lõikajate meetod on sarnane Newtoni meetodile, milles $f'(x_n)$ asemel on lõikajate meetodis $f'(\xi_n)$. Lõikajate meetod ei ole siiski hariliku iteratsioonimeetodi erijuht, sest igal sammul kasutatakse järjestikuse lähendi leidmisel kahte eelnevat lähendit.

2. Lõikajate meetodi koonduvuskiirus.

Selles punktis teeme kindlaks, milline on lõikajate meetodi koonduvuskiirus eeldusel, et meetod koondub.

Eeldame, et funktsioon f on küllalt sile ning $f(x^*)=0$, $f'(x^*)\neq 0$, $f''(x^*)\neq 0$ (niisiis on lahend x^* ühekordne). Eeldame veel, et lõikajate meetodis $x_n \to x^*$ vähemalt geomeetrilise progressiooni kiirusega, s.t. $|x_{n+1}-x^*| \le q|x_n - x^*|$, $q<1$. Eesmärgiks on leida, milline on tegelik meetodi koonduvusjärk.

Lähtume võrdusest

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1} f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Lahutades mõlemast poolest x^* ja pidades silmas võrdust $\varepsilon_n = x_n - x^*$, saame

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{\varepsilon_{n-1} f(x_n) - \varepsilon_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})},$$

mida asume vigade põhivalemina uurima.

~~Selle lugeja ...~~

Selle parema poole lugejas kasutame Taylori arendisi

$$f(x_n) = f(x^*) + f'(x^*)(x_n - x^*) + \frac{1}{2} f''(x^*)(x_n - x^*)^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_n)(x_n - x^*)^3,$$

$$f(x_{n-1}) = f(x^*) + f'(x^*)\,\varepsilon_{n-1} + \frac{1}{2} f''(x^*)\,\varepsilon_{n-1}^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi_{n-1})\,\varepsilon_{n-1}^3,$$

kus $\xi_n \in (x_n, x^*)$, $\xi_{n-1} \in (x_{n-1}, x^*)$. Siis põhivalemis

$$\text{lugeja} = \frac{1}{2} f''(x^*)\,\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}) +$$

$$+ \frac{1}{6} f'''(\xi_n)\,\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n^2 - \varepsilon_{n-1}^2) +$$

$$+ \frac{1}{6}\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n\left(f'''(\xi_n) - f'''(\xi_{n-1})\right)\varepsilon_{n-1}^2.$$

Veendume, et siin esimene liidetav on pealiige ehk teised on sellega võrreldes kiiremini koonduvad. Teises liidetavas $\varepsilon_n^2 - \varepsilon_{n-1}^2 = (\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})(\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1})$, milles on pealiikmega võrreldes tegur $\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1} \to 0$, kusjuures $f'''(\xi_n)$ on tõkestatud f küllaldase sileduse korral. Niisuguses liidetavas $f'''(\xi_n) - f'''(\xi_{n-1}) = f^{IV}(\bar{\xi}_n)(\xi_n - \xi_{n-1})$,

$\bar{\xi}_n \in (\xi_n, \xi_{n-1})$ ning jälle f sileduse tõttu on $f'''(\bar{\xi}_n)$ tõkestatud. Kui x_{n-1} ja x_n on erineval pool lahendist x^*, näiteks $x_{n-1} < x^* < x_n$, siis $x_{n-1} < \xi_{n-1} < x^* < \xi_n < x^*$ ja $|\xi_n - \xi_{n-1}| \le |x_{n-1} - x_n| =$ $= |\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n|$ ja niimoodi liidetava kiirem koondumus pealiikmega võrreldes lugeja arutuses on saadud. Kui aga x_{n-1} ja x_n on lahendist x^* ühel pool, näiteks $x^* < x_n < x_{n-1}$, siis $x^* < \xi_{n-1} < x_{n-1}$ ja $x^* < \xi_n < x_n$ tõttu $|\xi_n - \xi_{n-1}| \le |x_{n-1} - x^*|$. Kuid

$$|x_{n-1} - x^*| \le (x_{n-1} - x_n) + |x_n - x^*| \le |x_{n-1} - x_n| + q\,|x_{n-1} - x^*|,$$

$$(1-q)\,|x_{n-1} - x^*| \le |x_{n-1} - x_n|,$$

mille abil

$$|\xi_n - \xi_{n-1}| \le \frac{1}{1-q}\,|x_{n-1} - x_n| = \frac{1}{1-q}\,|\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n|$$

ja ka sellel juhul on saadud niimoodi liidetava kiirem koondumus kui pealiikmel. Niisiis, põhiosas lugeja $\approx \frac{1}{2} f''(x^*)\,\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$.

Analoogiliselt toimime vigade põhiosas parema poole nimetajaga, arendades

$$f(x_n) = f(x^*) + f'(x^*)\,\varepsilon_n + \frac{1}{2} f''(\eta_n)\,\varepsilon_n^2, \quad \eta_n \in (x_n, x^*),$$

$$f(x_{n-1}) = f(x^*) + f'(x^*)\,\varepsilon_{n-1} + \frac{1}{2} f''(\eta_{n-1})\,\varepsilon_{n-1}^2, \quad \eta_{n-1} \in (x_{n-1}, x^*).$$

Siis

$$\text{nimetaja} = f'(x^*)(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}) + \frac{1}{2} f''(\eta_n)(\varepsilon_n^2 - \varepsilon_{n-1}^2) +$$

$$+ \frac{1}{2}\big(f''(\eta_n) - f''(\eta_{n-1})\big)\,\varepsilon_{n-1}^2 .$$

Kuna siin on teine liidetav kiiremini koondu kui eeldame ja $f''(\eta_n) - f''(\eta_{n-1}) = f'''(\bar{\eta}_n)(\eta_n - \eta_{n-1})$, $\bar{\eta}_n \in (\eta_{n-1}, \eta_n)$, ning $|\eta_n - \eta_{n-1}| \le \frac{1}{1-q} |\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}|$. Seepärast põhiliselt-kones nimetaja $\approx f'(x^*)(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$. Kokkuvõttes

$$\varepsilon_{n+1} \approx \frac{\frac{1}{2} f''(x^*)\, \varepsilon_n \varepsilon_{n-1}}{f'(x^*)} = a\, \varepsilon_n \varepsilon_{n-1},$$

kus tähistame $a = \frac{f''(x^*)}{2 f'(x^*)}$.

Otsime võrrandile $\varepsilon_{n+1} = a\, \varepsilon_n \varepsilon_{n-1}$ lahendit, kus $\varepsilon_n \to 0$ ja $\varepsilon_{n+1} = b\, \varepsilon_n^{\alpha}$, milles meid huvitab eelkõige koonduvusjärk α. Siis $\varepsilon_n = b\, \varepsilon_{n-1}^{\alpha}$ ja $\varepsilon_{n+1} = b\, \varepsilon_n^{\alpha} = b\left(b\, \varepsilon_{n-1}^{\alpha}\right)^{\alpha} = b^{1+\alpha} \varepsilon_{n-1}^{\alpha^2}$. Teiselt poolt, $\varepsilon_{n+1} = a\, \varepsilon_n \varepsilon_{n-1} = a(b\, \varepsilon_{n-1}^{\alpha})\varepsilon_{n-1} = ab\, \varepsilon_{n-1}^{\alpha+1}$, mis viib võrduseni $\alpha^2 = \alpha + 1$ ehk $\alpha^2 - \alpha - 1 = 0$. Sellel võrrandil on lahendid $\alpha = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{5}}{2}$. Lahend $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{5}}{2} < 0$ ei luba koondumist $\varepsilon_n \to 0$, seepärast sobib ainult $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1,618\ldots$ ja sel juhul muidugi leiab aset koondumine $\varepsilon_n \to 0$ kiirusega

$$|x_{n+1} - x^*| \le \mathrm{const}\, |x_n - x^*|^{1,618\ldots}.$$

3. Steffenseni meetod.

Kui rakendada võrrandile $x = g(x)$ harilikku iteratsioonimeetodit ja näiteks $|g'(x^*)| = 0,99$, siis on vaja palju iteratsioonisamme, et saada mõistlikku täpsust. Steffenseni meetod on võimaluseks siin koondumist kiirendada.

Meetodi kiirendamiseks on mitu võimalust.

1) Võrrandi $x = g(x)$ lahendamisel lähtume alglähendist x_0, leiame $x_1 = g(x_0)$, seejärel $x_2 = g(x_1)$ ja

$$\tilde{x}_2 = x_2 - \frac{(x_2 - x_1)^2}{x_2 - 2x_1 + x_0} = \frac{x_0 x_2 - x_1^2}{x_2 - 2x_1 + x_0}.$$

Lähendiga $\tilde{x}_2$ jätkame, leides $x_3 = g(\tilde{x}_2)$, $x_4 = g(x_3)$, seejärel $\tilde{x}_4$ nagu leidsime $\tilde{x}_2$ jne. Üldiselt, kui $\tilde{x}_n$ on leitud (n paaris), siis $x_{n+1} = g(\tilde{x}_n)$, $x_{n+2} = g(x_{n+1})$,

$$\tilde{x}_{n+2} = x_{n+2} - \frac{(x_{n+2} - x_{n+1})^2}{x_{n+2} - 2x_{n+1} + \tilde{x}_n}.$$

Viimast eeskirja $\tilde{x}_{n+2}$ leidmiseks nimetatakse Aitkeni teisenduseks. Niisiis võib meetodit kiirendada

$$x_0 \xrightarrow{h.it.} x_1 \xrightarrow{h.it.} x_2 \xrightarrow{A.t.} \tilde{x}_2 \xrightarrow{h.it.} x_3 \xrightarrow{h.it.} x_4 \xrightarrow{A.t.} \tilde{x}_4 \rightarrow \dots$$

2) Leiame $x_1 = g(x_0)$ ja rakendame võrrandile $f(x) \equiv x - g(x) = 0$ lõikajate meetodit punktides x_0, x_1. Siis

$$f(x_0) = x_0 - g(x_0) = x_0 - x_1,$$

$$f(x_1) = x_1 - g(x_1) = x_1 - x_2,$$

$$\frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{x_0(x_1 - x_2) - x_1(x_0 - x_1)}{x_1 - x_2 - (x_0 - x_1)} =$$

$$= \frac{-x_0 x_2 + x_1^2}{-x_2 + 2x_1 - x_0} = \tilde{x}_2.$$

Seega saab Steffenseni meetodit esitada

$$x_0 \xrightarrow[x=g(x)]{h.it.} x_1 \xrightarrow[x-g(x)=0]{l.m.} \tilde{x}_2 \xrightarrow[x=g(x)]{h.it.} x_3 \xrightarrow[x-g(x)=0]{l.m.} \tilde{x}_4 \to \dots$$

3) Steffenseni meetodit võib veel käsitleda kui harilikku iteratsioonimeetodit, mis on rakendatud võrrandile $x=\varphi(x)$, kus

$$\varphi(x) = \frac{x\,g(g(x)) - (g(x))^2}{g(g(x)) - 2g(x) + x},$$

ehk

$$x_0 \xrightarrow[x=\varphi(x)]{h.it.} \tilde{x}_2 \xrightarrow[x=\varphi(x)]{h.it.} \tilde{x}_4 \to \dots$$

Uurime meetodi koonduvust hariliku iteratsioonimeetodi kohta saadud tulemusi rakendades ja kolmandat meetodi tõlgendust silmas pidades.

Eeldame, et g on pidevalt diferentseeruv, $x^*=g(x^*)$, $g'(x^*)\neq 0$, $g'(x^*)\neq 1$. Eespool toodud võrdus ei defineerinud $\varphi(x^*)$, sest seal $x=x^*$ korral on nimetaja väärtus 0. Olgu $\varphi(x^*)=x^*$. Leiame $\varphi'(x^*) = \lim_{x\to x^*}\frac{\varphi(x)-\varphi(x^*)}{x-x^*}$.

Lagrange'i valemi põhjal

$$g(g(x)) - g(x) = g'(\xi)(g(x)-x),\quad \xi\in(x,g(x)),$$

ja kui $x\to x^*$, siis $g(x)\to g(x^*)=x^*$, seega $\xi\to x^*$.

Seega

$$\varphi(x) = \frac{x\,g(g(x)) - x\,g(x) + x\,g(x) - (g(x))^2}{g(g(x)) - g(x) - (g(x)-x)} =$$

$$= \frac{x\, g'(\xi)\,(g(x)-x) - g(x)\,(g(x)-x)}{(g'(\xi)-1)\,(g(x)-x)} =$$

$$= \frac{x\, g'(\xi) - g(x)}{g'(\xi)-1},$$

mille saamisel kasutasime asjaolu $g(x) \neq x$, kui $x \neq x^*$, mis kehtib, kui ~~[illegible]~~ x on x^* küllalt väikeses ümbruses, ning arvestada tuleb veel tingimust $g'(x^*) \neq 0$. Kasutades veel arendist $g(x) = g(x^*) + g'(\xi_1)(x - x^*)$, $\xi_1 \in (x, x^*)$, milles asendame $g(x^*)$ arvuga x^*, saame

$$\varphi(x) - \varphi(x^*) = \frac{x\, g'(\xi) - g(x)}{g'(\xi)-1} - x^* =$$

$$= \frac{x\, g'(\xi) - x^* - g'(\xi_1)(x - x^*) - x^* g'(\xi) + x^*}{g'(\xi)-1} =$$

$$= \frac{(g'(\xi) - g'(\xi_1))(x - x^*)}{g'(\xi)-1}.$$

Nüüd

$$\lim_{x \to x^*} \frac{\varphi(x) - \varphi(x^*)}{x - x^*} = \lim_{x \to x^*} \frac{g'(\xi) - g'(\xi_1)}{g'(\xi)-1} = \frac{g'(x^*) - g'(x^*)}{g'(x^*)-1} = 0,$$

mis ütleb, et $\varphi'(x^*) = 0$ ja Steffenseni meetod koondub tehtud eeldustel kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist.

Ülesanne 1. Näidata §1 ülesannet 7 kasutades, et g küllaldase sileduse korral on eespool tehtud eeldustel Steffenseni meetod ruutkoonduvusega.

4. Mülleri meetod.

Vaatleme võrrandit $f(x)=0$. Olgu antud alglähendid x_0, x_1, x_2, mis on paarikaupa erinevad, s.t. $x_0 \neq x_1$, $x_1 \neq x_2$, $x_2 \neq x_0$. On olemas parajasti üks polünoom $P(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$, mis rahuldab tingimusi $P(x_i) = f(x_i)$, $i=0,1,2$, ehk tema graafik ehk ruutparabool läbib funktsiooni f graafiku punkte $(x_i, f(x_i))$, $i=0,1,2$. Selles saab veenduda, tehes kindlaks, et kordajaid c_0, c_1, c_2 määrava süsteemi $c_0 + c_1 x_i + c_2 x_i^2 = f(x_i)$, $i=0,1,2$, determinant ei võrdu nulliga. Tähistame selle polünoomi P_{012} ning lahendame ruutvõrrandi $P_{012}(x)=0$. Selle lahendi, mis on lähemal arvule x_2, loeme lähendiks x_3. Sama võtet kordame lähenditega x_1, x_2, x_3, leides polünoomi P_{123} ja lahendades ruutvõrrandi $P_{123}(x)=0$, millest määrame x_4 jne. Taolist jada x_n leidmist nimetatakse Mülleri meetodiks ehk paraboolide meetodiks. Võrdluseks meenutame, et lõikajate meetodis pandi läbi funktsiooni f kahe punkti sirge, mis on esimese astme polünoomi graafik.

Saab tõestada, et ühekordse lahendi korral on Mülleri meetodi koondumiskiirus iseloomustatav hinnanguga $|x_{n+1} - x^*| \leq \mathrm{const}\,|x_n - x^*|^{1,84\ldots}$, kahekordse lahendi korral $|x_{n+1} - x^*| \leq \mathrm{const}\,|x_n - x^*|^{1,23\ldots}$.

5. Kõrgemat järku iteratsioonimeetodid.

Vaatleme võrrandi $f(x)=0$ lahendamist mingi iteratsioonimeetodiga. Olgu leitud x_n. Meenutame, et Newtoni meetodis arendasime

$$f(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x-x_n) + R_1(x),$$

jätsime ära jäänliikme R_1, saadud võrrandi $f(x_n) + f'(x_n)(x-x_n) = 0$ lahendamisel saime

$$x - x_n = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ ja } x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Võtame pikema arendise

$$f(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x-x_n) + \frac{f''(x_n)}{2}(x-x_n)^2 + R_2(x),$$

jätame ära jäänliikme R_2 ja jõuame võrrandini

$$f(x_n) + f'(x_n)(x-x_n) + \frac{f''(x_n)}{2}(x-x_n)^2 = 0.$$

Siin on järgmised võimalused:

1) lahendame ruutvõrrandi ning selle lahendi, mis on lähemal lähendile x_n, võtame lähendiks x_{n+1}.

Ülesanne 2. Eeldades, et lahend on ühekordne, tuletada eeskiri lähendi x_{n+1} leidmiseks (määrata, kumb ruutvõrrandi lahend tuleb võtta), kui x_n ~~on~~ on lahendile küllalt lähedal.

2) asendame ruutvõrrandis $(x-x_n)^2 = \left(\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\right)^2$, mis on pärit Newtoni meetodist. Säilinud lineaarsest võrrandist saame lahendina

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - \frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}\left(\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\right)^2.$$

Seda meetodit nimetatakse Euler-Tšebõšovi meetodiks.

3) asendame ruutvõrrandi ruutliikmes

$$(x-x_n)^2 = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}(x-x_n),$$

s.t. $(x-x_n)^2$ korral ainult ühe teguri Newtoni meetodi põhjal. Saadud lineaarse võrrandi lahendiks tuleb

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)\,f'(x_n)}{(f'(x_n))^2 - \frac{1}{2} f''(x_n)f(x_n)}.$$

Taolist meetodit nimetatakse Halley meetodiks.

<u>Ülesanne 3.</u> Tõestada, et nii Euler-Tšebõšovi kui ka Halley meetod on kuupkoonduvusega, kui lahend on ühekordne ja f'' rahuldab Lipschitzi tingimust.

Praktikas neid meetodeid peaaegu ei kasutata, sest nad kasutavad funktsiooni f teist tuletist ja see ei ole näiteks katseandmete põhjal enamasti leitav. Peale selle, kui $\varepsilon_n = |x_n - x^*|$, $n=1$ kuupkoonduvuse korral $\varepsilon_n \sim 10^{-1}$ annab $\varepsilon_{n+1} \sim 10^{-3}$, $\varepsilon_{n+2} \sim 10^{-9}$, ruutkoonduvus aga $\varepsilon_{n+1} \sim 10^{-2}$, $\varepsilon_{n+2} \sim 10^{-4}$, $\varepsilon_{n+3} \sim 10^{-8}$, s.t. tavaliselt vajalik täpsus saavutatakse ruutkoonduvuse korral ainult ühe lisasammuga, pidades silmas, et enne täpsuse $\varepsilon_n \sim 10^{-1}$ saavutamist kuupkoonduvusel koonduvuskiiruse eelist ei ole.

II Võrrandisüsteemide lahendamine

Vaatleme võrrandisüsteemi

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0, \\ \dots\dots\dots\dots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0, \end{cases}$$

kus $f_1, \dots, f_n$ on antud funktsioonid, $x_1, \dots, x_n$ otsitavad arvud. Tähistame $x = (x_1, \dots, x_n)$, $F(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x))$, siis võime vaadeldava süsteemi kirjutada

$$F(x) = 0,$$

kus $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ või $F : \mathcal{D} \to \mathbb{R}^n$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$. Käsitleme ka süsteemi $x = G(x)$, mis võrrandite kaupa kirjutatult on

$$\begin{cases} x_1 = g_1(x_1, \dots, x_n), \\ \dots\dots\dots\dots \\ x_n = g_n(x_1, \dots, x_n), \end{cases}$$

s.t. siin $G(x) = (g_1(x), \dots, g_n(x))$. Selliste süsteemide lahend on vektor $x^* \in \mathbb{R}^n$, kus $F(x^*) = 0$ või $x^* = G(x^*)$, mis tähendab, et x^* rahuldab süsteemi iga võrrandit.

Iteratsioonimeetodil leitakse vektorite jada x^m, $m = 0, 1, \dots$, $x^m = (x_1^m, \dots, x_n^m) \in \mathbb{R}^n$. Vaatleme ruumis $\mathbb{R}^n$ mingit normi $\|\cdot\|$. Öeldakse, et $x^m \to x^*$, kui $\|x^m - x^*\| \to 0$ protsessis $m \to \infty$. Tegelikult $\|x^m - x^*\| \to 0$ on samaväärne sellega, et $x_i^m \to x_i^*$, $i = 1, \dots, n$, kui $m \to \infty$, olenemata normi valikust. Enamkasutatavad normid ruumis $\mathbb{R}^n$ on

$$\|x\|_2 = (x_1^2 + \dots + x_n^2)^{1/2},$$

$$\|x\|_1 = |x_1| + \dots + |x_n|,$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|,$$

lisaks veel $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$, $1 \le p < \infty$. Seejuures iga $x \in \mathbb{R}^n$ korral $\lim_{p \to \infty} \|x\|_p = \|x\|_\infty$.

Juhul $n = 1$ on kõik äsjakirjeldatud normid $|x|$.

§1. Harilik iteratsioonimeetod

Vaatleme süsteemi $x = G(x)$. Harilikus iteratsioonimeetodis antakse ette alglähend $x^0 \in \mathbb{R}^n$, järgmised lähendid avalduvad $x^{m+1} = G(x^m)$, $m = 0, 1, \dots$, mis koordinaadikujul on

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = g_1(x_1^m, \dots, x_n^m), \\ \dots\dots\dots\dots \\ x_n^{m+1} = g_n(x_1^m, \dots, x_n^m). \end{cases}$$

Olgu ruumis $\mathbb{R}^n$ antud norm $\|\cdot\|$. Kinnine kera on hulk $B = \bar{B}(a, r) = \{x : \|x - a\| \le r\}$, kus r on kera raadius, $a \in \mathbb{R}^n$ kera keskpunkt. Juhul $n = 1$ on $\{x : |x - a| \le r\} = [a - r, a + r]$ lõik.

<u>Teoreem</u> (harilikue iteratsioonimeetodi koonduvusteoreem). Kui 1) $G: B \to B$ ja 2) $\exists q<1$ nii, et $\| G(x) - G(y) \| \le q \| x-y \|$ igasuguste $x, y \in B$, $x \ne y$, korral, siis võrrandil $x = G(x)$ on keras B parajasti üks lahend x^*, iga alglähendi $x^0 \in B$ korral harilik iteratsioonimeetod koondub selleks lahendiks ($x^n \to x^*$), kehtib hinnang

$$\| x^n - x^* \| \le \frac{q^n}{1-q} \| x^0 - x^1 \| .$$

Teoreemi tõestus on täiesti sarnane juhul $n=1$ esitatuga, milles olnud $|\cdot|$ tuleb asendada normiga $\|\cdot\|$.

<u>Täiendusi</u>. 1. Teoreemis tehtud eelduste asemel võib eeldada, et $\|G(x) - G(y)\| \le q \| x-y \|$ igasuguste $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \ne y$, korral (muidugi siis $G: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$). Põhjenduseks märgime, et põhivariandi tõestuses tuleb kera B asemel võrkjal vaadelda terve ruumi $\mathbb{R}^n$.

2. Eeldame teoreemis toodud G ahendavust 2), aga $G: B \to B$ asemel vaame tingimust $\|G(a) - a\| \le (1-q) r$ (see on piirang kera B keskpunkti a nihkele). Põhjenduseks veendume, et tehtud eeldustel $G: B \to B$. Kui $x \in B$ ehk $\| x - a \| \le r$, siis $\|G(x) - a\| \le \|G(x) - G(a)\| + \|G(a) - a\| \le q \| x - a\| + (1-q) r \le r$, mistõttu $G(x) \in B$.

Järgnevas püüame leida piisavaid tingimusi funktsiooni G ahendavuseks, pidades silmas $n=1$ korral tuletise rakenduse eritelud. Funktsiooni G diferentseeruvus (selle definitsiooni me siin ei esita) on samaväärne funktsioonide g_i, $i=1,\dots,n$, diferentseeruvusega (kui n muutuja funktsioonide diferentseeruvusega). Siis funktsiooni G tuletis avaldub

$$G'(x)=\begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n}(x) \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}.$$

Märgime, et funktsioonide g_i diferentseeruvus ei ole samaväärne osatuletiste $\frac{\partial g_i}{\partial x_j}$, $i,j=1,\dots,n$, eksisteerimisega. Juhul $n=1$ kasutasime Lagrange'i valemit, siin aga $n\geq 2$ korral võrdus $G(x)-G(y)=G'(\xi)(x-y)$ ei kehti, küll kehtib Lagrange'i keskväärtushinnang

$$\|G(x)-G(y)\|\leq \sup_{0<\lambda<1}\|G'(\lambda x+(1-\lambda)y)\|\,\|x-y\|.$$

Sellest saame üldise tulemuse: kui $\|G'(x)\|\leq q<1$ iga $x\in B$ korral, siis G on ahendav keras B. Põhjenduseks märgime, et kui $x,y\in B$, $x\neq y$, siis iga $\lambda\in(0,1)$ korral $\lambda x+(1-\lambda)y\in B$: $x,y\in B\Rightarrow \|x-a\|\leq r$, $\|y-a\|\leq r$ $\Rightarrow \|\lambda x+(1-\lambda)y-a\|=\|\lambda(x-a)+(1-\lambda)(y-a)\|\leq \lambda\|x-a\|+$ $+(1-\lambda)\|y-a\|\leq \lambda r+(1-\lambda)r=r$, s.t. $\lambda x+(1-\lambda)y\in B$.

Et kontrollida tingimust $\| G'(x) \| \le q < 1$, on vaja selgitada, mis on maatriksi norm ja kuidas seda leitakse.

Kui A on maatriks, siis defineeritakse $\|A\| = \sup\limits_{\|x\| \le 1} \|Ax\|$. Nagu näha, on siin vektori normi kasutatud kahes kohas, seega saab näiteks vaadelda normi $\|A\|_{p \to q} = \sup\limits_{\|x\|_p \le 1} \|Ax\|_q$, kus $1 \le p, q \le \infty$. Kui $A = (a_{ij})$, siis

$$\|A\|_{\infty \to \infty} = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| ,$$

$$\|A\|_{1 \to 1} = \max_{1 \le j \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| ,$$

$$\|A\|_{2 \to 2} \le \Big(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2 \Big)^{1/2} .$$

Ülaltoodud väidetele tuginedes saame järgmised tulemused:

1) kui $\max\limits_{1 \le i \le n} \sum\limits_{j=1}^{n} \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \le q < 1 \quad \forall x \in B = \{ x : \|x - a\|_\infty \le r \}$,

siis G on ahendav keras B ∞-normi mõttes;

2) kui $\max\limits_{1 \le j \le n} \sum\limits_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \le q < 1 \quad \forall x \in B = \{ x : \|x - a\|_1 \le r \}$,

siis G on ahendav keras B 1-normi mõttes;

3) kui $\sum\limits_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right)^2 \le q < 1 \quad \forall x \in B = \{ x : \|x - a\|_2 \le r \}$,

siis G on ahendav keras B 2-normi mõttes.

§ 2. Seideli meetod

Vaatleme süsteemi $x = G(x)$ ehk

$$\begin{cases} x_1 = g_1(x_1, \dots, x_n), \\ \dots\dots\dots\dots \\ x_n = g_n(x_1, \dots, x_n). \end{cases}$$

Seideli meetodis on vaja ühte alglähendit x^0. Kirjeldame üleminekut $x^m \to x^{m+1}$. Kui $x^m = (x_1^m, \dots, x_n^m)$, siis $x^{m+1} = (x_1^{m+1}, \dots, x_n^{m+1})$ leitakse

$$x_1^{m+1} = g_1(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m),$$
$$x_2^{m+1} = g_2(x_1^{m+1}, x_2^m, \dots, x_n^m),$$
$$\dots\dots$$
$$x_n^{m+1} = g_n(x_1^{m+1}, \dots, x_{n-1}^{m+1}, x_n^m).$$

Niisiis, lähendi x^{m+1} komponendid x_i^{m+1} leitakse nii, et väiksema indeksiga komponendid $(x_j^{m+1}, j = 1, \dots, i-1)$ on juba leitud ja neid kasutatakse x_i^{m+1} leidmisel vastava võrrandi abil.

<u>Teoreem</u>. Kehtigu $\|G(x) - G(y)\|_\infty \le q \|x - y\|_\infty$ $(q < 1)$ iga $x, y \in B$, $x \neq y$, korral, kus $B = \{x : \|x - a\|_\infty \le r\}$, ning $\|G(a) - a\|_\infty \le (1 - q) r$. Siis süsteemil $x = G(x)$ on keras B olemas parajasti üks lahend x^*, Seideli meetod koondub selleks lahendiks iga alglähendi $x^0 \in B$ korral, kehtib hinnang

$$\|x^m - x^*\|_\infty \le \frac{q^m}{1-q} \|x^0 - x^1\|_\infty .$$

<u>Tõestus</u>. Lahendi olemasolu ja ühesus ei vaja tõestamist, sest eelmises paragrahvis

toodud teoreemis oli praegustel eeldustel lahendi olemasolu ja ühesust väidetud (juhime tähelepanu sellele, et süsteemi lahendi olemasolu ja ühesus on süsteemi omadus ega sõltu meetodist, millega seda lahendatakse). Teoreemi tõestamiseks tarvitseb praegu tõestada ainult veahinnang.

Tähistame $x^{m,i} = (x_1^{m+1}, \dots, x_{i-1}^{m+1}, x_i^{m}, \dots, x_n^{m})$, seejuures $x^{m,1} = x^m$, $x^{m,n+1} = x^{m+1} = x^{m+1,1}$. Siis Seideli meetodi arvutuseeskiri on

$$x_i^{m+1} = g_i(x^{m,i}), \quad i=1,\dots,n.$$

Veendume, et $x^{m,i} \in B$ iga m, i korral. Selleks piisab lahendada järgmine üldisemas sõnastuses väidet sisaldav

Ülesanne 1. Olgu $G: B \to B$, $B = \{x : \|x-a\|_\infty \le r\}$, $x^{m,i}$ Seideli meetodi rakendamisel süsteemile $x = G(x)$ esinevad vektorid. Tõestada, et kui $x^0 \in B$, siis $x^{m,i} \in B$ iga m, i korral.

Järgmise sammuna formuleerime:

Ülesanne 2. Tõestada, et teoreemi eeldustel kehtib võrratus $\|x^{m+1}-x^*\|_\infty \le q\,\|x^m-x^*\|_\infty$.

Viimase ülesande abil saame $\|x^m-x^*\|_\infty \le$ $\le q\,\|x^{m-1}-x^*\|_\infty \le \dots \le q^m\,\|x^0-x^*\|_\infty$, millest juba järeldub koondumine. Teoreemis väidetud veahinnangu saamiseks hindame

$$\|x^0-x^*\|_\infty \le \|x^0-x^1\|_\infty + \|x^1-x^*\|_\infty \le$$

$\leq \|x^0 - x^1\|_\infty + q\, \|x^0 - x^*\|_\infty,$

millest $(1-q)\, \|x^0 - x^*\|_\infty \leq \|x^0 - x^1\|_\infty$ ja

$\|x^0 - x^*\|_\infty \leq \frac{1}{1-q} \|x^0 - x^1\|_\infty$ ning seda kasutamegi viimases $\|x^m - x^*\|_\infty$ hinnangus.

Märgime, et teoreemis võib seldada $\|G(x) - G(y)\|_\infty \leq q\, \|x-y\|_\infty$ iga $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \neq y$, korral, siis väited jäävad kehtima kujul, mis kera B on asendatud ruumiga $\mathbb{R}^n$.

On loomulik küsida harilikü iteratsioonimeetodi ja Seideli meetodi võrdluse kohta: kumb neist on parem? Põhiküsimusele koondumise kohta anname vastuse hiljem. Arvutuste teostamise seisukohalt on aga harilikü iteratsioonimeetodi eelis see, et ~~ka~~ lähendi x^{m+1} komponente saab x^m komponentide kaudu arvutada samaaegselt nn. paralleelarvutustena, Seideli meetodis aga see võimalus puudub.

§ 3. Newtoni meetod

Selle meetodiga tutvume võrrandite korral, aga teda saab rakendada ka võrrandisüsteemide lahendamisel. Newtoni meetod on vaadeldav harilikü iteratsioonimeetodina, mid tema põhiidee on teine: süsteemi asendamine lähedase lineaarse süsteemiga.

Antud on süsteem

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0, \\ \dots\dots\dots\dots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0, \end{cases} \qquad (1)$$

mis on kirjutatav kujul $F(x)=0$, kus $x=(x_1,\dots,x_n)$, $F(x)=(f_1(x),\dots,f_n(x))$. Olgu F diferentseeruv, see on samaväärne sellega, et $f_1,\dots,f_n$ on diferentseeruvad. Newtoni meetodis antakse ette alglähend x^0, järgmised lähendid leitakse

$$x^{m+1} = x^m - (F'(x^m))^{-1} F(x^m), \quad m = 0, 1, \dots, \qquad (2)$$

kus

$$F'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix},$$

eeskirjas (2) $(F'(x^m))^{-1}$ on pöördmaatriks. Seejuures üleminekusamm (2) on samaväärne lineaarse süsteemi

$$F'(x^m)\, x^{m+1} = F'(x^m)\, x^m - F(x^m)$$

lahendamisega (tundmatu on x^{m+1}, ülejäänu on teada). Meetodi samm on teostatav, kui eksisteerib $(F'(x^m))^{-1}$ ehk $\det F'(x^m) \neq 0$.

<u>Teoreem 1.</u> Olgu F pidevalt diferentseeruv süsteemi (1) lahendi x^* ümbruses ning eksisteerigu $(F'(x^*))^{-1}$. Siis Newtoni meetod on rakendatav x^* ümbruses ning meetod koondub lahendiks x^* kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist kui alglähend x^0 valida x^* küllalt väikesest ümbrusest.

<u>Teoreem 2.</u> Kui lisaks teoreemi 1 eeldustele

$$\|F'(x) - F'(y)\| \le L \, \|x - y\|$$

lahendi x^* ümbruses, siis

$$\|x^{m+1} - x^*\| \le \text{const} \, \|x^m - x^*\|^2.$$

Nagu näha, üldistavad need teoreemid otseselt võrrandite korral saadud tulemusi. Me neid teoreeme ei tõesta, sest tõestuste üldskeem on sama mis võrrandite korral, kuid kõigist detailidest täielikult arusaamiseks tuleb kasutada näiteks funktsionaalanalüüsi küllalt tõsiseid tulemusi. Märgime lisaks ainult niipalju, et teoreemis 2 toodud Lipschitzi tingimuse täidetuseks piisab, et $\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}$ on iga i, j, k korral pidevad lahendi x^* ümbruses.

§4. Lineaarsete võrrandisüsteemide lahendamine

1. Iteratsioonimeetodite vajalikkusest.

Vaatleme lineaarset süsteemi

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_n, \\ \dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases}$$

Kasutame tähiseid

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

siis võime süsteemi kirjutada kujul $Ax = b$.

Süsteem on üheselt lahenduv parajasti siis, kui $\det A \neq 0$. Kui $\det A = 0$, võivad lahendid puududa või on neid lõpmata palju.

Lineaaralgebrast on tuntud Krameri meetod ehk determinantide meetod, mis on rakendatav, kui $\det A \neq 0$. Laialt kasutatav on Gaussi ehk elimineerimismeetod, mille rakendamisel ei ole oluline kas $\det A \neq 0$ või $\det A = 0$.

Vaatame, kui palju on vaja tehteid elimineerimismeetodis. Loeme kokku korrutamised ja jagamised (need on pikad tehted), jättes arvestamata liitmised ja lahutamised (lühikesed tehted). Eeldame, et $\det A \neq 0$.

Algul jagatakse 1. võrrand arvuga a_{11}, milleks tehakse n jagamist: $\frac{a_{12}}{a_{11}}, \dots, \frac{a_{1n}}{a_{11}}, \frac{b_1}{a_{11}}$. Seejärel liidetakse 2. võrrandile $-a_{21}$ kordne uus 1. võrrand, 3. võrrandile $-a_{31}$ kordne uus 1. võrrand jne, milleks kulub $(n-1)n$ korrutamist. Nende tehete tulemusena on 1. veerg kujul $\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$, tehtud on n^2 korrutamist, jagamist. Edasi jätkatakse samamoodi ühe võrra väiksema dimensiooniga süsteemiga, mis on 2.–n. võrrandid. Korrates neid arvutusi, jõutakse olukorrani, mis peadiagonaalil on arvud 1 ja allpool arvud 0, tehtud on korrutamisi, jagamisi

$$n^2+(n-1)^2+\dots+1 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}.$$

Järgnevalt elimineeritakse ülalpool peadiagonaali olevad arvud, näiteks viimane veerg vajab $n-1$ korrutamist, sest korrutatakse ainult viimast vabaliiget sobivate arvudega. Peadiagonaalist ülalpool asuvate arvude elimineerimine nõuab niisiis

$$(n-1)+(n-2)+\dots+1 = \frac{(n-1)n}{2}$$

korrutamist. Terve elimineerimismeetodi

tehete arv on kokku

$$\frac{n(n+1)(2n+1)}{6} + \frac{(n-1)n}{2} \sim \frac{n^3}{3},$$

pidades silmas protsessi $n \to \infty$. Üldjuhtudes arvame märgi $\sim$ tähendab siin, et mõlema poole jagatis koondub arvuks 1 protsessis $n \to \infty$, selle kohta öeldakse, et tehete järk on $\frac{n^3}{3}$.

Vaatame veel tehete arvu ~~diminantsi~~ determinantide ~~...~~meetodis, milles tuleb arvutada $n+1$ determinanti ja n nende jagatist. Iga determinandi võib arvutada, teisendades selles oleva maatriksi kolmnurksele kujule ja võttes seejärel peadiagonaalil olevate elementide korrutise. Sellisel juhul iga determinandi kohta $\sim \frac{n^3}{3}$ tehet, kokku meetodis $\sim \frac{n^4}{3}$ tehet.

Märgime, et n järku determinandi arvutamine näiteks rea elementide ja üle ~~...~~ võrra madalamat järku determinantide kaudu vajab vähemalt $n!$ korrutamist. Kuid näiteks $30! > 10^{30}$, mis tähendab, et sellist arvutusviisi ei saa kasutada vähegi suuremate süsteemide korral.

Iteratsioonimeetodi samm nõuab tavaliselt maatriksi rakendamist vektorile, mis vajab n-mõõtmelise süsteemi puhul n^2 korrutamist. Kui näiteks $n = 1000$ (see ei ole praktikas suur süsteem), mis iteratsiooni-meetod, mis koondub mõnekümne sammuga, on tunduvalt kiirem kui Gaussi meetod.

Lisaks arvutuste mahu võimalikule eelisele iteratsioonimeetodites on veel teine ~~põhjus~~ oluline põhjus, miks on vaja iteratsiooni-meetodeid lineaarsete süsteemide lahendamisel. See on ümardamisvigade olemasolu, mis on näiteks arvuti kasutamisel vältimatu. Gaussi ja eriti Krameri meetod on ümardamisvigade suhtes tundlikud, iteratsioonimeetodid aga protsessi käigus likvideerivad varasematel sammudel tehtud ümardamisvigade mõju, sest ei ole midagi katki, kui ümardamisvigade pärast tehakse üks iteratsioonisamm rohkem kui tehtaks ilma ümardamisvigadeta.

2. Harilik iteratsioonimeetod, koonduvustingimused.

Vaatleme süsteemi

$$\begin{cases} x_1 = b_{11}x_1 + \ldots + b_{1n}x_n + b_1, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_n = b_{n1}x_1 + \ldots + b_{nn}x_n + b_n \end{cases}$$

ehk $x = Bx + b$, kus $x = (x_j)$, $B = (b_{ij})$, $b = (b_i)$ on vastavad vektorid ja maatriks sarnaselt eelmises punktis kasutatutega. Harilik iteratsioonimeetod nõuab ühte alglähendit x^0, edasi leitakse

$$x^{m+1} = Bx^m + b, \quad m = 0, 1, \dots .$$

Harilik iteratsioonimeetod lineaarse süsteemi lahendamisel on erijuht eespool vaadeldud üldisemast, kus siin on $G(x) = Bx + b$. Teame piisavat tingimust koondumiseks: mingi $q < 1$ korral $\|G(x) - G(y)\| \le q \|x - y\| \ \forall x, y \in \mathbb{R}^n, x \ne y$. Siin

$G(x) - G(y) = Bx + b - (By + b) = B(x - y)$, seega

$$\|G(x) - G(y)\| \le q \|x - y\| \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n \Leftrightarrow$$

$$\|B(x - y)\| \le q \|x - y\| \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n \Leftrightarrow$$

$$\|Bx\| \le q \|x\| \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \Leftrightarrow$$

$$\|B\| \le q,$$

kusjuures viimane samaväärsus on elementaartulemus funktsionaalanalüüsis. Sellega oleme saanud järgmise tulemuse.

<u>Lause</u>. Kui $\|B\| < 1$, siis harilik iteratsioonimeetod koondub iga alglähendi korral süsteemi $x = Bx + b$ ainsaks lahendiks.

Me näitame eespool, kuidas leida konkreetsete mõnede $\mathbb{R}^n$ normidele vastavaid maatriksite norme. Seda arvestades oleme saanud, et kehtib

Teoreem. Kui $\max\limits_{1\le i\le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |b_{ij}| < 1$ või

$\max\limits_{1\le j\le n} \sum\limits_{i=1}^{n} |b_{ij}| < 1$ või $\sum\limits_{i,j=1}^{n} b_{ij}^2 < 1$, siis

harilik iteratsioonimeetod koondub iga alglähendi korral süsteemi $x = Bx + b$ ainsaks lahendiks.

Juhime tähelepanu sellele, et esitatud tingimustest järeldub süsteemi ühene lahenduvus.

Vaatleme $n\times n$ maatriksit A. Arvu $\lambda \in \mathbb{C}$ nimetatakse maatriksi A omaväärtuseks, kui on olemas vektor $x \neq 0$ nii, et $Ax = \lambda x$. Lineaaralgebrale tuginedes on vahetult kontrollitav, et λ on A omaväärtus parajasti siis, kui $\det(A-\lambda I) = 0$ ehk

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & \dots & a_{2n} \\ \dots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Niisugune võrrand on maatriksi A karakteristlik võrrand, ~~tema~~ aste on n ja arvestades kordsusi, on tal kui algebralisel võrrandil täpselt n lahendit. Maatriksi A kõigi omaväärtuste hulka nimetatakse spektriks ja tähistatakse $\sigma(A)$.

<u>Teoreem</u>. Harilik iteratsioonimeetod süsteemi $x = Bx + b$ lahendamisel koondub süsteemi ainsaks lahendiks iga alglähendi korral parajasti siis, kui B kõik omaväärtused on mooduli poolest väiksemad arvust 1 $(\lambda \in \sigma(B) \Rightarrow |\lambda| < 1)$.

Geomeetriliselt tähendab see tarvilik ja piisav tingimus, et maatriksi B spekter asub kompleksitasandi ühikringi sees.

Teoreemi tõestust me siin ei esita, see toetub maatriksite teooria fundamentaalsetele tulemustele, näiteks võib kasutada maatriksi Jordani või Schuri normaalkuju.

<u>Ülesanne</u>. Veenduda, et kui $\|B\| < 1$, siis $|\lambda| < 1$ iga $\lambda \in \sigma(B)$ korral.

Niisiis seob ülesandes toodud väide loomulikul viisil kahes teoreemis esitatud tingimused.

Kuigi on olemas tarvilik ja piisav tingimus hariliku iteratsioonimeetodi koonduvuse kindlakstegemiseks, ei ole see praktikas kuigi efektiivne, sest maatriksi omaväärtuste leidmise ülesanne on oluliselt raskem kui lineaarse süsteemi lahendamise ülesanne. Seepärast on praktikas tähtsad esimeses teoreemis toodud piisavad tingimused.

3. Jacobi meetod.

Vaatleme süsteemi $Ax=b$. Tähistame siin maatriksi A (pea)diagonaali elemente sisaldava maatriksi $D=\begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn}\end{pmatrix}$ ning $R=A-D$ ehk siis $A=D+R$. Süsteemi $Ax=b$ kirjutame samaväärselt $(D+R)x=b$ ehk $Dx=-Rx+b$.

Eeldame, et maatriksi A (pea)diagonaal on selline, et $a_{ii}\neq 0$, $i=1,\dots,n$. Siis $D^{-1}=\begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn}^{-1}\end{pmatrix}$, sest vahetu arvutamine annab $DD^{-1}=I$. Seega on $Ax=b$ esitatav samaväärselt $x=-D^{-1}Rx+D^{-1}b$. Rakendame saadud süsteemile harilikku iteratsioonimeetodit

$$x^{m+1}=-D^{-1}Rx^{m}+D^{-1}b.$$

Sellist kaheosalist protseduuri (diagonaali avaldamine + harilik iteratsioonimeetod) nimetatakse Jacobi meetodiks süsteemi $Ax=b$ lahendamisel.

Nõmandite kaupa tähendab diagonaali avaldamine, et süsteem

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j=b_i,\quad i=1,\dots,n,$$

ehk

$$a_{ii}x_i+\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j=b_i,\quad i=1,\dots,n,$$

viiakse kujule

$$x_i = \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \left(-\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right) x_j + \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad i=1,\dots,n,$$

ehk $x = Bx + D^{-1}b$, kus maatriksi $B=(b_{ij})$ elemendid avalduvad $b_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, j\neq i, b_{ii}=0$.

Esitame mõned mõisted.

Öeldakse, et maatriksi A (pea)diagonaal domineerib ridade kaupa, kui

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \quad i=1,\dots,n.$$

Selline domineerimine tähendab, et diagonaalielemendid on absoluutväärtuselt suuremad kui ülejäänud samas reas paiknevate elementide absoluutväärtused summaarselt. See nõue peab olema täidetud iga rea korral. Märgime, et mõnikord saab sellist olukorda saavutada, muutes võrrandite järjekorda süsteemis.

Öeldakse, et maatriksi A (pea)diagonaal domineerib veergude kaupa, kui

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ji}|, \quad i=1,\dots,n.$$

Siin tähendab see nõue, et diagonaalielementide absoluutväärtused on suuremad kui ülejäänud samas veerus paiknevate elementide absoluutväärtuste summa. Mõnikord saab sellist olukorda saavutada, muutes tundmatute järjekorda süsteemis.

Kui maatriksi A diagonaal domineerib ridade või veergude kaupa, siis $a_{ii} \neq 0, i=1,\dots,n$, seega Jacobi meetod on süsteemile $Ax=b$ rakendatav.

Olgu maatriksi A diagonaal domineeriv ridade kaupa. Siis peale diagonaali avaldamist saadava süsteemi maatriksi B korral

$$\|B\|_{\infty\to\infty} = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |b_{ij}| = \max_{1\le i\le n} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} =$$

$$= \max_{1\le i\le n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < \max_{1\le i\le n} \frac{|a_{ii}|}{|a_{ii}|} = 1 .$$

Niisiis, kui A diagonaal domineerib ridade kaupa, siis Jacobi meetod koondub. Sel juhul tingimus $\|B\|_{\infty\to\infty} < 1$ tagab ka, et süsteemil on parajasti üks lahend ehk $\det A \neq 0$.

<u>Ülesanne</u>. Tõestada ilma iteratsioonimeetodi teooriat kasutamata, et kui A diagonaal domineerib ridade kaupa, siis $\det A \neq 0$.

Mida võib öelda, kui A diagonaal domineerib veergude kaupa?

Kui A diagonaal domineerib veergude kaupa, siis transponeeritud maatriksi A^T diagonaal domineerib ridade kaupa ning seega $\det A^T \neq 0$. Kuid $\det A^T = \det A$, seega $\det A \neq 0$.

Näide. Olgu $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$, siis diagonaal domineerib veergude kaupa. Diagonaali avaldamine viib maatriksini $B = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Hindame selle maatriksi normi, kasutades ruumis $\mathbb{R}^2$ traditsiooniliselt varem vaadeldud p-norme, $1 \leq p \leq \infty$. Olgu $\bar{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, siis $\|\bar{x}\|_p = 1$, $1 \leq p \leq \infty$. Üheselt leiame, et $B\bar{x} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$ ja $\|B\bar{x}\|_p = 2$ iga p-normi korral. Saame

$$\|B\|_{p\to p} = \sup_{\|x\|_p \leq 1} \|Bx\|_p \geq \|B\bar{x}\|_p = 2.$$

Sellega oleme näidanud, et diagonaali domineerimine veergude kaupa maatriksis A ei luba väita, et mingi p-normi korral $\|B\|_{p\to p} < 1$.

Hoiatus: me ei väida, et üldse ei leidu sellist normi ruumis $\mathbb{R}^2$, millele vastavalt $\|B\| < 1$.

Ülesanne. Tõestada, et kui maatriksi A diagonaal domineerib veergude kaupa, siis peale diagonaali avaldamist saadava maatriksi $B = -D^{-1}R$ kõik omaväärtused on mooduli poolest väiksemad ühest ($\lambda \in \sigma(B) \Rightarrow |\lambda| < 1$). Soovitus: tõestada, et kui

$|\lambda| \geq 1$ ja veel $\lambda \in \sigma(B)$, siis $\det(\lambda D + R) = 0$, mis ei ole võimalik A diagonaali domineerimise korral.

Ülesande põhjal võib öelda, et kui maatriksi A diagonaal domineerib veergude kaupa, siis Jacobi meetod koondub.

4. Seideli meetod.

Vaatleme süsteemi $x = Bx + b$, mis võrrandite kaupa oli esitatud punktis 2. Seideli meetodis valitakse alglähend $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ja üleminek lähendilt $x^m = (x_1^m, \dots, x_n^m)$ lähendile $x^{m+1} = (x_1^{m+1}, \dots, x_n^{m+1})$ toimub järgmiselt:

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = b_{11} x_1^m + b_{12} x_2^m + \dots + b_{1n} x_n^m + b_1, \\ x_2^{m+1} = b_{21} x_1^{m+1} + b_{22} x_2^m + \dots + b_{2n} x_n^m + b_2, \\ \dots \\ x_n^{m+1} = b_{n1} x_1^{m+1} + \dots + b_{n,n-1} x_{n-1}^{m+1} + b_{nn} x_n^m + b_n. \end{cases}$$

Olgu $B = L + D + U$, kus D on maatriksi A diagonaalist saadud nagu punktis 3,

$$L = \begin{pmatrix} 0 & \dots & & 0 \\ b_{21} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & \\ b_{n1} & \dots & b_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ 0 & 0 & \dots & b_{2n} \\ \dots & & & \\ 0 & \dots & & 0 \end{pmatrix}$$

(maatriksis L on A diagonaali all olevad elemendid, maatriksis U on A diagonaali peal olevad elemendid). Siis võib Seideli meetodi esitada

$$x^{m+1} = L x^{m+1} + (D+U) x^m + b$$

ehk

$$(I-L) x^{m+1} = (D+U) x^m + b.$$

Seejuures $\det(I-L) = \det \begin{pmatrix} 1 & 0 \ldots 0 \\ (-b_{ij}) & 1 \end{pmatrix} = 1$, seega eksisteerib $(I-L)^{-1}$. Seideli meetodi samm on seega kirjutatav

$$x^{m+1} = (I-L)^{-1}(D+U) x^m + (I-L)^{-1} b$$

ehk Seideli meetod on vaadeldav hariliku iteratsioonimeetodina teisendatud süsteemi $x = (I-L)^{-1}(D+U)x + (I-L)^{-1} b$ lahendamiseks. Meil on olemas tarvilik ja piisav tingimus hariliku iteratsioonimeetodi koondumiseks süsteemi ainsaks lahendiks, mille kasutamine annab siin, et Seideli meetod koondub parajasti siis, kui võrrandi

$$\det\left((I-L)^{-1}(D+U) - \lambda I\right) = 0$$

lahendid on moodulilt väiksemad arvust 1.

Seejuures

$$\det\left((I-L)^{-1}(D+U) - \lambda I\right) = 0 \Leftrightarrow \det\left(D+U-\lambda(I-L)\right) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \det(\lambda L + D + U - \lambda I) = 0.$$

Sellega on tõestatud järgmine

Teoreem. Seideli meetod süsteemi $x=Bx+b$ lahendamisel koondub parajasti siis, kui võrrandi $\det(\lambda L+D+U-\lambda I)=0$ kõik lahendid on ühest väiksema mooduliga (eeldatakse, et $B=L+D+U$).

Teoreemis esitatud võrrand on

$$\begin{vmatrix} b_{11}-\lambda & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ \lambda b_{21} & b_{22}-\lambda & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda b_{n1} & \dots & \lambda b_{n,n-1} & b_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Meenutame, et hariliku iteratsioonimeetodi käsitlemise juures oli nõue karakteristliku võrrandi

$$\begin{vmatrix} b_{11}-\lambda & \dots & b_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & \dots & b_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

lahenditele. Neid tingimusi silmas pidades saame vastata küsimusele hariliku iteratsioonimeetodi ja Seideli meetodi koonduvuspiirkondade vahekorra kohta.

Ülesanne. Näidata, et kui süsteemis $x=Bx+b$ võtta 2×2 maatriksiks B

1) $B=\begin{pmatrix} 2 & -1.5 \\ 1.5 & -1 \end{pmatrix}$, siis harilik iteratsioonimeetod koondub, Seideli meetod mitte;

2) $B=\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ 1 & -0.1 \end{pmatrix}$, siis Seideli meetod koondub, harilik iteratsioonimeetod mitte.

Nagu harilikus iteratsioonimeetodi korral on ka Seideli meetodi jaoks vaja vahetult kontrollitavaid tingimusi, mis ei nõua karakteristliku võrrandi taolise võrrandi lahendamist. Anname need järgmise tulemusega.

Teoreem. Kui $\max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{n}|b_{ij}|<1$ või $\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|b_{ij}|<1$, siis Seideli meetod koondub.

Tõestuseks märgime, et esimene tingimus annab $\|B\|_{\infty\to\infty}<1$, mis tähendab, et $G(x)=Bx+b$ on ahendav ∞-normis ruumis $\mathbb{R}^n$ ja võib rakendada üldiste mittelineaarsete süsteemide juhul esitatud koonduvusteoreemi. Teise tingimuse kohta olgu sõnastatud

Ülesanne. Tõestada, et kui $\max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{n}|b_{ij}|<1$, siis arv λ, kus $|\lambda|\ge 1$, ei saa olla võrrandi $\det(\lambda L+D+U-\lambda I)=0$ lahend. Soovitus: näidata, et kui $|\lambda|\ge 1$, siis maatriksi $(\lambda L+D+U-\lambda I)$ diagonaal domineerib veergude kaupa.

5. Gauss-Seideli meetod.

Vaatleme võrrandisüsteemi $Ax=b$. Gauss-Seideli meetod on maatriksi A diagonaali avaldamine koos selliselt saadud süsteemi lahendamisega Seideli meetodiga.

Esitame maatriksi A kujul $A = R_L + D + R_U$, kus diagonaalmaatriksil D on sama tähendus, mis varemgi, R_L ja R_U on vastavalt diagonaali all ja peal paiknevatest elementidest koosnevad osad. Eeldame, et $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n$, siis on olemas D^{-1}. Süsteemi $Ax = b$ võime teisendada

$$Ax = b \Leftrightarrow (R_L + D + R_U)x = b \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow Dx = -R_L x - R_U x + b \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow x = -D^{-1}R_L x - D^{-1}R_U x + D^{-1}b.$$

Vahetu kontrolliga võib veenduda, et diagonaalmaatriksiga D^{-1} korrutamine ei muuda maatriksite $-R_L$ ja $-R_U$ kuju (ei tekita uusi nullist erinevaid elemente), seepärast on maatriksites $-D^{-1}R_L$ ja $-D^{-1}R_U$ võimalikud nullist erinevad elemendid vastavalt diagonaali all ja peal. Viimasena saadud süsteemile Seideli meetodi rakendamine toimub eeskirjaga

$$x^{m+1} = -D^{-1}R_L x^{m+1} - D^{-1}R_U x^m + D^{-1}b, \; m = 0, 1, \dots,$$

alates alglähendist x^0.

<u>Ülesanne</u>. Veenduda, et vaadeldud iteratsioonimeetodi sammu saab kirjutada kujul

$$x^{m+1} = -(I + D^{-1}R_L)^{-1}D^{-1}R_U x^m + (I + D^{-1}R_L)^{-1}D^{-1}b$$

või
$$x^{m+1} = -(D+R_L)^{-1} R_U x^m + (D+R_L)^{-1} b .$$

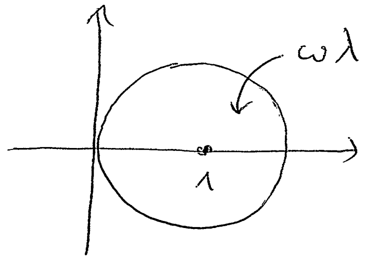
<u>Ülesanne.</u> Tõestada, et kui maatriks A diagonaal domineerib ridade või veergude kaupa, siis Gauss-Seideli meetod koondub.

6. Richardsoni meetod.

Vaatleme antud süsteemi $Ax = b$. Richardsoni meetodil leitakse algalähendist x^0 lähtudes järgmised lähendid
$$x^{m+1} = x^m - \omega (A x^m - b), \quad m = 0, 1, \dots,$$
kus $\omega \in \mathbb{C}$, $\omega \neq 0$, on fikseeritud. Seda meetodit võib vaadelda kui harilikku iteratsioonimeetodit, mida on rakendatud süsteemile
$$x = (I - \omega A) x + \omega b .$$
Teame, et koonduvus sõltub ainult maatriksist $B = I - \omega A$, tarvilik ja piisav on, et $\lambda \in \sigma(B)$ korral oleks $|\lambda| < 1$.

Paneme tähele, et
$$\lambda \in \sigma(A) \Leftrightarrow \exists x \neq 0 : Ax = \lambda x \Leftrightarrow \exists x \neq 0 : -\omega A x = -\omega \lambda x \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \exists x \neq 0 : x - \omega A x = x - \omega \lambda x \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \exists x \neq 0 : (I - \omega A) x = (1 - \omega \lambda) x .$$
Seega $\lambda \in \sigma(A)$ parajasti siis, kui $1 - \omega\lambda \in \sigma(B)$.
Niisiis, Richardsoni meetod koondub parajasti siis, kui $|1 - \omega\lambda| < 1$ ehk $|\omega\lambda - 1| < 1$ iga $\lambda \in \sigma(A)$ korral.

Hulk $\{z\in\mathbb{C} \mid |z-1|<1\}$ on ring keskpunktiga 1 ja raadiusega 1 ning tarvilik ja piisav tingimus ütleb, et kõik arvud $\omega\lambda$, $\lambda\in\sigma(A)$, peavad asuma selle ringi sees.



Loomulik on küsida, kas saab (või millal saab) leida $\omega\in\mathbb{C}$ nii, et $|\omega\lambda-1|<1$ iga $\lambda\in\sigma(A)$ korral? Et $\omega\neq 0$, siis

$$|\omega\lambda-1|<1 \Leftrightarrow \left|\lambda-\frac{1}{\omega}\right|<\frac{1}{|\omega|}$$

ning koondumise tarvilik ja piisav tingimus on, et leidub $\omega\in\mathbb{C}$ nii, et

$$\sigma(A)\subset\left\{\lambda\in\mathbb{C} \;\middle|\; \left|\lambda-\frac{1}{\omega}\right|<\frac{1}{|\omega|}\right\},$$

mis on ring keskpunktiga $\frac{1}{\omega}$, raadiusega $\frac{1}{|\omega|}$ ja seega läbib punkti 0 selle ringi rajajoon. Et $\frac{1}{\omega}$ võib olla suvaline nullist erinev kompleksarv, oleme saanud tulemuse.

<u>Lause</u>. Richardsoni meetodi koondumiseks sobiv arv $\omega\in\mathbb{C}$, $\omega\neq 0$, on olemas parajasti siis, kui maatriksi A kõik omaväärtused asuvad mingisuguse punkti 0 läbiva ringjoone sees.

Järeldus 1. Kui $\sigma(A) \subset (0,\infty)$, siis leidub ω nii, et Richardsoni meetod koondub. Nimelt arv ω on selline, et $0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{max}}$, kus λ_{max} on maatriksi A suurim omaväärtus.

Tõestus. Olgu $\sigma(A) \subset (0,\infty)$. Kui võtame ω nii, et $0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{max}}$, ja $\lambda \in \sigma(A)$, siis

$0 < \omega\lambda < \frac{2\lambda}{\lambda_{max}} \le 2$, s.t. $0 < \omega\lambda < 2$ ehk

$-1 < \omega\lambda - 1 < 1$, siga sellest järeldub, et $|\omega\lambda - 1| < 1$.

Järeldus 2. Kui $\sigma(A) \subset (0,\infty)$ ja $0 < \omega < \frac{2}{\|A\|}$, siis Richardsoni meetod koondub.

Tõestus. Eespool simuleerelt kontrollisime asjaolu, et iga $\lambda \in \sigma(A)$ korral $|\lambda| \le \|A\|$. Tehtud eeldustel $\lambda > 0$ iga $\lambda \in \sigma(A)$ puhul ja seepärast $\frac{2}{\|A\|} \le \frac{2}{\lambda_{max}}$. Seega $0 < \omega < \frac{2}{\|A\|}$ korral $0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{max}}$ ja jääb kasutada Järeldust 1.

Järelduse 2 olulisus on selles, et maatriksi A omaväärtuste leidmine võib olla tunduvalt komplitseeritum kui tema normi hindamine.

Järeldus 3. Kui maatriks A on positiivselt määratud, siis leidub $\omega > 0$ nii, et Richardsoni meetod koondub.

Tõestus. Maatriksi A positiivne määratus tähendab, et $(Ax, x) > 0$ iga $x \neq 0$ korral. Siis aga $Ax=\lambda x$, $x\neq 0$ annab, et $(Ax,x)=\lambda(x,x)>0$, kusjuures $(x,x)>0$, millest saame, et $\lambda>0$ ehk $\sigma(A)\subset(0,\infty)$.

Vaatleme juhtu, kus süsteemi $Ax=b$ maatriksi A omaväärtused ei asu ühegi nullpunkti läbiva ringjoone sees, kuid A on regulaarne ($\det A\neq 0$). Siis võime lahendada samaväärset süsteemi $A^TAx=A^Tb$, kus A^T on transponeeritud maatriks. Süsteemide samaväärsus tuleb sellest, et $\det A^T=\det A\neq 0$ ja seepärast on A^T regulaarne ehk pööratav. Maatriks A^TA on positiivselt määratud, sest $x\neq 0$ korral $Ax\neq 0$ ja $(A^TAx,x)=(Ax,Ax)>0$. Järelduse 3 põhjal saab leida ω nii, et Richardsoni meetod

$$x^{m+1}=x^m-\omega(A^TAx^m-A^Tb)$$

koondub. Seejuures ei tarvitse korrutist A^TA välja arvutada (see nõuab n^3 tehet), vaid igal sammul võib leida Ax^m, seejärel $A^T(Ax^m)$, mis vajab igal sammul $2n^2$ korrutamist. Lisaks A^Tb leitakse ainult ühel korral, teda ei ole vaja igal sammul uuesti leida.

Laiaulatuslik uurimisvaldkond kaasajal on meetodid süsteemi $Ax=b$ lahendamiseks kujul

$$x^{m+1}=x^m-H_m(Ax^m-b),$$

kus M_m on $n \times n$ maatriksite jada. Nendest erijuhtudena vaatlesime siin Richardsoni meetodit, kus $M_m = \omega I$, ja valikut $M_m = \omega A^T$.

III Funktsioonide lähendamine

§1. Interpoleerimisülesanne

1. Ülesande püstitus.

Olgu antud reaalarvud $x_0, \dots, x_n$, kusjuures $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$, ja nendele vastavad arvud $f_0, \dots, f_n$. Võib olla, et $f_i = f(x_i)$ mingi funktsiooni f korral, kuid praktikas on arvud f_i mõõtmistulemused või katseandmed, mis väljendavad mingit reaalset sõltuvust mõõtmisvigade piires. Kui tekib vajadus funktsiooni väärtuste järele argumendi väärtustel, mis erinevad väärtustest $x_0, \dots, x_n$, siis toimitakse sageli järgnevalt: leitakse funktsioon φ nii, et $\varphi(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, n$, ning kasutatakse $\varphi(x)$, $x \neq x_i$. Funktsiooni φ nimetatakse interpolandiks, punkte $x_0, \dots, x_n$ interpolatsioonisõlmedeks, tingimusi $\varphi(x_i) = f_i$ interpolatsioonitingimusteks. Interpolantideks võetakse selliseid funktsioone, millega on lihtne opereerida, näiteks polünoomid, trigonomeetrilised polünoomid, ratsionaalfunktsioonid, splainid (vaadeldakse selliseid, mis on tükiti polünoomid). Interpoleeritava funktsiooni f kohta on tavaliselt teada, kas ta on pidev, mingi arv korda pidevalt diferentseeruv, analüütiline.

Üldisemas interpolatsiooniülesandes on vaja leida φ nii, et

$$\varphi^{(j)}(x_i) = f_{ij}, \quad i=0,\dots,n, \quad j=0,\dots,k_i,$$

kusjuures võib olla näiteks $f_{ij} = f^{(j)}(x_i)$ mingi üldiselt mitte teada oleva funktsiooni f korral. See on kordsete sõlmedega interpolatsiooniülesanne, arv k_i+1 on sõlme x_i kordsus. Kui ülesande seades tuletisi ei ole, on iga sõlm ühekordne.

2. Interpolandi olemasolu ja ühesus.

Vaatleme olukorda, kus interpolatsioonisõlmed $x_0,\dots,x_n$ on ühekordsed. Eeldame, et on antud nn. koordinaatfunktsioonid $\psi_0,\dots,\psi_m$ ning seame eesmärgiks leida interpolant $\varphi_m = c_0\psi_0+\dots+c_m\psi_m$, kus $c_0,\dots,c_m$ tuleb määrata interpolatsioonitingimustest. Seda võib nimetada lineaarseks interpolatsiooniülesandeks, sest interpolatsioonitingimused $\varphi_m(x_i)=f_i$, $i=0,\dots,n$, annavad lineaarse võrrandisüsteemi

$$c_0\psi_0(x_i)+\dots+c_m\psi_m(x_i) = f_i, \quad i=0,\dots,n,$$

kordajate c_i määramiseks. Süsteemi üheseks lahenduvuseks suvaliste arvude f_i korral on tarvilik, et $m=n$. Niisiis, vaatleme süsteemi

$$c_0\varphi_0(x_i)+\dots+c_n\varphi_n(x_i)=f_i,\quad i=0,\dots,n.$$

See süsteem on igasuguste arvude f_i, $i=0,\dots,n$, korral üheselt lahenduv parajasti siis, kui

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \dots & \varphi_n(x_0) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(x_n) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0.$$

Vaatleme juhtu, kus $\varphi_j(x)=x^j$, seega $\varphi_n(x)=c_0+c_1x+\dots+c_nx^n$. Sellisel juhul räägitakse interpolatsioonipolünoomist. Siis vastav determinant on Vandermonde'i determinant

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

$$= (x_n-x_0)\dots(x_n-x_{n-1})\cdot$$
$$\cdot(x_{n-1}-x_0)\dots(x_{n-1}-x_{n-2})\cdot$$
$$\dots\dots$$
$$\cdot(x_1-x_0)\neq 0.$$

Sellega on tõestatud järgmine

<u>Lause</u>. Suvaliste arvude $f_0,\dots,f_n$ korral leidub parajasti üks polünoom $P_n(x)=c_0+c_1x+\dots+c_nx^n$ nii, et $P_n(x_i)=f_i$, $i=0,\dots,n$.

Järgnevas vaatame võimalusi interpolatsioonipolünoomi leidmiseks. Ühe võimaluse annab

<u>Ülesanne</u>. Olgu antud $x_0, \dots, x_n$, $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$, ja $f_0, \dots, f_n$. Olgu $P_{i,\dots,i+k}$ polünoom, mille aste ei ületa arvu k, ja $P_{i,\dots,i+k}(x_j) = f_j$, $j = i, \dots, i+k$. Tõestada, et

$$P_{i,\dots,i+k}(x) = \frac{(x - x_i)P_{i+1,\dots,i+k}(x) + (x_{i+k} - x)P_{i,\dots,i+k-1}(x)}{x_{i+k} - x_i},$$

kui $P_j(x) = f_j$ iga x ja iga j korral.

Ülesandele tugineb Neville'i skeem või algoritm Lauses väljendatud interpolatsioonipolünoomi leidmiseks:

$$\begin{array}{lllll}
P_0(x) = f_0 & \searrow & & & \\
 & & P_{01}(x) & \searrow & \\
P_1(x) = f_1 & \nearrow & & & P_{012}(x) \\
 & \searrow & & \nearrow & \\
P_2(x) = f_2 & \rightarrow & P_{12}(x) & & \quad \cdots \\
\cdots & & & & \qquad P_{0\dots n}(x) \\
P_{n-1}(x) = f_{n-1} & \searrow & & & \quad \cdots \\
P_n(x) = f_n & \rightarrow & P_{n-1,n}(x) & &
\end{array}$$

3. Lagrange'i fundamentaalpolünoomid.

Olgu antud $x_0, \dots, x_n$, $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$. Fikseerime $i \in \{0, \dots, n\}$. Eelnevast teame, et leidub parajasti üks ülimalt n astme polünoom l_{ni}

nii, et

$$l_{ni}(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \in \{0, \dots, n\} \setminus \{i\}, \end{cases}$$

ehk $l_{ni}(x_j) = \delta_{ij}$. Et $x_0, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$ on polünoomi l_{ni} nullkohad, siis

$$l_{ni}(x) = a_i (x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n),$$

kusjuures a_i on konstant, sest muidu ta oleks astmelt või kõrgema astme polünoom, ületaks l_{ni} aste n. Peale nullkohtade tingimuse kehtib veel $l_{ni}(x_i) = 1$ ehk

$$a_i (x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n) = 1,$$

millest

$$l_{ni}(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}$$

või

$$l_{ni}(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

<u>Ülesanne</u>. Olgu $\omega_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n)$. Näidata, et $l_{ni}(x) = \dfrac{\omega_n(x)}{(x - x_i)\,\omega_n'(x_i)}$.

Polünoome l_{ni}, $i = 0, \dots, n$, nimetatakse Lagrange'i fundamentaalpolünoomideks. Need on sõlmede $x_0, \dots, x_n$ poolt üheselt määratud ja seepärast saab neid nimetada sõlmedele $x_0, \dots, x_n$ vastavateks Lagrange'i fundamentaalpolünoomideks.

<u>Ülesanne</u>. Tõestada, et l_{ni}, $i = 0, \dots, n$, on lineaarselt sõltumatud.

4. Lagrange'i interpolatsioonivalem.

Olgu antud sõlmed $x_0, \dots, x_n$, $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$, ja vastavad arvud $f_0, \dots, f_n$. Näitame, et siis polünoom

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i l_{ni}(x) = f_0 l_{n0}(x) + \dots + f_n l_{nn}(x)$$

on interpolatsioonipolünoom, mis rahuldab interpolatsioonitingimusi $P_n(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, n$.

Põhjenduseks märgime kõigepealt, et kuna l_{ni} on n astme polünoomid, siis nende lineaarse kombinatsiooni P_n aste ei ületa n. Peale selle,

$$P_n(x_j) = \sum_{i=0}^{n} f_i l_{ni}(x_j) = f_j, \quad j = 0, \dots, n,$$

võrduse $l_{ni}(x_j) = \delta_{ij}$ tõttu.

Kasutades varemtoodud l_{ni} avaldisi võime kirjutada

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \sum_{i=0}^{n} f_i \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i)\, \omega_n'(x_i)}.$$

Seda valemit nimetatakse Lagrange'i interpolatsioonivalemiks.

Täiendused. 1) Interpolatsioonipolünoom ei muutu, kui muudame Lagrange'i interpolatsioonivalemis sõlmede järjekorda.

Märgime põhjenduseks, et kui muuta sõlmede järjekorda, siis Lagrange'i valemis muutub liidetavate järjekord, liidetavad ise ei muutu, näiteks liidetav $f_i \frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\,\omega_n'(x_i)}$ on määratud sõlmede komplekti $x_0, \ldots, x_n$ ja indeksiga i, sest ω_n ei muutu sõlmede järjekorra muutmisel.

2) Lagrange'i fundamentaalpolünoomid $l_{n0}, \ldots, l_{nn}$ moodustavad baasi kõige ülemalt n astme polünoomide ruumis $\mathcal{P}_n$, sest $\dim \mathcal{P}_n = n+1$ ja Lagrange'i fundamentaalpolünoomid on lineaarselt sõltumatud. Iga $P \in \mathcal{P}_n$ korral

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} P(x_i)\, l_{ni}(x),$$

mis tuleneb sellest, et P ja $\sum_{i=0}^{n} P(x_i) l_{ni}$ rahuldavad võrdsed samu interpolatsioonitingimusi, nende aste ei ületa n, muid interpolatsioonipolünoom on üheselt määratud.

5. Diferentssuhted.

Olgu antud argumendi väärtused $x_0, \ldots, x_n$, $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$, ja $f(x_0), \ldots, f(x_n)$. Defineerime 1. järku diferentssuhted

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}, \quad i \neq j.$$

Funktsiooni väärtusi $f(x_i)$ nimetatakse 0. järku diferentssuhteks. Teist järku diferentssuhte defineerime

$$f(x_i, x_j, x_k) = \frac{f(x_j, x_k) - f(x_i, x_j)}{x_k - x_i}, \quad i \neq j,\ j \neq k,\ k \neq i.$$

Üldisemalt, k. järku diferentssuhte määrame võrdusega

$$f(x_{i_0}, x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}) = \frac{f(x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}) - f(x_{i_0}, \ldots, x_{i_{k-1}})}{x_{i_k} - x_{i_0}}.$$

__Märkus.__ Ei ole oluline, et andmetes $f(x_i)$ oleks mingi antud funktsiooni f väärtused, võivad olla antud lihtsalt arvud $f_0, \ldots, f_n$. (Antud arvude $f_0, \ldots, f_n$ korral on alati olemas mingisugune funktsioon f nii, et $f_i = f(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$). Kõrvuti ülaltoodud tähistega diferentssuhete jaoks kasutatakse veel tähiseid f_{ij}, f_{ijk}, $f_{0\ldots k}$.

__Lause.__ Kehtib võrdus

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)} =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (x_i - x_j)} = \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{\omega_n'(x_i)}. \qquad (1)$$

<u>Tõestus</u>. Võrdus (1) on kirjutatud ülevaatlikkuse huvides sõlmede $x_0, \ldots, x_n$ jaoks, ta kehtib muidugi suvalise ~~komplekti~~ paarikaupa mittevõrdsete sõlmede komplekti korral.

Tõestame võrduse (1) induktsiooniga sõlmede arvu järgi.

Kui $n = 1$, siis

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}.$$

Eeldame, et võrdus (1) kehtib k sõlme korral, ja näitame ~~siis~~, et (1) kehtib ka $k+1$ sõlme korral. Definitsiooni ja eeldust kasutades saame

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_k) = \frac{f(x_1, \ldots, x_k) - f(x_0, \ldots, x_{k-1})}{x_k - x_0} =$$

$$= \frac{1}{x_k - x_0} \left(\frac{f(x_1)}{\prod_{j=2}^{k} (x_1 - x_j)} + \ldots + \frac{f(x_k)}{\prod_{j=1}^{k-1} (x_k - x_j)} - \right.$$

$$\left. - \frac{f(x_0)}{\prod_{j=1}^{k-1} (x_0 - x_j)} - \ldots - \frac{f(x_{k-1})}{\prod_{j=0}^{k-2} (x_{k-1} - x_j)} \right).$$

Näeme, et $f(x_0)$ ja $f(x_k)$ kordajad tulevad õiged. Olgu $i \in \{1, \ldots, k-1\}$. Siis $f(x_i)$ sisaldavad liikmed annavad

$$\frac{1}{x_k - x_0}\left(\frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{k}(x_i-x_j)} - \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{k-1}(x_i-x_j)}\right) =$$

$$= \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{k-1}(x_i-x_j)}\cdot\frac{1}{x_k-x_0}\left(\frac{1}{x_i-x_k}-\frac{1}{x_i-x_0}\right)=$$

$$= \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{k}(x_i-x_j)}.$$

Järeldused. 1) $(f_1+f_2)(x_0,\dots,x_n) = f_1(x_0,\dots,x_n)+f_2(x_0,\dots,x_n)$,

2) $(cf)(x_0,\dots,x_n) = c\,f(x_0,\dots,x_n)$,

3) diferentssuhe on sümmeetriline argumentide suhtes.

Esimesed kaks järeldust tähendavad, et diferentssuhte võtmine on lineaarne (aditiivne ja homogeenne) funktsiooni suhtes, millest suhe võetakse. Kolmanda järelduse põhjenduseks märgime, et kui muuta sõlmede järjekorda diferentssuhtes, siis muutub liidetavate järjekord võrduse (1) paremas pooles, aga mitte summa.

6. Newtoni interpolatsioonivalem.

Olgu antud sõlmed $x_0, \dots, x_n$ ja vastavad arvud $f(x_0), \dots, f(x_n)$.

Lause. Interpolatsioonitingimusi $P_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, rahuldav ülimalt n astme polünoom avaldub

$$P_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \dots +$$
$$+ f(x_0, \dots, x_n)(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}).$$

Tõestus. On selge, et P_n aste ei ületa n, seepärast on vaja tõestada ainult interpolatsioonitingimuste täidetust. Tõestame need induktsiooniga n järgi.

Kui $n = 0$, siis $P_0(x) = f(x_0)$ iga x korral, seepärast $P_0(x_0) = f(x_0)$. Eeldame, et väidetud polünoomi esitus kehtib $n-1$ korral, s.t.
$P_{n-1}(x) = f(x_0) + \dots + f(x_0, \dots, x_{n-1})(x - x_0)\dots(x - x_{n-2})$
korral $P_{n-1}(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n-1$. Vaatleme polünoomi $P_n(x) = P_{n-1}(x) + f(x_0, \dots, x_n)(x - x_0)\dots(x - x_{n-1})$.
Siis $P_n(x_i) = P_{n-1}(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n-1$. Lisaks

$$P_n(x_n) = P_{n-1}(x_n) + (x_n - x_0)\dots(x_n - x_{n-1}) \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (x_i - x_j)} =$$

$$= P_{n-1}(x_n) + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(x_n-x_0)\dots(x_n-x_i)\dots(x_n-x_{n-1})}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x_i-x_j)} f(x_i) +$$

$$+ \frac{(x_n-x_0)\dots(x_n-x_{n-1})}{(x_n-x_0)\dots(x_n-x_{n-1})} f(x_n) = f(x_n),$$

sest $\dfrac{(x_n-x_0)\dots(x_n-x_i)\dots(x_n-x_{n-1})}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x_i-x_j)} = -\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n-1}\dfrac{x_n-x_j}{x_i-x_j} = -l_{n-1,i}(x_n)$

ja Lagrange'i valemi põhjal $-\sum\limits_{i=0}^{n-1} l_{n-1,i}(x_n) f(x_i) = -P_{n-1}(x_n)$.

Newtoni interpolatsioonivalemis kasutatavate diferentssuhete arvutamine toimub kolmnurkse skeemi abil

$$\begin{array}{lllll}
x_0 & f(x_0) & & & \\
 & & f(x_0,x_1) & & \\
x_1 & f(x_1) & & f(x_0,x_1,x_2) & \dots \\
 & & f(x_1,x_2) & & \\
x_2 & f(x_2) & & & \\
\vdots & & & & f(x_0,x_1,\dots,x_n), \\
x_{n-1} & f(x_{n-1}) & & & \\
 & & f(x_{n-1},x_n) & \dots & \\
x_n & f(x_n) & & &
\end{array}$$

kusjuures interpolatsioonivalemis kasutatakse ainult iga veeru esimesi elemente.

<u>Ülesanne</u>. Leida, kui palju tuleb teha korrutamisi ja jagamisi, et arvutada Lagrange'i interpolatsioonivalemi abil $P_n(x)$, $x \neq x_i$, $i = 0, \dots, n$. Sama nõuanne Newtoni valemi korral.

7. Interpolatsioonivalemi jääkliige.

Tähistame $R_n(x) = f(x) - P_n(x)$, kus f on interpoleeritav funktsioon ja P_n interpolatsioonipolünoom. Niisiis, $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$, liidetavat R_n nimetatakse jääkliikmeks. Näeme, et $R_n(x_i) = f(x_i) - P_n(x_i) = 0$, $i = 0, \dots, n$. Ilma täiendavaid eeldusi tegemata ei saa jääkliikme kohta muud väita, ta on suvaline funktsioon mille väärtus sõlmedes on 0.

Eeldame, et $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$ ning $f \in C^{n+1}[a,b]$. Fikseerime $x \in [a,b]$, olgu esialgu $x \neq x_i$, $i = 0, \dots, n$. Vaatleme abifunktsiooni $\varphi(z) = f(z) - P_n(z) - K\omega_n(z) = R_n(z) - K\omega_n(z)$, kus K on konstant ja $\omega_n(z) = (z - x_0)\dots(z - x_n)$. On näha, et $\varphi(x_i) = 0$, $i = 0, \dots, n$, iga K korral. Olgu K selline, et $\varphi(x) = 0$, mis tähendab, et $R_n(x) - K\omega_n(x) = 0$ ehk $K = \frac{R_n(x)}{\omega_n(x)}$.

Funktsioonil φ on lõigus $[a,b]$ $n+2$ erinevat nullkohta $x_0, \dots, x_n, x$. Rolle'i teoreemi põhjal on funktsioonil φ' vahemikus (a,b) vähemalt $n+1$ erinevat nullkohta, need asuvad funktsiooni φ nullkohtade vahel. Analoogiliselt jätkates, funktsioonil φ'' on n erinevat nullkohta, kuni funktsioonil $\varphi^{(n+1)}$ on vahemikus (a,b) vähemalt üks nullkoht ξ, $\varphi^{(n+1)}(\xi)=0$. Diferentseerime funktsiooni φ $n+1$ korda, tulemusena $\varphi^{(n+1)}(z) = f^{(n+1)}(z) - K(n+1)!$, millest $\varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - \frac{R_n(x)}{\omega_n(x)}(n+1)! = 0$, ehk

$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_n(x)$. Muidugi peab tähele panema, et ξ sõltub valitud arvust x, s.t. ξ asemel on üksikasjalikum kirjutada $\xi(x)$. Kui $x = x_i$, siis $\omega_n(x)=0$ ja $R_n(x)=0$, mistõttu saadud $R_n(x)$ esitus leiab ikkagi aset, seepärast võib ξ võtta suvalise.

Võib küsida, kas funktsioon $x \to f^{(n+1)}(\xi(x))$ on pidev? Kas ta on mingi arv korda pidevalt diferentseeruv?

Ülesanne. Tõestada, et eksisteerib $\lim\limits_{x\to x_i} f^{(n+1)}(\xi(x))$.

Soovitus: kasutada L'Hospitali reeglit.

Ülesanne. Tõestada, et on olemas $\xi_i \in [a,b]$ nii, et $f^{(n+1)}(\xi_i) = \lim\limits_{x\to x_i} f^{(n+1)}(\xi(x))$.

Ülesanne. Tõestada, et funktsioon $x \to f^{(n+1)}(\xi(x))$ on pidevalt diferentseeruv.

Arvestades, et $f^{(n+1)}$ on pidev, on ta tõkestatud lõigus $[a,b]$. Olgu $M_{n+1} = \max\limits_{a\le x\le b}|f^{(n+1)}(x)|$.

Siis $|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_n(x)|$, see võimaldab hinnata interpoleerimise täpsust.

Ülesanne. Tõestada, et kui $f \in C^{n+1}[a,b]$ ja $x_i \to x_0$, $i = 1, \dots, n$, siis interpolatsioonivalemist saab piirväärtusena Taylori valemi:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}.$$

Olgu $x \neq x_i$, $i = 0, \dots, n$. Punktis 5 tõestatud valemit (1) kasutades saame

$$f(x, x_0, \dots, x_n) = \frac{f(x)}{(x-x_0)\dots(x-x_n)} +$$

$$+ \frac{f(x_0)}{(x_0-x)(x_0-x_1)\dots(x_0-x_n)} + \dots + \frac{f(x_n)}{(x_n-x)(x_n-x_0)\dots(x_n-x_{n-1})}.$$

Avaldame sellest võrdusest $f(x)$, tulemusena

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

$$+ f(x, x_0, \dots, x_n)\,\omega_n(x).$$

Esimestes osas tunneme ära Lagrange'i valemi abil esitatud interpolatsioonipolünoomi. Seega ülejäänud osa on jääkliige ehk

$$R_n(x) = f(x, x_0, \dots, x_n)\,\omega_n(x).$$

Juhime tähelepanu sellele, et saadud jääkliikme esituses ei ole funktsiooni f kohta mingeid sileduse ega pidevuse nõudeid. Kui eeldada, et $f \in C^{n+1}[a,b]$, siis saime eespool, et

$R_n(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\,\omega_n(x)$. Kahte jääkliikme esitust võrreldes saame

$$f(x, x_0, \dots, x_n) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi \in (a,b).$$

Sõnastame selle tulemuse järgmiselt.

<u>Teoreem</u> (teoreem diferentssuhte esitusest). Kui $f \in C^n[a,b]$ ja $x_0, \dots, x_n \in [a,b]$, siis

$$f(x_0, \dots, x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \quad \xi \in (a,b).$$

Erijuhul $n = 1$ saame siit laialdaselt tuntud Lagrange'i valemi $f(x_0, x_1) = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(\xi)$.

8. Interpolatsiooniprotsessi koondumisest

Olgu antud lõik $[a,b]$ ja sõlmede süsteem $x_{ni} \in [a,b]$, $n = 0, 1, \dots$, $i = 0, \dots, n$, see on kirjutatav kolmnurksel kujul

$$\begin{array}{l} x_{00} \\ x_{10}, x_{11} \\ x_{20}, x_{21}, x_{22} \\ \dots\dots\dots \end{array}$$

Vaatleme mingit funktsiooni $f: [a,b] \to \mathbb{R}$. Moodustame interpolatsioonipolünoomid P_n nii, et P_n aste ei ületa n ja $P_n(x_{ni}) = f(x_{ni})$, $i = 0, \dots, n$, tehes seda iga $n = 0, 1, \dots$ korral. Selliselt moodustub interpolatsioonipolünoomide jada P_n, $n = 0, 1, \dots$. Püstitame küsimuse: kas

$$\max_{a \le x \le b} |P_n(x) - f(x)| \longrightarrow 0, \text{ kui } n \to \infty ?$$

<u>Teoreem</u> (Faber, 1914). Iga sõlmede sisteemi $x_{ni} \in [a,b]$, $n = 0, 1, \dots$, $i = 0, \dots, n$, korral on olemas funktsioon $f \in C[a,b]$ nii, et $\max\limits_{a \le x \le b} |P_n(x) - f(x)| \to 0$ ei leia aset, kui $n \to \infty$. On olemas isegi funktsioon f, kus $\max\limits_{a \le x \le b} |P_n(x) - f(x)| \to \infty$, kui $n \to \infty$.

<u>Lisatulemus</u>. Iga sõlmede sisteemi korral

$$\max_{a \le x \le b} \sum_{i=0}^{n} |l_{ni}(x)| \ge c \ln n,$$

kus c on positiivne konstant.

Analüüsime selle tulemuse valguses andmete vigade mõju interpoleerimisel. Oletame, et täpsete väärtuste $f(x_{ni})$ asemel leitakse arvud f_{ni} nii, et $|f_{ni} - f(x_{ni})| \le \varepsilon$. Leitud arvude f_{ni} abil moodustatakse interpolatsioonipolünoomid $\tilde{P}_n(x) = \sum\limits_{i=0}^{n} f_{ni}\, l_{ni}(x)$, need üldiselt erinevad polünoomidest $P_n(x) = \sum\limits_{i=0}^{n} f(x_{ni})\, l_{ni}(x)$.

Siis

$$\max_{a \le x \le b} |\tilde{P}_n(x) - P_n(x)| =$$

$$= \max_{a \le x \le b} \left| \sum_{i=0}^{n} (f_{ni} - f(x_{ni}))\, l_{ni}(x) \right| \le$$

$$\le \max_{a \le x \le b} \sum_{i=0}^{n} |f_{ni} - f(x_{ni})|\, |l_{ni}(x)| \le$$

$$\leq \varepsilon \max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^{n} |l_{ni}(x)| \to \infty, \text{ kui } n \to \infty.$$

Siin hinnangutes võivad võrratused olla võrdused, sest $\max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^{n} |l_{ni}(x)| = \sum_{i=0}^{n} |l_{ni}(x_0)|$ mingi $x_0 \in [a,b]$ korral ja vastavalt $l_{ni}(x_0)$ märkidele võib valida suvaliselt $f_{ni} - f(x_{ni}) = \pm \varepsilon_{ni}$, et

$$\max_{a \leq x \leq b} \left| \sum_{i=0}^{n} (f_{ni} - f(x_{ni}))\, l_{ni}(x) \right| \geq$$

$$\geq \left| \sum_{i=0}^{n} (f_{ni} - f(x_{ni}))\, l_{ni}(x_0) \right| =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} |f_{ni} - f(x_{ni})|\, |l_{ni}(x_0)| = \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |l_{ni}(x_0)|.$$

Antud tulemusena võime väita, et polünoomidega interpoleerimine on ebastabiilne algandmete vigade suhtes, kui suurendada polünoomide astet.

9. Mitme muutuja funktsioonide interpoleerimine.

Peatume iseärasustel, mis ei esine ühe muutuja funktsioonide interpoleerimisel. Need esinevad juba kahe muutuja funktsioonide korral, seepärast käsitleme nende interpoleerimist.

Olgu tasandil antud omavahel erinevad punktid $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$, lisaks veel arvud $f_0, \ldots, f_n$, mis võivad olla mingi funktsiooni f väärtused $f_i = f(x_i, y_i)$, $i = 0, \ldots, n$. On vaja leida ülimalt m astme polünoom P_m nii, et $P_m(x_i, y_i) = f_i$, $i = 0, \ldots, n$. Polünoomi P_m üldkuju on

$$P_m(x,y) = c_{00} + c_{10}x + c_{20}x^2 + \ldots + c_{m0}x^m +$$
$$+ c_{01}y + c_{11}xy + c_{21}x^2y + \ldots + c_{m-1,1}x^{m-1}y +$$
$$\ldots\ldots$$
$$+ c_{0,m-1}y^{m-1} + c_{1,m-1}xy^{m-1} +$$
$$+ c_{0m}y^m.$$

Interpolatsioonitingimused annavad lineaarse süsteemi kordajate c_{ij} määramiseks. Kordajaid on $(m+1) + m + \ldots + 1 = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$, interpolatsioonitingimusi aga võrrandeid $n+1$. Süsteemi üheseks lahenduvuseks igasuguste andmete f_i korral on tarvilik, et $n+1 = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$.

Kui $m = 0$, siis $n = 0$ (1 sõlm), kui $m = 1$, siis $n = 2$ (3 sõlme), kui $m = 2$, siis $n = 5$ (6 sõlme), kui $m = 3$, siis $n = 9$ (10 sõlme) jne.

Niisiis, interpolatsioonipolünoomi üheseks määramiseks ei saa sõlmede arv olla suvaline.

Vaatleme järgnevalt süsteemi determinanti. Juhul näiteks $m=1$ ja $n=2$, siis süsteemi

$$c_{00}+c_{10}x_i+c_{01}y_i=f_i,\quad i=0,1,2,$$

üheseks lahenduvuseks igasuguste arvude f_i korral on tarvilik ja piisav, et

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & y_0 \\ 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \end{vmatrix} \neq 0.$$

Seejuures tingimus

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & y_0 \\ 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \end{vmatrix} = 0$$

on samaväärne sellega, et lineaarsel homogeensel süsteemil

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & y_0 \\ 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0$$

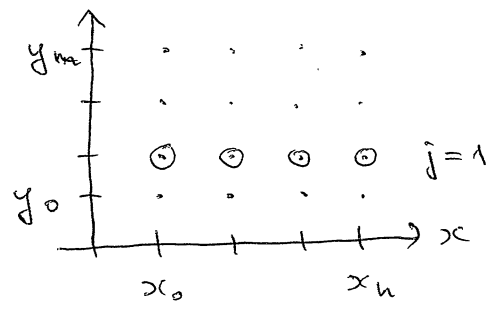
on mittetriviaalne lahend: $|a_1|+|a_2|+|a_3|\neq 0$,

ehk $a_1+a_2x_i+a_3y_i=0$, $i=0,1,2$, $|a_1|+|a_2|+|a_3|\neq 0$.

Sellist olukorda võib väljendada nii, et punktid (x_i,y_i), $i=0,1,2$, asuvad sirgel $a_1+a_2x+a_3y=0$. See omakorda annab, et kolme sõlmega (x_i, y_i), $i=0,1,2$, interpolatsiooni ülesanne ülimalt esimese astme polünoomi leidmiseks on üheselt lahenduv parajasti siis, kui kolm punkti (x_i, y_i) ei asu ühel sirgel. Analoogiliselt saab näidata, et kuue sõlmega (x_i, y_i), $i=0,\dots,5$, ülesanne on üheselt lahenduv parajasti siis, kui sõlmed ei asu ühel teist järku joonel (ellips, parabool, hüperbool, kaks sirget), kümme sõlme ei tohi asuda ühel kolmandat järku joonel jne. Siin on tegemist teise iseärasusega võrreldes ühe muutuja juhuga: sõlmed, kuigi nende arv on õige, ei tohi paikneda suvaliselt.

Kolmandaks on probleem, et ei ole võimalik saada nii häid jääkliikme esitusi nagu ühe muutuja juhul, sest ei kehti Rolle'i teoreem.

Vaatame veel ühte võimalust interpoleerimiseks kahe muutuja juhul, kus sõlmede paiknemine on eriline. Oletame, et on antud ristkülikuline sõlmede võre (x_i, y_j), $i=0,\dots,n$, $j=0,\dots,m$.



Olgu antud f_{ij}, $i=0,\dots,n$, $j=0,\dots,m$. Lahendame interpoleerimisülesande järgmiselt. Fikseerime $j\in\{0,\dots,m\}$ ja leiame P_{nj} kui ülimalt n astme ühe muutuja polünoomi nii, et $P_{nj}(x_i)=f_{ij}$, $i=0,\dots,n$. Selliselt toimime iga j korral, tulemusena saame polünoomid $P_{n0},\dots,P_{nm}$, lugedes nende argumendiks muutuja x. Seejärel leiame kahe muutuja polünoomi $P_{nm}= P_{nm}(x,y)$, mis on argumendi y järgi ülimalt m astme polünoom nii, et

$$P_{nm}(x,y_j)=P_{nj}(x),\ j=0,\dots,m,$$

kusjuures iga x korral esinevad $P_{nj}(x)$ interpoleerimisel kasutatavate funktsiooni väärtustena. Selliselt saadav kahe muutuja polünoom $P_{nm}(x,y)$ on ülimalt $n+m$ astme polünoom (fikseeritud x korral aste y järgi ei ületa m ja fikseeritud y korral aste x järgi ei ületa n). Seejuures iga i ja j korral $P_{nm}(x_i,y_j)= P_{nj}(x_i)=f_{ij}$. Ei saa küll väita, et selliselt saadud polünoom $P_{nm}=P_{nm}(x,y)$ oleks minimaalse astme polünoom, mis rahuldab interpolatsioonitingimusi.

On võimalik interpoleerida teises järjestuses, fikseerides algul $i\in\{0,\dots,n\}$, leides $\tilde{P}_{im}=\tilde{P}_{im}(y)$ nii, et $\tilde{P}_{im}(y_j)=f_{ij}$, $j=0,\dots,m$. Selliselt toimitakse iga indeksi i korral ning seejärel leitakse kahe muutuja polünoom $\tilde{P}_{nm} = \tilde{P}_{nm}(x, y)$, interpoleerides muutuja x järgi, kasutades $\tilde{P}_{im}(y)$ funktsiooni väärtustena, s.t. $\tilde{P}_{nm}(x_i, y) = \tilde{P}_{im}(y)$, $i = 0, \ldots, n$.

Ülesanne. Tõestada, et $\tilde{P}_{nm}(x, y) = P_{nm}(x, y)$. Soovitus: kasutada Lagrange'i interpolatsiooni-valemit.

§2. Funktsioonide lähendamine vähimruutude meetodil

Meenutame paari asjaolu funktsioonide interpoleerimisel polünoomidega. Praktikas on tavaline, et katsetulemused $f_0, \ldots, f_n$ sisaldavad vigadega. Juhuslike vigade mõju vähendamiseks tehakse palju katseid või mõõtmisi. Teame aga, et kui n kasvab, siis interpolatsioonipolünoomide jada P_n ei tarvitse koonduda interpoleeritavaks funktsiooniks f. Nägime ka, et kui n kasvab, siis suureneb funktsiooni f väärtuste vigade summaarne mõju. Nende puuduste kompenseerimiseks on kasutatav vähimruutude meetod funktsioonide lähendamiseks.

1. Lineaarsete süsteemide lahendamine vähimruutude meetodil.

Vaatleme süsteemi

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n = f_1, \\ \dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n = f_m, \end{cases} \qquad (1)$$

kus üldiselt $m \neq n$. Näiteks võib olla, et $m > n$.

Kasutame tähiseid

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix},$$

siis võime süsteemi (1) kirjutada $Ax = f$. Üldiselt ei tarvitse sellel süsteemil olla lahendit. Olgu $x \in \mathbb{R}^n$ korral

$$r_i(x) = f_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j,$$

$$R(x) = f - Ax = (r_1(x), \dots, r_m(x))^T,$$

$$\|R(x)\|^2 = \|f - Ax\|^2 = \sum_{i=1}^{m} r_i^2(x) = \sum_{i=1}^{m}\Big(f_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\Big)^2,$$

mis tähendab, et $\|\cdot\|$ tähistab eukleidilist ehk 2-normi.

Definitsioon. Vektorit $x \in \mathbb{R}^n$ nimetatakse süsteemi (1) lahendiks vähimruutude mõttes (vähimruutude lahendiks), kui tema korral

$$\|R(x)\|^2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|R(y)\|^2.$$

On näha, et vähimruutude mõttes lahend x on tavaline lahend parajasti siis, kui $\|R(x)\| = 0$.

Funktsioon $x \to \|R(x)\|^2 = g(x_1, \dots, x_n)$ on n muutuja diferentseeruv funktsioon, sest ta on polünoom. Kui x on tema miinimumkoht, siis $\frac{\partial g}{\partial x_k}(x) = 0$, $k = 1, \dots, n$, seega miinimumpunktis x

$$\frac{\partial g}{\partial x_k}(x) = \sum_{i=1}^{m} 2\left(f_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j\right)(-a_{ik}) = 0,$$

$$k = 1, \dots, n,$$

ehk

$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} a_{ik} x_j = \sum_{i=1}^{m} a_{ik} f_i$$

või

$$\sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ik} a_{ij}\right) x_j = \sum_{i=1}^{m} a_{ik} f_i, \quad k = 1, \dots, n.$$

See võrduste kogum on veel kirjutatav

$$A^T A x = A^T f, \qquad (2)$$

kus

$$A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{m1} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{1n} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

on transponeeritud maatriks. Süsteemi (2) nimetatakse normaalvõrrandite süsteemiks, tema maatriks $A^T A$ on $n \times n$ maatriks, sest A on $m \times n$ maatriks, A^T on $n \times m$ maatriks. Süsteemi (2) vabaliige $A^T f$ on n komponendiline vektor.

Eelneva arutelu põhjal näeme, et ülesande (1) lahend vähimruutude mõttes on süsteemi (2) lahend. Näitame, et ka vastupidi, süsteemi (2) iga lahend on ülesande (1) lahend vähimruutude mõttes. Olgu x süsteemi (2) lahend. Võtame suvaliselt $y \in \mathbb{R}^n$. Siis

$$\|f - Ay\|^2 = \|f - Ax + Ax - Ay\|^2 =$$

$$= (f - Ax + A(x-y),\ f - Ax + A(x-y)) =$$

$$= \|f - Ax\|^2 + 2\,(A(x-y),\ f - Ax) + \|A(x-y)\|^2 =$$

$$= \|f - Ax\|^2 + 2\,(x-y,\ A^T(f - Ax)) + \|A(x-y)\|^2 \geq$$

$$\geq \|f - Ax\|^2,$$

sest $A^T(f - Ax) = 0$ ja $\|A(x-y)\|^2 \geq 0$. Niisiis on süsteemi (1) lahendamine vähimruutude mõttes samaväärne normaalvõrrandite süsteemi lahendamisega.

Ülesanne. Tõestada, et normaalvõrrandite süsteemil on alati olemas lahend. Soovitus: tõestada, et $\operatorname{ran} A^TA = \operatorname{ran} A^T$, kus $m \times n$ maatriksi A korral defineeritakse $\operatorname{ran} A = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$.

Teoreem. Normaalvõrrandite süsteem (2) on üheselt lahenduv parajasti siis, kui maatriksi A veerud on lineaarselt sõltumatud.

Tõestus. Olgu

$$a_1 = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix}, \ldots, a_n = \begin{pmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix},$$

siis $y \in \mathbb{R}^n$ korral

$$Ay = \begin{pmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ - & - & - \\ a_{m1} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}y_1 + \ldots + a_{1n}y_n \\ \cdots\cdots \\ a_{m1}y_1 + \ldots + a_{mn}y_n \end{pmatrix} = y_1a_1 + \ldots + y_na_n.$$

Nüüd

$$a_1, \ldots, a_n \text{ on lineaarselt sõltumatud} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \{y_1a_1 + \ldots + y_na_n = 0 \Rightarrow y_1 = \ldots = y_n = 0\} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \{Ay = 0 \Rightarrow y = 0\} \Leftrightarrow \{A^TAy = 0 \Rightarrow y = 0\} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \text{süsteem (2) on üheselt lahenduv.}$$

Selles tõestuses kasutasime järgmise ülesande väidet.

Ülesanne. Tõestada, et võrdusest $A^T A y = 0$ järeldub, et $Ay = 0$.

On selge, et kui $Ay = 0$, siis $A^T A y = 0$. Seepärast leiab aset võrdus $\ker A^T A = \ker A$, kus $\ker A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}$. Seda võrdust kasutab ka teoreemile eelneva ülesande üks võimalik lahendus.

2. Funktsioonide lähendamine vähimruutude meetodil.

Olgu antud sõlmed $x_0, \ldots, x_m$ ja vastavad arvud $f_0, \ldots, f_m$ (need on näiteks mingi funktsiooni väärtused sõlmedes või nende lähisväärtused). Vaatleme lähendit

$\varphi(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j(x)$, kus koordinaatfunktsioonid $\varphi_0, \ldots, \varphi_n$ on antud. Kui $m = n$ ja kordajad c_j leitakse süsteemist $\varphi(x_i) = f_i$, $i = 0, \ldots, m$, ehk

$$\sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j(x_i) = f_i, \quad i = 0, \ldots, m, \tag{3}$$

siis saadakse interpolant. Kui süsteemil (3) lahend puudub (mis on loomulik nähtus, kui $m > n$), siis lahendades süsteemi (3) tundmatute c_j suhtes vähimruutude meetodil, räägitakse lähendamisest vähimruutude mõttes.

Antud juhul on süsteemi (3) maatriks

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \dots & \varphi_n(x_0) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(x_m) & \dots & \varphi_n(x_m) \end{pmatrix},$$

s.t. $a_{ij} = \varphi_j(x_i)$. Seega on normaalvõrrandite süsteemiks

$$\sum_{j=0}^{n} \Big(\sum_{i=0}^{m} \varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i) \Big) c_j = \sum_{i=0}^{m} \varphi_k(x_i) f_i, \quad k = 0, \dots, n.$$

Normaalvõrrandite süsteem on siin üheselt lahenduv parajasti siis, kui maatriksi A veerud

$$\begin{pmatrix} \varphi_j(x_0) \\ \vdots \\ \varphi_j(x_m) \end{pmatrix}, \quad j = 0, \dots, n,$$ on lineaarselt sõltumatud.

Märgime, et vähimruutude mõttes lähendamisel võib olla sõlmede $x_0, \dots, x_m$ hulgas omavahel võrdseid, näiteks tehakse igal teistest erineval väärtusel x_i teatud arv (10 või 100) mõõtmisi. Seejuures võib olla $x_i = x_j$, aga $f_i \neq f_j$.

3. Näide: polünoomidega lähendamine vähimruutude meetodil.

Valime $\varphi_0(x) = 1$, $\varphi_1(x) = x$, $\dots$, $\varphi_n(x) = x^n$, siis lähendiks on polünoom $P_n(x) = c_0 + c_1 x + \dots + c_n x^n$. Süsteemi (3) kordajad on siin $\varphi_j(x_i) = x_i^j$, normaalvõrrandite süsteem on

$$\sum_{j=0}^{n} \Big(\sum_{i=0}^{m} x_i^{k+j} \Big) c_j = \sum_{i=0}^{m} x_i^{k} f_i, \quad k = 0, \dots, n. \qquad (4)$$

<u>Teoreem</u>. Süsteem (4) on üheselt lahenduv parajasti siis, kui sõlmede $x_0, \ldots, x_m$ hulgas on vähemalt $n+1$ omavahel erinevat.

<u>Tõestus</u>. Tugineme eespool tõestatud teoreemile normaalvõrrandite süsteemi üheselt lahenduvusest. Selleks on tarvilik ja piisav, et lähtesüsteemi maatriksi veerud, antud jadana

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} x_0^n \\ \vdots \\ x_m^n \end{pmatrix},$$

oleksid lineaarselt sõltumatud. See leiab aset parajasti siis, kui maatriksi

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & x_m & \ldots & x_m^n \end{pmatrix}$$

astak $r(A)$ on võrdne veergude arvuga $n+1$. Kui on olemas $n+1$ omavahel erinevat sõlme, siis on olemas $n+1$ järku nullist erinev miinor (Vandermonde'i determinant) ning seega $r(A) = n+1$. Kui ei ole võimalik leida $n+1$ omavahel erinevat sõlme, siis igas $n+1$ järku miinoris on vähemalt kaks rida võrdsed ja miinor ise võrdne nulliga, mis tähendab, et $r(A) < n+1$.

Selle paragrahvi punktis 2 vaatlesime vähimruutude võttes lähendamist juhul, kui lähendav funktsioon on lineaarne kombinatsioon antud koordinaatfunktsioonidest. Vaatleme veel oluliselt üldisemat ülesannet.

Olgu antud sõlmed $x_0, \dots, x_m$, mille hulgas võib olla korduvaid, ja arvud $f_0, \dots, f_m$. Seejuures $x_i = x_j$ korral võib olla $f_i \neq f_j$. Lähendav funktsioon on kujul $\varphi(x, c_0, \dots, c_n)$, kus sõltuvus parameetritest c_i on teada ja on üldiselt mittelineaarne. Selle sõltuvuse määrab tavaliselt praktikas esinev konkreetne uurimisobjekt. Esialgu tundmatud parameetrid c_i tuleb määrata tingimusest, et avaldis

$$\sum_{i=0}^{m} \left(\varphi(x_i, c_0, \dots, c_n) - f_i \right)^2$$

oleks minimaalne, kus $(c_0, \dots, c_n) \in D \subset \mathbb{R}^{n+1}$ (võib olla ka $D = \mathbb{R}^{n+1}$). See on üldjuhul komplitseeritud ülesanne ja sobivate lahendi leidmise meetoditega tegeldakse optimiseerimise valdkonnas.

§3. Numbriline diferentseerimine

Numbriline diferentseerimine tähendab tuletiste leidmist funktsioonidest, millest kasutatakse lõplikku arvu väärtusi. Seega on lähteolukord sama mis interpoleerimisel: antud on sõlmed $x_0, \dots, x_n$ ja neile vastavad arvud $f_0, \dots, f_n$, nüüd tuleb funktsiooni asemel taastada selle tuletis või kõrgemat järku tuletised. On selge, et ka tuletisi saab üldjuhul taastada ainult ligikaudselt.

Üks võimalik viis numbrilise diferentseerimise valemeid saada on interpolatsioonivalemite kasutamine. Interpolatsioonivalemi

$$f(x) = \varphi(x) + R(x)$$

diferentseerimisel saadakse

$$f'(x) = \varphi'(x) + R'(x)$$

ja $f'(x)$ asemel kasutatakse $\varphi'(x)$. Analoogiliselt

$$f^{(k)}(x) = \varphi^{(k)}(x) + R^{(k)}(x)$$

ning $f^{(k)}(x)$ asemel võib kasutada $\varphi^{(k)}(x)$. Peab aga arvestama, et kui $R(x)$ on väike, siis $R'(x), \dots, R^{(k)}(x)$ ei tarvitse olla väikesed.

1. Numbrilise diferentseerimise valemid võrdsete vahemikega sõlmede korral.

Vaatleme olukorda, kus sõlmed on sellised, et $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, \dots, n$. Käsitleme tuletiste leidmist sõlmedes. Paremate omadustega on valemid, kus diferentseerimisel sõlmes x_m kasutatavad sõlmed paiknevad sümmeetriliselt x_m suhtes. Seega, kui kasutatakse sõlmi $x_0, \dots, x_n$, kus n on paarisarv ja $n = 2m$, diferentseeritakse sõlmes x_m. Muidugi ollakse sunnitud kasutama ka valemeid, kus sõlmed ei paikne sümmeetriliselt selle sõlme ümber, milles diferentseeritakse, näiteks tingib sellise olukorra väärtuste f_i kättesaadavus. Vaatleme järgnevas olulisemaid praktikas ettetulevaid valemeid, kus kasutame tähistust $f_i = f(x_i)$. Kui $n = 2$, siis

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h}(f_2 - f_0) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_2],$$

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}\left(f_0 - 2f_1 + f_2\right) - \frac{h^2}{12} f^{IV}(\xi),$$

kui aga $n = 4$, siis

$$f'(x_2) = \frac{1}{12h}\left(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4\right) + \frac{h^4}{30} f^{V}(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_4],$$

$$f'''(x_2) = \frac{1}{2h^3}\left(-f_0 + 2f_1 - 2f_3 + f_4\right) - \frac{h^2}{4} f^{V}(\xi).$$

Tuletame nendest valemitest esimese kujul

$$f'(x) = \frac{1}{2h}\left(f(x+h) - f(x-h)\right) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

Taylori arendist kasutades leiame

$$\frac{1}{2h}\left(f(x+h) - f(x-h)\right) = \frac{1}{2h}\Big(f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1) -$$

$$- \Big(f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2)\Big)\Big) =$$

$$= f'(x) + \frac{h^2}{12}\left(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right),$$

mis on kehtiv, kui $f \in C^3[x-h, x+h]$. Samal eeldusel

$$2 \min_{x-h \le z \le x+h} f'''(z) \le f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) \le 2 \max_{x-h \le z \le x+h} f'''(z)$$

ehk

$$\min_{x-h \le z \le x+h} f'''(z) \le \frac{1}{2}\left(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right) \le \max_{x-h \le z \le x+h} f'''(z).$$

Pidev funktsioon f''' saavutab kõik väärtused miinimumi ja maksimumi vahel, seepärast on olemas $\xi \in [x-h, x+h]$ nii, et $f'''(\xi) = \frac{1}{2}\left(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right)$.

Seda arvestades on esitatud valemitest esimene tuletatud.

<u>Ülesanne</u>. Tuletada ülejäänud kolm numbrilise diferentseerimise valemit vastavalt eeldustel, et $f \in C^4$ või $f \in C^5$.

2. Vigade mõju numbrilisel diferentseerimisel.

Numbrilisel diferentseerimisel (nagu interpoleerimisel) tähendab tingimatu viga ebatäpsusi funktsiooni väärtuste f_i leidmisel, mille tingivad näiteks vead mõõtmistulemustes või katteandmetes, tinglik viga on aga jääkliikme moodus või selle hinnang. Siin ilmneb järgmine nähtus: kui vähendada jääkliiget, suureneb tingimatu vea mõju. Selgitame seda näite varal, mis ~~[illegible]~~ esineb kõigis numbrilise diferentseerimise valemites.

Taylori arendisest $f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi)$ saame numbrilise diferentseerimise valemi

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi).$$

Olgu $f \in C^2[x_0, x_0+\delta]$, $|f''(x)| \leq M$, $f_i = f(x_i)$, $i=0,1$. Leitakse $\tilde{f}_0 = f_0 \pm \varepsilon$, $\tilde{f}_1 = f_1 \pm \varepsilon$ ja arvutatakse $\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h}$ kui tuletise $f'(x_0)$ lähend. Siis

$$\left|\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - f'(x_0)\right| = \left|\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2}\right| =$$

$$= \left|\frac{\tilde{f}_1 - f_1}{h} - \frac{\tilde{f}_0 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2}\right| \leq$$

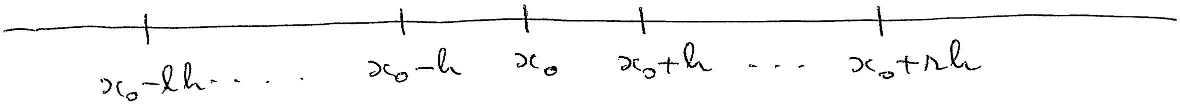
$$\leq \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{M}{2}h = g(h).$$

Kui $h \to 0$, siis $\frac{M}{2}h \to 0$ (jääkliikme hinnang ehk ~~tinglik~~ tingliku viga väheneb), kuid $\frac{2\varepsilon}{h} \to \infty$ (tingimatu vea ε mõju suureneb).

Funktsiooni g uurimisel saame $g'(h) = -\frac{2\varepsilon}{h^2} + \frac{M}{2}$ ja $g'(h) = 0$ annab $h = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M}}$. Seejuures $g''(h) = \frac{4\varepsilon}{h^3} > 0$, mis tähendab, et $h = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M}}$ korral on avaldis $g(h)$ minimaalne. Praktikas võib see tähendada seda, et kui andmed f_i on saadud liiga väikese sammuga, tuleb osast andmetest loobuda.

3. Numbrilise diferentseerimise valemite koondumus.

Vaatleme võrdsete vahemike tagant paiknevaid sõlmi $x_0 - lh, \ldots, x_0 + rh$, kus $l, r \geq 0$.



Olgu antud numbrilise diferentseerimise valem

$$f^{(k)}(x_0) = \frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0 + ih) + R_h(f). \qquad (1)$$

Loeme k, l, r ja kordajad b_i fikseerituks. Valemis (1) esinevat osa $\frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0 + ih)$ nimetame diferentsavaldiseks.

Definitsioon. Ütleme, et valem (1) või (selles esinev) diferentsavaldis koondub, kui iga funktsiooni $f \in C^k[x_0-\delta, x_0+\delta]$ korral protsessis $h \to 0$

$$\frac{1}{h^k}\sum_{i=-l}^{n} b_i f(x_0+ih) \to f^{(k)}(x_0) \quad (\text{ehk } R_h(f) \to 0).$$

Rõhutame, et koondumist käsitletakse niisuguses protsessis, kus sõlmi ei võeta juurde, vaid nendevaheline kaugus väheneb piiramatult, kusjuures kasutatavad sõlmed paiknevad etteantud šablooni kohaselt.

Võtame kasutusele diferentsavaldise karakteristliku funktsiooni

$$\chi(z) = \sum_{i=-l}^{n} b_i z^i,$$

kus vaatame $\chi : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ või $\chi : \mathbb{C}\setminus\{0\} \to \mathbb{C}$. Osutub, et valemi (1) paljud omadused sõltuvad selle funktsiooni käitumisest.

Teoreem. Selleks, et numbrilise diferentseerimise valem (1) koonduks, on tarvilik ja piisav, et

$$\chi(1)=0,\ \chi'(1)=0,\ \ldots,\ \chi^{(k-1)}(1)=0,\ \chi^{(k)}(1)=k! \qquad (2)$$

Tõestus. Rakendame Taylori arendist diferentsavaldises

$$\frac{1}{h^k}\sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0+ih) = \frac{1}{h^k}\sum_{i=-l}^{r} b_i\Big(f(x_0)+f'(x_0)ih +$$

$$+\frac{f''(x_0)}{2}i^2h^2+\ldots+\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}i^kh^k+\alpha_i\Big),$$

kus $\frac{\alpha_i}{h^k}\to 0$ protsessis $h\to 0$, kui $f\in C^k$. Vaatame võrduseid

$$\begin{cases}\sum\limits_{i=-l}^{r} b_i = 0 & (f(x_0) \text{ kordaja}),\\ \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i i = 0 & (f'(x_0) \text{ kordaja}),\\ \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i i^2 = 0 & (f''(x_0) \text{ kordaja}),\\ \ldots\ldots\\ \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i i^{k-1} = 0, \\ \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i \frac{i^k}{k!} = 1 \text{ ehk } \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i i^k = k! \end{cases} \qquad (3)$$

Arvestades, et $\sum\limits_{i=-l}^{r} b_i\frac{\alpha_i}{h^k}\to 0$, kui $h\to 0$, saame, et tingimuste (3) täidetuse korral (1) koondub ehk $R_h(f)\to 0$ iga $f\in C^k$ korral.

Teistpidi, eeldame, et (1) koondub ehk $R_h(f)\to 0$ iga $f\in C^k$ korral protsessis $h\to 0$. Kasutame testfunktsiooni f, mille korral

$$f(x_0)=1,\ f'(x_0)=0,\ \ldots,\ f^{(k)}(x_0)=0,$$

siis saame esimese võrduse (3). Kui võtame

f nii, et

$$f(x_0)=0,\ f'(x_0)=1,\ \dots,\ f^{(k)}(x_0)=0,$$

saame teise võrduse (3), kui aga f on selline, et

$$f(x_0)=0,\ \dots,\ f^{(k-1)}(x_0)=0,\ f^{(k)}(x_0)=1,$$

saame viimase võrduse (3). Sobivad test-funktsioonid on näiteks $f(x)=\dfrac{(x-x_0)^j}{j!}, j=0,1,\dots,k$.

Senise aruteluga oleme näidanud, et (1) koondub parajasti siis, kui kehtivad võrdused (3). Teoreemi väites olid võrdused

$$\left\{\begin{aligned} &x(1)=\sum_{i=-l}^{n} b_i=0,\\ &x'(1)=\sum_{i=-l}^{n} b_i i=0,\\ &x''(1)=\sum_{i=-l}^{n} b_i i(i-1)=0,\\ &\dots\\ &x^{(k-1)}(1)=\sum_{i=-l}^{n} b_i i(i-1)\dots(i-(k-2))=0,\\ &x^{(k)}(1)=\sum_{i=-l}^{n} b_i i(i-1)\dots(i-(k-1))=k! \end{aligned}\right. \qquad (2)$$

Esimesed kaks võrdust on mõlemas komplektis (2) ja (3) samad. Arvestades teist võrdust on samaväärsed ka kolmandad. Selliselt jätkates näeme (2) ja (3) samaväärsust.

<u>Ülesanne</u>. Tõestada, et valem (1) koondub parajasti siis, kui tema karakteristlik funktsioon avaldub $\chi(z) = z^{-l}(z-1)^k Q(z)$, kus Q on polünoom ning $Q(1)=1$.

<u>Näideteks</u> vaatleme valemeid

1) $f'(x) = \frac{1}{h}\big(f(x+h) - f(x)\big) - \frac{h}{2} f''(\xi)$,

2) $f'(x) = \frac{1}{2h}\big(f(x+h) - f(x-h)\big) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$,

3) $f''(x) = \frac{1}{h^2}\big(f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)\big) - \frac{h^2}{12} f^{IV}(\xi)$.

Jääkliikmetele saab sellise esituse anda siis, kui $f \in C^2$, $f \in C^3$ ja $f \in C^4$ vastavalt valemile.

Esimeses valemis karakteristlik funktsioon on $\chi(z) = z-1$, siis $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = 1$, $\chi'(1) = 1!$ Teises valemis $\chi(z) = \frac{1}{2}\left(z - \frac{1}{z}\right)$, $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{z^2}\right)$, $\chi'(1) = 1!$ Kolmandas valemis $\chi(z) = z - 2 + \frac{1}{z}$, $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = 1 - \frac{1}{z^2}$, $\chi'(1) = 0$, $\chi''(z) = \frac{2}{z^3}$, $\chi''(1) = 2!$

Seega, kui $f \in C^1$, siis esimeses ja teises valemis diferentsavaldis koondub tuletiseks, kui aga $f \in C^2$, siis kolmandas valemis diferentsavaldis koondub teiseks tuletiseks, kui $h \to 0$.

Jääkliikmete järgi saab otsustada valemite koonduvuskiiruse üle. Öeldakse, et valem (1) koondub kiirusega h^m, kui $|R_h(f)| \leq c h^m$ piisavalt sileda funktsiooni f korral. Esimeses valemis on koonduvuskiirus h, teises ja kolmandas valemis h^2. Koonduvuskiirust valemis (1) on võimalik leida diferentsavaldise järgi, kasutades pikemaid Taylori arendusi.

IV Numbriline integreerimine (määratud integraalide ligikaudne leidmine)

Sissejuhatus

Oletame, et on vaja arvutada määratud integraal

$$\int_a^b f(x)\,dx.$$

Kui on võimalik leida algfunktsioon F, s.t. $F'(x) = f(x)$, siis võib kasutada Newton-Leibnizi valemit

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a).$$

Mõnikord ei õnnestu algfunktsiooni leida kui elementaarfunktsiooni, näiteks $\int e^{x^2}dx$ ei ole elementaarfunktsioon (sellest järeldub, et tema väärtusi ei saa näiteks arvutis nii lihtsalt leida kui elementaarfunktsioonide väärtusi). Newton-Leibnizi valemit ei saa kasutada ka siis, kui funktsioonist f on teada lõplik arv väärtusi, näiteks katseandmed või mõõtmistulemused. Sel juhul kasutatakse ligikaudseid meetodeid. Kui kasutatakse lõplikku hulka funktsiooni f väärtusi integraali leidmiseks, siis nime-

tatakse vastavat eeskirja kvadratuurvalemiks.
Kui kordsete integraalide $\int_\Omega f(x)dx$, $\Omega\subset\mathbb{R}^n$, leidmisel kasutatakse lõplikku hulka f väärtusi, siis nimetatakse neid valemeid kubatuurvalemiteks, selles aines neid ei käsitleta. Mõnikord nimetatakse iga n korral vastavaid valemeid kvadratuurvalemiteks.

Üsna levinud on järgmised kvadratuurvalemid

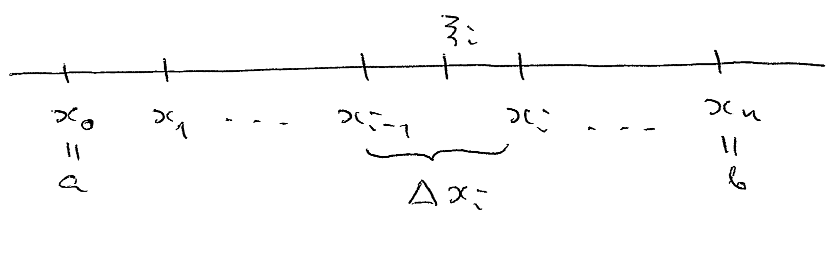
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i),$$

kus argumendi väärtusi x_i nimetatakse kvadratuurvalemi sõlmedeks, arve A_i kvadratuurvalemi kordajateks, avaldist $\sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ kvadratuursummaks. Loomulik on eeldada, et $x_i\in[a,b]$.

Olgu f suvaline Riemanni mõttes integreeruv funktsioon. Integraali definitsiooni põhjal

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\max\Delta x_i\to 0} \sum_{i=1}^n f(\xi_i)\Delta x_i,$$

kus $a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$, $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $i=1,\ldots,n$, $\xi_i\in[x_{i-1},x_i]$.



Siit saab suure hulga kvadratuurvalemeid
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i)\Delta x_i,$$
kus ξ_i on kvadratuurvalemi sõlmed, Δx_i kordajad ja kvadratuursummaks võetakse integraalsumma.

Seda võtet ei saa kasutada, kui integraal on päratu, s.t. f on tõkestamata või integreerimispiirkond on tõkestamata. Sel juhul kasutatakse kvadratuurvalemeid
$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) + R_n(f),$$
kus uute nõuetena esinevad jääkliige $R_n(f)$ ja kaalufunktsioon p, mille omadused peegeldavad integraali päratust või integreeritava funktsiooni iseärasusi, ning f on heade omadustega (sile, tõkestatud) funktsioon.

Tavaliselt nõutakse kaalufunktsioonilt teooria arendamisel, et

1° $p(x) \geq 0$, $x \in [a,b]$, eksisteerib $\int_a^b p(x)dx > 0$,

2° eksisteerivad $\int_a^b p(x) x^k dx$, $k = 1, 2, \ldots$.

Nendest eeldustest järeldub, et iga polünoomi P korral eksisteerib $\int_a^b p(x)P(x)dx$. Näiteks kasutatakse lõigus $[a,b]$ kaalufunktsioone

$p(x) = (x-a)^{\alpha}(b-x)^{\beta}$, $\alpha, \beta > -1$, piirkonnas $[0,\infty)$ kaalufunktsiooni $p(x) = x^{\alpha}e^{-x}$ $(\alpha > -1)$, piirkonnas $(-\infty,\infty)$ kaalufunktsiooni $p(x) = e^{-x^2}$ või $p(x) = e^{-|x|}$.

Toome näite kaalufunktsiooni väljaeraldamisest. Avaldatakse

$$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{\sqrt{1-x^6}} = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{\sqrt{1+x^2+x^4}}\,dx,$$

milles võetakse $[a,b]=[-1,1]$ korral $p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} =$

$= (1+x)^{-\frac{1}{2}}(1-x)^{-\frac{1}{2}} = (x-(-1))^{-\frac{1}{2}}(1-x)^{-\frac{1}{2}}$, s.t. $\alpha=\beta=-\frac{1}{2}$,

$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2+x^4}}$, funktsioon f on tõkestatud ja sile.

§1. Interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemid

Definitsioon. Kvadratuurvalemit

$$\int_a^b p(x) f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R_n(f) \tag{1}$$

nimetatakse interpolatsioonitüüpi valemiks, kui tema kvadratuursumma on sõlmedega x_i interpolatsioonipolünoomi integraal kaaluga p. Seega $\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b p(x) P_n(x)\,dx$, kus $P_n(x_i) = f(x_i)$, $i=0,\ldots,n$, P_n aste ei ületa arvu n.

Lagrange'i valemi põhjal $P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_{ni}(x)$, seepärast

$$\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b p(x) \Big(\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_{ni}(x) \Big) dx =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \Big(\int_a^b p(x)\, l_{ni}(x) dx \Big) f(x_i)$$

iga funktsiooni f korral parajasti siis, kui

$A_i = \int_a^b p(x) l_{ni}(x) dx$. Sellega on tõestatud

<u>Lause</u>. Kvadratuurvalem (1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui tema kordajad avalduvad $A_i = \int_a^b p(x) l_{ni}(x) dx$.

Niisiis on interpolatsioonitüüpi valemites kordajad üheselt määratud, kui sõlmed on antud (muidugi peame silmas, et a, b ja p on fikseeritud).

Interpolatsioonivalemist $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$ saame

$$\int_a^b p(x) f(x) dx = \int_a^b p(x) P_n(x) dx + \int_a^b p(x) R_n(x) dx,$$

millest järeldub, et $\int_a^b p(x) P_n(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ parajasti siis, kui $R_n(f) = \int_a^b p(x) R_n(x) dx$. Siit saame järgmise väite.

Lause. Kvadratuurvalem (1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui tema jääkliige avaldub interpolatsioonivalemi jääkliikme kaudu kujul $R_n(f) = \int_a^b p(x) R_n(x)\,dx$.

Kvadratuurvalemit nimetatakse täpseks funktsiooni f korral, kui f puhul integraal ja kvadratuursumma on võrdsed ehk jääkliige $R_n(f)$ on võrdne nulliga.

Teoreem. Kvadratuurvalem (1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui ta on täpne kõigi ülimalt n astme polünoomide korral.

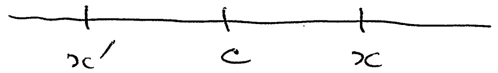
Tõestus. Kui (1) on täpne kõigi ülimalt n astme polünoomide korral, siis on ta täpne ka Lagrange'i fundamentaalpolünoomide l_{ni} korral. Seepärast

$$\int_a^b p(x)\, l_{ni}(x)\,dx = \sum_{j=0}^{n} A_j\, l_{ni}(x_j) = A_i,$$

sest $l_{ni}(x_j) = \delta_{ij}$. Sellega on näidatud, et (1) on interpolatsioonitüüpi.

Teistpidi tõestuseks eeldame, et (1) on interpolatsioonitüüpi. Valime vabalt polünoomi P, mille aste ei ületa arvu n. Tema interpolatsioonipolünoomiks on tema ise, sest tema aste ei ületa arvu n, ta rahuldab interpolatsioonitingimusi ja interpolatsioonipolünoom on üheselt määratud. Seega interpolatsioonivalemi jääkliige $R_n(x)=0$ ja kvadratuurvalemi jääkliige $R_n(P)=\int_a^b p(x)\,R_n(x)\,dx=0$, mis tähendab, et (1) on täpne polünoomi P korral.

Meenutame, et funktsiooni f nimetatakse paarisfunktsiooniks, kui $f(-x)=f(x)$, ja paarituks funktsiooniks, kui $f(-x)=-f(x)$ iga x korral funktsiooni f määramispiirkonnast D, mis peab olema sümmeetriline punkti 0 suhtes: kui $x\in D$, siis $-x\in D$. Üldisemalt, funktsiooni f nimetatakse paarisfunktsiooniks punkti c suhtes, kui $f(x')=f(x)$ iga x ja x' korral, mis paiknevad sümmeetriliselt punkti c suhtes: $x-c=c-x'$ ehk $x'=2c-x$. Loomulik on



eeldada, et funktsiooni f määramispiirkond D on siin sümmeetriline punkti c suhtes, s.t. $x\in D$ korral $2c-x\in D$. Analoogiliselt defineeritakse paaritu funktsioon mingi punkti suhtes.

Ülesanne. Tõestada, et kui interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemis kaalufunktsioon p on paaris integreerimispiirkonna keskpunkti $c = \frac{a+b}{2}$ suhtes ja sõlmed paiknevad sümmeetriliselt c suhtes, siis sümmeetrilistele sõlmedele vastavad kordajad on võrdsed, s.t. kui $x_i - c = c - x_j$, siis $A_i = A_j$.

Märgime veel, et kui $f \in C^{n+1}_{[a,b]}$, siis interpolatsioonivalemi jääkliige avaldub kujul $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega_n(x)$ ning interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemis jääkliige saab kuju $R_n(f) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b p(x) f^{(n+1)}(\xi(x))\,\omega_n(x)\,dx$.

§2. Newton-Cotesi valemid

Newton-Cotesi valemid on iseloomustatavad järgmiste andmetega:

1) interpolatsioonitüüpi,

2) integreerimispiirkond on lõik, s.t. $a, b \in \mathbb{R}$,

3) $p(x) = 1$ iga $x \in [a,b]$ korral,

4) $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$.

Niisiis on Newton-Cotesi valemites vabadus ainult a ja b, samuti n valikus.

1. Newton–Cotesi valemite kordajate omadused.

Newton–Cotesi valemid on kujul

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R_n(f).$$

Kuna nad on interpolatsioonitüüpi, siis $A_i = \int_a^b l_{ni}(x)dx$.

Asendades l_{ni} kuju, saame

$$A_i = \int_a^b \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}dx.$$

Teeme muutujavahetuse $x = a + th$, siis $dx = h\,dt$, $x - x_j = a + th - (a + jh) = (t-j)h$, $x_k - x_j = a + kh - (a + jh) = (k-j)h$ ja integraali rajad a ja b asenduvad vastavalt arvudega 0 ja n. Selle tulemusena arvutame

$$A_i = h\int_0^n \frac{t(t-1)\dots(t-(i-1))(t-(i+1))\dots(t-n)}{i(i-1)\dots 1\cdot(-1)\dots(i-n)}dt =$$

$$= \frac{b-a}{n}\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\dots(t-(i-1))(t-(i+1))\dots(t-n)dt =$$

$$= (b-a)B_i,$$

kus arvud B_i ei sõltu integreerimispiirkonnast $[a,b]$, küll sõltuvad nad arvust n, sepärast kirjutame $B_i = B_{ni}$ kui n ei ole fikseeritud ja sõltuvust arvust n on vaja rõhutada. Niisiis on Newton–Cotesi valemid kirjutatavad kujul

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} B_i f(x_i) + R_n(f).$$

Esitame nüüd kordajate B_i omadused.

1) $\sum_{i=0}^{n} B_{ni} = 1$, selle saame, kui võtame kvadratuurvalemis $f(x) \equiv 1$, ~~sest~~ selle funktsiooni kui 0 astme polünoomi korral on kvadratuurvalem täpne.

2) $B_{ni} = B_{n,n-i}$ eelmises paragrahvis antud ülesande põhjal.

3) $\sum_{i=0}^{n} |B_{ni}| \to \infty$, kui $n \to \infty$; seda väidet siin ei tõestata.

Omadused 1) ja 3) lubavad väita, et arvu n kasvades hakkavad esinema negatiivsed kordajad, esimene neist ilmneb juhul $n = 8$ ja $n \geq 10$ korral on neid juba alati. Omadus 3) tähendab veel seda, et arvu n kasvades suureneb andmetes esinevate ebatäpsuste mõju. Näitame seda. Oletame, et arvude $f(x_i)$ asemel on leitud $\tilde{f}_i$ nii, et $|\tilde{f}_i - f(x_i)| \leq \varepsilon$. Kvadratuursumma $\sum_{i=0}^{n} B_{ni} f(x_i)$ asemel arvutatakse $\sum_{i=0}^{n} B_{ni} \tilde{f}_i$. Siis

$$\left|\sum_{i=0}^{n} B_{ni}\tilde{f}_i - \sum_{i=0}^{n} B_{ni} f(x_i)\right| = \left|\sum_{i=0}^{n} B_{ni}(\tilde{f}_i - f(x_i))\right| \leq$$

$$\leq \sum_{i=0}^{n} |B_{ni}|\,|\tilde{f}_i - f(x_i)| \leq \sum_{i=0}^{n} |B_{ni}|\,\varepsilon \to \infty,$$

kui $n \to \infty$.

2. Newton-Cotesi valemite jääkliige.

Eelmise paragrahvi lõpus näitasime, kuidas saab esitada interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemi jääkliiget vahede funktsiooni kaudu. Newton-Cotesi valemites saame seda kasutades esituse

$$R_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\,\omega_n(x)\,dx,$$

kui $f \in C^{n+1}[a,b]$. Kui tähistada $M_{n+1} = \max\limits_{a \le x \le b} |f^{(n+1)}(x)|$,

saaksime hinnangu

$$|R_n(f)| \le \frac{1}{(n+1)!} M_{n+1} \int_a^b |\omega_n(x)|\,dx,$$

kuid see on oluliselt üle hinnatud, sest ω_n muudab sõlmest läbiminemisel märki (selline arutelu sobib ka teiste interpolatsioonitüüpi valemite korral, mis üldjuhul sisaldavad ka kaalufunktsiooni p). Osutub, et Newton-Cotesi valemites saab jääkliikme teisendada märksa sobivamale kujule kui üldjuhul.

Meil läheb vaja analüüsi kursusest pärit integraalarvutuse keskväärtusteoreemi. Kehtib võrdus

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(\xi)\int_a^b g(x)\,dx, \quad \xi\in(a,b),$$

kui f on pidev, g on integreeruv ja säilitab märki (s.t. $g(x)\geq 0$ iga $x\in[a,b]$ korral või $g(x)\leq 0$ iga $x\in[a,b]$ korral). Erijuhul, kus $g(x)=1$ iga $x\in[a,b]$ korral, on keskväärtusteoreemist tuntud, et

$$\int_a^b f(x)\,dx = f(\xi)(b-a), \quad \xi\in(a,b).$$

Olgu Newton-Cotesi valemis $n=1$ ja $f\in C^2[a,b]$. Siis

$$R_1(f) = \frac{1}{2!}\int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b)\,dx =$$

$$= \frac{1}{2}f''(\xi)\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi),$$

sest interpoleerimise juures tõdesime funktsiooni $x\to f''(\xi(x))$ pidevust ja $(x-a)(x-b)\leq 0$ iga $x\in[a,b]$ korral.

Üldiselt saab tõestada (tuginedes keskväärtusteoreemile, aga arutelu on küllalt tehniline), et kui n on paaris, siis

$$R_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b (x-c)\,\omega_n(x)\,dx,$$

kus $c\in\mathbb{R}$ on suvaline (põhjendusena märgime, et siin $\int_a^b \omega_n(x)\,dx = 0$, sest ω_n on paaritu punkti $c=\frac{a+b}{2}$ suhtes); kui aga n on paaritu, siis

$$R_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b \omega_n(x)\,dx.$$

Muidugi kehtivad need jääkliikme esitused juhul, kui funktsioonilt f nõuda sobivat siledust: paaris n korral $f \in C^{n+2}[a,b]$, paaritu n korral $f \in C^{n+1}[a,b]$.

Nendele tulemustele tuginedes saadakse

$$R_2(f) = \frac{f^{IV}(\xi)}{4!} \int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\,dx =$$

$$= -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\xi), \text{ kui võetakse } c = \frac{a+b}{2},$$

$$R_3(f) = -\frac{3}{80} \left(\frac{b-a}{3}\right)^5 f^{IV}(\xi).$$

§3. Trapetsvalem, Simpsoni valem, Newtoni $\frac{3}{8}$-valem, ristkülikvalem

1. Vaatleme Newton-Cotesi valemit juhul $n=1$. Leidmata on veel ainult kordajad. Nende korral

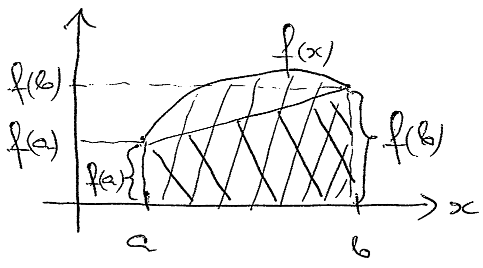
$$B_0 + B_1 = 1,$$
$$B_0 = B_1,$$

millest järeldub, et $B_0 = B_1 = \frac{1}{2}$. Kvadratuurvalem on

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\,\frac{f(a)+f(b)}{2} - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi),\ \xi \in (a,b),$$

kusjuures selline on jääkliige, kui $f \in C^2[a,b]$.

Geomeetriliselt tähendab sellise valemiga arvutamine, et tegelik funktsiooni f graafiku alune pindala $\int_a^b f(x)dx$ asendatakse kvadratuursummaga, mis on trapetsi pindala.



On selge, et viga võib siin olla küllalt suur. Selle tõttu ~~toimetakse~~ toimime järgnevalt. Jaotame lõigu $[a,b]$ võrdseteks osadeks pikkusega $h = \frac{b-a}{n}$, osalõikudel tekivad otspunktid $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$. Avaldame

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$$

ja rakendame igal osalõigul eespool saadud trapetsvalemit

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{h}{2}\left(f(x_{i-1}) + f(x_i)\right) - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_i).$$

Kokku saame valemi

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{n}\left(f(x_{i-1}) + f(x_i)\right) - \frac{h^3}{12} \sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i).$$

Seejuures

$$n \min_{1\le i\le n} f''(\xi_i) \le \sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \le n \max_{1\le i\le n} f''(\xi_i),$$

millest

$$\min_{\xi_1\le x\le \xi_n} f''(x) \le \min_{1\le i\le n} f''(\xi_i) \le \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \le$$

$$\le \max_{1\le i\le n} f''(\xi_i) \le \max_{\xi_1\le x\le \xi_n} f''(x).$$

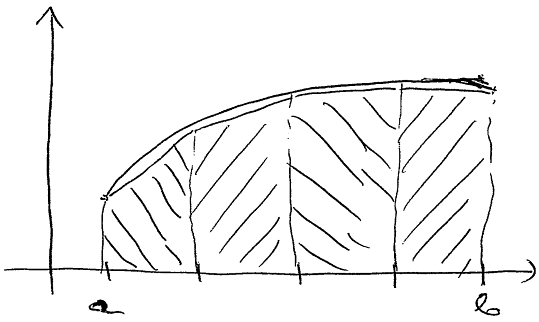
Kui f'' on pidev, siis ta saavutab kõik väärtused miinimaalse ja maksimaalse vahel ning seepärast leidub $\xi \in (a,b)$ nii, et $f''(\xi) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$ ehk $\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) = n f''(\xi)$. Sellise üldise iseloomuga keskmistamise tulemusena võime jääkliikme kirjutada

$$R_n(f) = -\frac{nh^3}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi).$$

Kvadratuurvalem saab kuju (siin $f_i = f(x_i)$)

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2n}\left(f_0 + 2f_1 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n\right) - \frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi).$$

Geomeetriliselt tähendab selle valemiga arvutamine tegeliku pindala asendamist trapetsite pindalade summaga, mida on illustreeritud joonisel $n = 4$ korral.



Joonisel toodud juhtumil $f''(x)<0$ iga $x\in[a,b]$ korral, seepärast $-\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi) > 0$ ja integraal on suurem kui kvadratuursumma.

Kui on vaja eristada, siis $n=1$ korral räägitakse lihtvalemist ehk elementaarvalemist, $n\geq 2$ korral liitvalemist ehk üldistatud valemist.

2. Võtame Newton-Cotesi valemis $n=2$, siis $x_0=a$, $x_1=\frac{a+b}{2}$, $x_2=b$. Teame ka jääkliiget, leiame kordajad. Kordajate omadustest saame

$$B_0+B_1+B_2=1,$$
$$B_0=B_2.$$

Kordajad B_i ei sõltu lõigust $[a,b]$, arvutuste lihtsuse huvides võtame hetkeks $[a,b]=[0,2]$ ja integreeritavaks polünoomi $f(x)=x^2$, misjuures teame, et siis valem on täpne. Seega

$$\int_0^2 x^2\,dx=\frac{8}{3}=2\left(B_0\cdot 0+B_1\cdot 1+B_2\cdot 4\right) \text{ ehk}$$

$B_1+4B_2=\frac{4}{3}$. Arvestades veel eespool toodud võrdustest saadavat $B_1 + 2B_2 = 1$, leiame, et $B_0 = B_2 = \frac{1}{6}$, $B_1 = \frac{4}{6}$. Niisiis on Newton-Cotesi valem juhul $n = 2$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) - \frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\xi).$$

Seda valemit nimetatakse Simpsoni valemiks. Analoogiliselt trapetsvalemi juhuga jaotame lõigu $[a,b]$ n osaks, kus nüüd valime n paarisarvu, mida ikka olgu $h = \frac{b-a}{n}$. Avaldame integraali $\int_a^b f(x)\,dx$ ~~integraalide~~ summana integraalidest üle osalõikude $[a, a+2h]$, $[a+2h, a+4h], \dots, [b-2h, b]$ ning igale osaintegraalile rakendame Simpsoni valemit. Tulemusena saame

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n/2} \frac{2h}{6}\left(f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})\right) -$$

$$- \sum_{i=1}^{n/2} \frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi_i).$$

Analoogiliselt trapetsvalemi juhtumiga keskmistame siingi f^{IV} väärtused

$$\sum_{i=1}^{n/2} f^{IV}(\xi_i) = \frac{n}{2} f^{IV}(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

Kokku võttes saame valemi

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{3n}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 4f_{n-1} + f_n\right) - \frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{IV}(\xi).$$

3. Kui võtame Newton-Cotesi valemis $n=3$, saame kordajad $B_0 = B_3 = \frac{1}{8}$, $B_1 = B_2 = \frac{3}{8}$.

Ülesanne. Näidata, kuidas leitakse kordajad $B_0, \ldots, B_3$ Newton-Cotesi valemis.

Tähistades $h = \frac{b-a}{3}$, saame

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{8}\Big(f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)\Big) - \frac{3}{80} h^5 f^{IV}(\xi),$$

seda nimetatakse Newtoni $\frac{3}{8}$-valemiks.

Toimides analoogiliselt eelnevate juhtudega võtame kolmega jaguva arvu n, nii et $h = \frac{b-a}{n}$ ja lahutame integraali $\int_a^b f(x)dx$ osaintegraalideks üle lõikude $[a, a+3h]$, $[a+3h, a+6h]$, $\ldots$, $[b-3h, b]$. Seejärel rakendame igale osaintegraalile Newtoni $\frac{3}{8}$-valemit ja keskmistame jääkliikmes tekkiva f^{IV} väärtuste summa, tulemusena

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{3(b-a)}{8n}\Big(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + 3f_4 + \ldots + 3f_{n-1} + f_n\Big) -$$

$$- \frac{(b-a)^5}{80 n^4} f^{IV}(\xi).$$

Kui võrrelda näiteks $n = 12$ korral Simpsoni ja Newtoni $\frac{3}{8}$-valemi jääkliiget, siis tuleb kasutada esimest. Kui aga $n = 9$, siis saab kasutada Newtoni $\frac{3}{8}$-valemit, Simpsoni valemit mitte.

Selles paragrahvis siiani vaadeldud valemite jääkliikmetest saab järeldada, et protsessis $h \to 0$ või $n \to \infty$ trapetsvalemis kvadratuursumma koondub integraaliks, kui $f \in C^2[a,b]$, samuti Simpsoni ja Newtoni $\frac{3}{8}$-valemis, kui $f \in C^4[a,b]$. Tegelikult toimub koondumine iga Riemanni mõttes integreeruva funktsiooni korral. Näiteks trapetsvalemis

$$\frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n) =$$

$$= \frac{1}{2}h(f_0 + f_1 + \ldots + f_{n-1}) + \frac{1}{2}h(f_1 + f_2 + \ldots + f_n) \to$$

$$\to \frac{1}{2}\int_a^b f(x)\,dx + \frac{1}{2}\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b f(x)\,dx,$$

sest kvadratuursumma jaotame kaheks liidetavaks, mis mõlemad on integraalsummad kordajaga $\frac{1}{2}$: esimesel summal on võetud funktsiooni väärtused iga osalõigu vasakpoolses otspunktis, teisel summal aga iga osalõigu parempoolses otspunktis.

<u>Ülesanne</u>. Tõestada, et Simpsoni ja Newtoni $\frac{3}{8}$-valemis toimub koondumine iga Riemanni mõttes integreeruva funktsiooni korral.

4. Vaatleme kvadratuurvalemit

$$\int_a^b f(x)\,dx = A_0 f(x_0) + R_0(f),$$

s.t. kasutatakse ainult ühte sõlme x_0.

Määrame kordaja A_0 ja sõlme x_0 nii, et valem oleks täpne võimalikult kõrge astme polünoomide korral. Kui $f(x)=1$ iga $x\in[a,b]$ korral, siis tema puhul täpsus annab $\int_a^b f(x)dx = b-a = A_0\cdot 1$, mistõttu $A_0=b-a$. Kui $f(x)=x$ iga $x\in[a,b]$ korral, siis $\int_a^b x\,dx = \frac{x^2}{2}\Big|_a^b = \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{(b-a)(b+a)}{2}$, kvadratuursumma on $(b-a)x_0$, integraali ja kvadratuursumma võrdumine annab $x_0=\frac{a+b}{2}$.

Eeldame, et $f\in C^2[a,b]$ ja püüame leida jääkliikmele sobivat eritust. ~~[illegible]~~ Saame Taylori arendist kasutades

$$R_0(f) = \int_a^b f(x)dx - (b-a)f(x_0) =$$

$$= \int_a^b \left(f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(\xi(x))}{2}(x-x_0)^2\right)dx - (b-a)f(x_0) =$$

$$= \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi(x))(x-x_0)^2dx,$$

sest $\int_a^b (x-x_0)dx = 0$. Edasises teisenduses tugineme asjaolule, mille sõnastame üldisemalt.

<u>Ülesanne</u>. Tõestada, et Taylori valemis

$$f(x) = f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\ldots+\frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!}(x-x_0)^n$$

on funktsioon $x\to f^{(n)}(\xi(x))$ pidev, kui $f\in C^n[x_0-\delta, x_0+\delta]$ mingi $\delta>0$ korral.

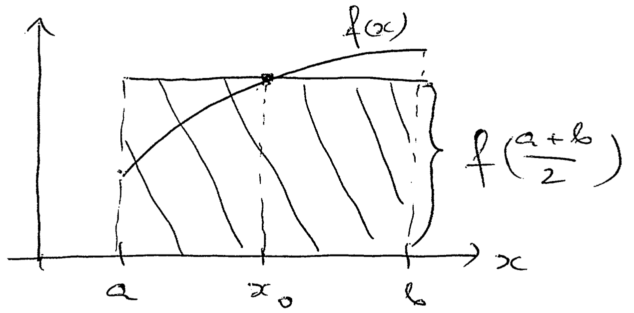
Rakendades integraalarvutuse keskväärtusteoreemi, saame ülesande väitele tuginedes

$$R_0(f) = \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-x_0)^2 dx = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi).$$

Selliselt oleme saanud valemi

$$\int_a^b f(x)\, dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi),$$

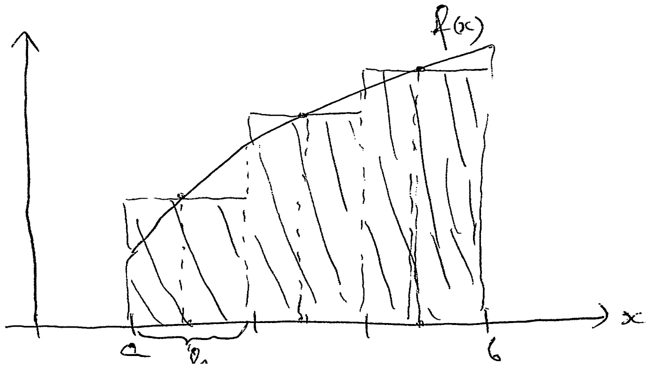
mida nimetatakse ristkülikvalemiks. Tema nimetus tuleb sellest, et geomeetriliselt tähendab kvadratuursumma ristküliku pindala, mis asendab integraali.



Liitvalem tuleb siin kujul

$$\int_a^b f(x)\, dx = h\left(f\left(a+\frac{h}{2}\right) + f\left(a+\frac{3}{2}h\right) + \ldots + f\left(b-\frac{h}{2}\right)\right) + \frac{(b-a)^3}{24 n^2} f''(\xi).$$

Geomeetriliselt tähendab kvadratuursumma liitvalemis ristkülikute pindalade summat.



On selge, et ristkülikvalemis kvadratuursumma koondub integraaliks iga Riemanni mõttes integreeruva funktsiooni korral, sest kvadratuursumma on ise integraalsumma.

Ülesanne. Kas trapetsvalem, Simpsoni valem, Newtoni $\frac{3}{8}$-valem, ristkülikvalem (liitvalemid) on interpolatsioonitüüpi?

§ 4. Kvadratuurvalemi jäänuksliikme peaosa

Vaatleme kvadratuurvalemeid

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R_h(f),$$

kus $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$, $A_i = A_{ni}$ ja peame silmas protsessi, kus n ja h muutuvad nii, et $n \to \infty$ ja $h \to 0$.

Definitsioon. Kui küllalt sileda funktsiooni f korral $R_h(f) = K(f)h^q + \rho_h(f)$, kus $\rho_h(f) = O(h^{q+1})$, $K(f)$ on konstant, mis ei sõltu arvust h, kusjuures eksisteerib sile funktsioon f nii, et $K(f) \neq 0$, siis osa $K(f)h^q$ nimetatakse jäänuksliikme peaosaks.

Leiame näiteks trapetsvalemi jäänuksliikme peaosa. Eespool nägime, et $R_h(f) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{h^3}{12} f''(\xi_i)$, kus $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$. Kasutame siin Taylori arendust $f''(\xi_i) = f''(x_{i-1} + \frac{h}{2}) + f'''(\eta_i)(\xi_i - (x_{i-1} + \frac{h}{2}))$, $\eta_i \in (x_{i-1} + \frac{h}{2}, \xi_i)$ või $\eta_i \in (\xi_i, x_{i-1} + \frac{h}{2})$. Siin

$$R_h(f) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{h^3}{12}\left(f''\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right) + f'''(\eta_i)\left(\xi_i-\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right)\right)\right)$$ ja selles

avaldises $\sum_{i=1}^{n} \frac{h^3}{12} f''\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right) = \frac{h^2}{12}\sum_{i=1}^{n} h f''\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right)$,

milles tunneme ära ristkülikvalemi kvadratuursumma (teguriga $\frac{h^2}{12}$). Seepärast

$$\sum_{i=1}^{n} h f''\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right) = \int_a^b f''(x)\,dx - \frac{b-a}{24} h^2 f^{IV}(\xi)$$

ja näiteks $f\in C^4[a,b]$ korral saame $R_h(f)$ osast

$$-\sum_{i=1}^{n} \frac{h^3}{12} f''\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right) = -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)\,dx + O(h^4).$$ Ülejäänud $R_h(f)$ osas $\left|\xi_i-\left(x_{i-1}+\frac{h}{2}\right)\right| \le \frac{h}{2}$ ning terve see osa on järguga $O(h^3)$. Niisiis, $R_h(f) = -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)\,dx + O(h^3)$, mis tähendab, et trapetsvalemis $q=2$ ja

$$K(f) = -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)\,dx = \frac{1}{12}\left(f'(a)-f'(b)\right).$$

<u>Ülesanne</u>. Leida Simpsoni valemi ja Newtoni $\frac{3}{8}$-valemi jääkliikme peaosad.

Jääkliikme peaosa mõistet saab kasutada ka ristkülikvalemi korral, kus üldisemalt võib vaadelda valemeid

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) + R_h(f),$$

$h = \frac{b-a}{n}$, $x_i = x_1 + (i-1)h$, $i=2,\dots,n$, seejuures $x_i\in[a,b]$, $i=1,\dots,n$, ning $A_i = A_{ni}$.

Ülesanne. Leida ristkülikvalemi jääkliikme peaosa.

§ 5. Runge meetod

Vaatleme eelmise paragrahvi situatsiooni, kus jääkliikmes on välja eraldatud peaosa ehk $R_h = Kh^q + \rho_h$, $\rho_h = O(h^{q+1})$. Kasutame integraali tähistamiseks sümbolit I ja kvadratuursumma olgu I_h sammu h korral. Siis $I = I_h + R_h$.

Oletame, et sama integraali leidmiseks kasutatakse kvadratuurvalemit kahe erineva sammu h ja H korral, mis muidugi tähendab, et ka sõlmede arv on erinev. Sellel juhul

$$R_h = Kh^q + \rho_h = I - I_h,$$

$$R_H = KH^q + \rho_H = I - I_H$$

ning lahutades saame

$$K(H^q - h^q) + \rho_H - \rho_h = I_h - I_H,$$

$$K = \frac{I_h - I_H}{H^q - h^q} + \frac{\rho_h - \rho_H}{H^q - h^q}.$$

Selle abil

$$R_h = Kh^q + \rho_h = \frac{I_h - I_H}{\left(\frac{H}{h}\right)^q - 1} + \frac{\rho_h - \rho_H}{\left(\frac{H}{h}\right)^q - 1} + \rho_h.$$

Vaatame edasi juhtu, kus $H = kh$, $k = \mathrm{const} > 1$. Siis

$$R_h = \frac{I_h - I_H}{k^q - 1} + \frac{\rho_h - \rho_H}{k^q - 1} + \rho_h .$$

Seejuures $\rho_H = O(H^{q+1}) = O((kh)^{q+1}) = O(h^{q+1})$, seega

$$\frac{\rho_h - \rho_H}{k^q - 1} + \rho_h = O(h^{q+1})$$

ning

$$R_h = \frac{I_h - I_H}{k^q - 1} + O(h^{q+1}).$$

Siit on näha, et jääkliikme ligikaudne väärtus on $\dfrac{I_h - I_H}{k^q - 1}$, sest see on sama jäägi peaosaga Kh^q. Levinuim arvutustes kasutatav juht on $k = 2$, siis on jääkliikme ligikaudne väärtus $\dfrac{I_h - I_{2h}}{2^q - 1}$. Näiteks trapetsvalemi korral $q = 2$ ning $R_h \approx \dfrac{I_h - I_{2h}}{3}$, Simpsoni ja Newtoni $\frac{3}{8}$-valemi korral $q = 4$ ning $R_h \approx \dfrac{I_h - I_{2h}}{15}$. Rõhutame, et Runge meetodil leitakse jääkliikme ligikaudne väärtus, mis võib olla positiivne või negatiivne.