

Numbrilised meetodid

Peeter Oja

Tartu 2017

Sisukord

Sissejuhatus	4
Lühiülevaade vigadest	5
1 Vigade liigid	5
2 Arvu absoluutne ja relatiivne viga	6
3 Funktsiooni väärtuse vea leidmine	6
4 Funktsiooni argumentide vigade leidmine.	8
5 Vigade ümardamine.	8
1 Võrrandite lahendamine	9
Sissejuhatus	9
1 Harilik iteratsioonimeetod	10
1 Meetodi kirjeldus ja koonduvusteoreem.	10
2 Geomeetriline tõlgendus.	12
3 Hariliku iteratsioonimeetodi käitumine lahendi ümbruses. . .	13
4 Näited.	14
2 Newtoni meetod	15
1 Meetodi kirjeldus.	15
2 Newtoni meetodi koonduvuskiirus.	16
3 Newtoni meetodi koonduvuskiirus kordse lahendi korral. . .	17
4 Newtoni meetodi geomeetriline tõlgendus.	18
5 Modifitseeritud Newtoni meetod.	19
6 Näited.	20
3 Teisi iteratsioonimeetodeid	20
1 Lõikajate meetod.	20
2 Lõikajate meetodi koonduvuskiirus.	21
3 Steffenseni meetod.	23
4 Mülleri meetod.	25
5 Kõrgemat järku iteratsioonimeetodid.	25
2 Võrrandisüsteemide lahendamine	28
1 Harilik iteratsioonimeetod	29

2	Seideli meetod	31
3	Newtoni meetod	32
4	Lineaarsete võrrandisüsteemide lahendamine	34
1	Iteratsioonimeetodite vajalikkusest.	34
2	Harilik iteratsioonimeetod, koonduvustingimused.	36
3	Jacobi meetod.	37
4	Seideli meetod.	40
5	Gauss–Seideli meetod.	42
6	Richardsoni meetod.	43
3	Funktsioonide lähendamine	46
1	Interpoleerimisülesanne	46
1	Ülesande püstitus.	46
2	Interpolandi olemasolu ja ühesus.	46
3	Lagrange'i fundamentaalpolünoomid.	48
4	Lagrange'i interpolatsioonivalem.	49
5	Diferentssuhted.	50
6	Newtoni interpolatsioonivalem	52
7	Interpolatsioonivalemi jääkliige	53
8	Interpolatsiooniprotsessi koondumisest.	55
9	Mitme muutuja funktsioonide interpoleerimine.	56
2	Funktsioonide lähendamine vähimruutude meetodil	59
1	Lineaarsete süsteemide lahendamine vähimruutude meetodil.	59
2	Funktsioonide lähendamine vähimruutude meetodil.	62
3	Näide: polünoomidega lähendamine vähimruutude meetodil.	62
3	Numbriline diferentseerimine	63
1	Numbrilise diferentseerimise valemid võrdsete vahemikega sõlmede korral.	64
2	Vigade mõju numbrilisel diferentseerimisel.	65
3	Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus.	66
4	Numbriline integreerimine	70
	Sissejuhatas	70
1	Interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemid	72
2	Newton–Cotesi valemid	74
1	Newton–Cotesi valemite kordajate omadused.	74
2	Newton–Cotesi valemite jääkliige.	76
3	Trapetsvalem, Simpsoni valem, Newtoni $\frac{3}{8}$ –valem,	77
4	Kvadratuurvalemi jääkliikme peaosas	84
5	Runge meetod	85

Sissejuhatus

Looduse uurimisel kasutatakse arvutusmeetoteid järgmise skeemi kohaselt:

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

2) koostatakse matemaatiline mudel. Need on näiteks funktsioon, võrrand (võrrandisüsteem), diferentsiaalvõrrand (sealhulgas harilik või osatuletistega) ja selle algingimustega ülesanne või rajaülesanne, integraalvõrrand, juhuslik protsess, optimeerimisülesanne. 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

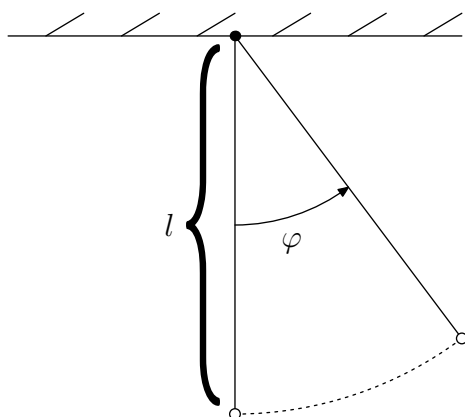
Lühiülevaade vigadest

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.

1. Vigade liigid

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



Näide. 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 võrrandsüsteemi lahendamine determinantide meetodil. Käesolev kursus käsitleb just ligikaudseid meetodeid ja selgub, et need on palju suurema praktilise tähtsusega kui 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 reaali- 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 kuitahes väikeseks (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 $A = a + \Delta a$.

Definitsioon 1. Ligikaudse arvu a absoluutseks veaks nimetatakse suvalist arvu $\Delta > 0$, mis rahuldab võrratust $|A - a| \leq \Delta$ ehk $|\Delta a| \leq \Delta$.

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

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

Definitsioon 2. Ligikaudse arvu a relatiivseks veaks nimetatakse suvalist arvu $\delta > 0$, mis rahuldab võrratust $\left| \frac{\Delta a}{a} \right| \leq \delta$ ehk $|\delta a| \leq \delta$.

Kui Δ on teada, siis võib võtta $\delta = \frac{\Delta}{|a|}$. 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 $A \neq 0$ ja $a \neq 0$ 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 $X_i = x_i + \Delta x$, $|\Delta x_i| \leq \Delta_i$, $i = 1, \dots, n$. Siis

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

kus viimane võrdus tähendab Tayloriga 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

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

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

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

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

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

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 ligikaudsusest erinevalt üldjuhust) ja kehtivad igasuguste (mitte ainult väikeste) vigade korral.

2) tõestada, et kui liidetavad on sama märgiga, siis $\delta_u \leq \max_{1 \leq i \leq n} \delta_i$ ehk summa relatiivne viga ei ületa liidetavate relatiivsetest vigadest maksimaalset. Ka siin kehtib väide suvaliste vigade korral.

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 m²?

Loomulikul eeldusel, et põrand on ristküliku kujuline, on pindala arvutatav $S = ab$, $a = 3$, $b = 4$, seejuures 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

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

5. Vigade ümardamine.

Funktsiooni väärtuse viga tuleb ümardada üles, argumentide vead alla. Selgitame seda põhimõtet järgmiselt. Eelnevas kahes punktis kasutatud tähistusi silmas pidades tähendab argumentide ja funktsiooni väärtuse vigade vahekord järgmist:

$$\begin{aligned} X_i &\in [x_i - \Delta_i, x_i + \Delta_i], \quad i = 1, \dots, n \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad u(X_1, \dots, X_n) &\in [u(x_1, \dots, x_n) - \Delta_u, u(x_1, \dots, x_n) + \Delta_u] \end{aligned}$$

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

I Võrrandite lahendamine

Sissejuhatus

Tuntumad on algebralised võrrandid

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n = 0, \quad a_0 \neq 0.$$

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) algühendite komplekt $x_0, \dots, x_k$ (võib olla ka üks algühend x_0). Seejärel leitakse järkjärgult järgmised lähendid

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

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 koonu, ei ole mõtet seda jada lahendi ligikaudseks leidmiseks kasutada.

Näide, lõigu poolitamise meetod. Olgu vaatluse all funktsioon $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, 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 väärtused vastandmärgilised, jne. Leiab aset hinnang $|x_n - x^*| \leq \frac{b-a}{2^{n-1}} \rightarrow 0$, kui $n \rightarrow \infty$. See tähendab, et viga $\left(\frac{b-a}{2^{n-1}}\right)$ on absoluutne viga, $|x_u - x^*|$ on tõelise vea absoluutväärtus) kahaneb geomeetrilises progressioonis teguriga $\frac{1}{2}$, mida praktika seisukohalt loetakse aeglaseks.

§1. Harilik iteratsioonimeetod

1. Meetodi kirjeldus ja koonduvusteoreem.

Olgu antud võrrand

$$x = g(x). \quad (1.1)$$

Harilikus iteratsioonimeetodis on vaja ühte alglähendit x_0 , seejärel leitakse

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

Teoreem 3 (koonduvusteoreem). *Olgu*

1) $g: [a, b] \rightarrow [a, b]$, 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 $|g(x_1) - g(x_2)| \leq q|x_1 - x_2|$ $\forall x_1, x_2 \in [a, b]$, $x_1 \neq x_2$, korral.

S siis võrrandil (1.1) on lõigus $[a, b]$ parajasti üks lahend x^* , iga $x_0 \in [a, b]$ korral $x_n \rightarrow x^*$, kehtib hinnang

$$|x_n - x^*| \leq \frac{q^n}{1 - q} |x_0 - x_1|. \quad (1.2)$$

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

$$\begin{aligned} |x_n - x_{n+1}| &= |g(x_{n-1}) - g(x_n)| \leq q|x_{n-1} - x_n| \leq \\ &\leq q^2|x_{n-2} - x_{n-1}| \leq \dots \leq q^n|x_0 - x_1|. \end{aligned}$$

Seejärel

$$\begin{aligned} |x_n - x_{n+p}| &\leq |x_n - x_{n+1}| + |x_{n+1} - x_{n+2}| + \dots + |x_{n+p-1} - x_{n+p}| \leq \\ &\leq q^n|x_0 - x_1| + \dots + q^{n+p-1}|x_0 - x_1| \leq \\ &\leq \left(\sum_{k=n}^{\infty} q^k \right) |x_0 - x_1| = q^n(1 + q + \dots)|x_0 - x_1| = \\ &= \frac{q^n}{1 - q} |x_0 - x_1| \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (1.2')$$

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

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

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

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

Jääb tõestada võrratus (1.2), see aga järeldub võrratusest (1.2'), kus teostame piirile mineku $p \rightarrow \infty$, siis $x_{n+p} \rightarrow x^*$, $x_n - x_{n+p} \rightarrow x_n - x^*$, $|x_n - x_{n+p}| \rightarrow |x_n - x^*|$.

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

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

Tõestuseks 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 $|g'(\xi)| \leq q < 1$.

Ülesanne 1. Olgu võrrandil $x = g(x)$ lahend x^* ning funktsioon 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^* .

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

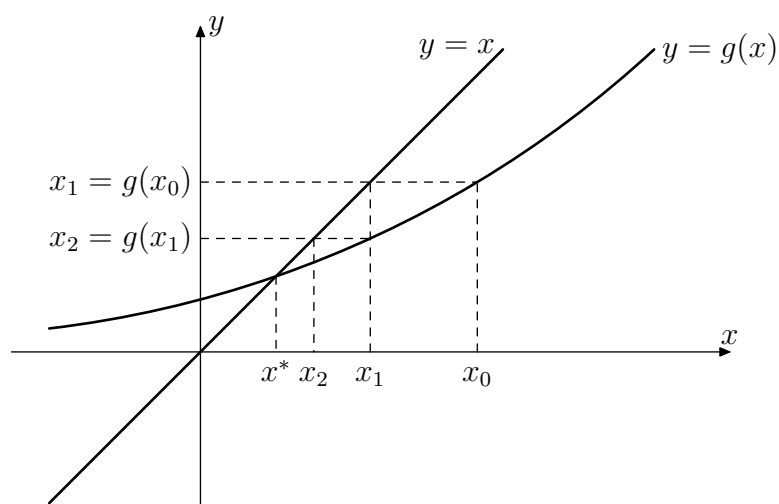
Ülesanne 3. Leida näide funktsioonist $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, kus $|g(x_1) - g(x_2)| < |x_1 - x_2| \ \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}, x_1 \neq x_2$, aga võrrandil $x = g(x)$ ei ole lahendit.

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

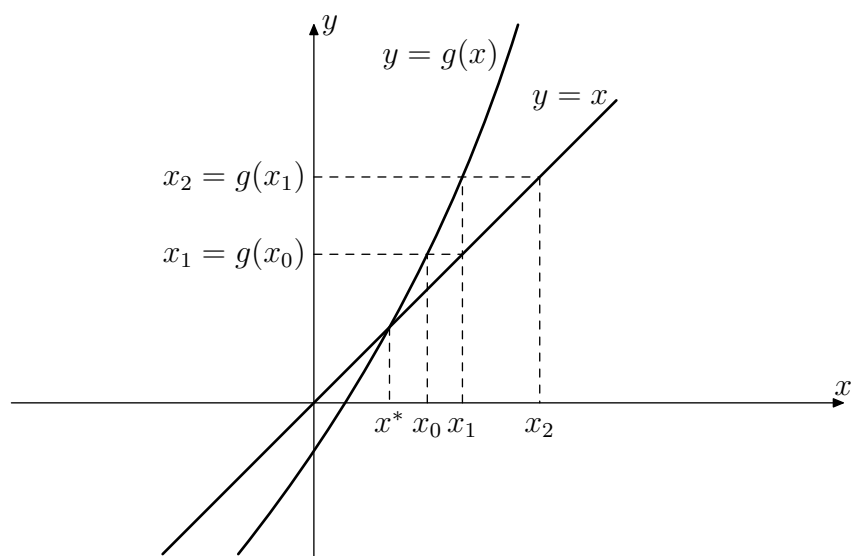
Märkus. Kui $g: [a, b] \rightarrow [a, b]$ ja $|g(x_1) - g(x_2)| < |x_1 - x_2| \ \forall x_1, x_2 \in [a, b], x_1 \neq x_2$, siis on olemas $x^* \in [a, b]$ nii, et $x^* = g(x^*)$.

2. Geomeetriline tõlgendus.

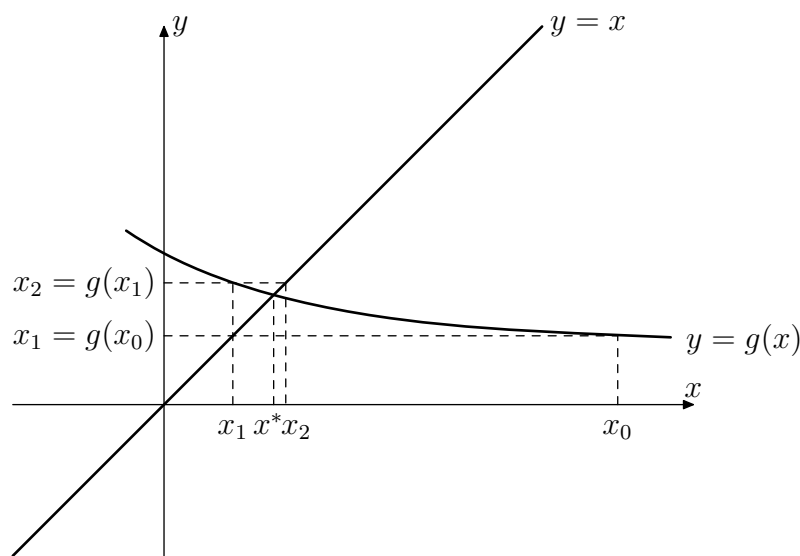
Esitame hariliku iteratsioonimeetodi käitumist iseloomustavad joonised.



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



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



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

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

3. Hariliku iteratsioonimeetodi käitumine lahendi ümbruses.

Eeldame, et funktsioon g on pidevalt diferentseeruv. Olgu x^* võrrandi (1.1) lahend, s.t. $x^* = g(x^*)$. Olgu leitud iteratsioonijada x_n eeskirja $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, \dots$ 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 $x^* > x_n$. 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 $g'(x^*) = 0$, siis koondub harilik iteratsioonimeetod kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist, mis tähendab, et iga $q > 0$ korral $\frac{|x_n - x^*|}{q^n} \rightarrow 0$, kui $n \rightarrow \infty$ (mõeldud on siin kui tahes väikseid q väärtusi).

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

Kui $|g'(x^*)| > 1$, siis harilik iteratsioonimeetod ei koondunud 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 (1.1), esitame siin kaks võimalust kujule (1.1) 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 väita koondumist või seda välistada. Tegelikult see meetod ei koondunud, sest iteratsiooniprotsessis tekib vahelduvate elementidega jada $x_1 = \frac{a}{x_0}, x_2 = x_0, x_3 = \frac{a}{x_0}, x_4 = x_0, \dots$

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.

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

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

Sellise hinnanguga koondumist nimetatakse m -järku koondumiseks, $m = 2$ korral ruutkoondumiseks, $m = 3$ korral kuupkoondumiseks. Üldisemalt, hinnangu $|x_{n+1} - x^*| \leq \text{const} |x_n - x^*|^\alpha, \alpha > 1$, korral räägitakse astmelisest koondumisest, see 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

$$f(x) = 0, \quad (1.3)$$

mille juures eeldame, et f on diferentseeruv. Newtoni meetodis antakse ette alglahend 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 (1.3) on teisendatud kujule

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

seejuures g on määratud funktsiooni f määramispiirkonna punktides, kus $f'(x) \neq 0$. Seepärast on rakendatavad hariliku iteratsioonimeetodi korral saadud tulemused.

Ülesanne 9. Tõestada, et kui f on kaks korda pidevalt diferentseeruv, $f(x^*) = 0$ (s.t. x^* on võrrandi (1.3) lahend) ja $f'(x^*) \neq 0$, siis vastava funktsiooni g korral $g'(x^*) = 0$, mis tähendab, et Newtoni meetod koondub kiiremini igast geomeetrisest progressioonist.

Ülesanne 10. 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 (1.3) lahendamisel on x_n leitud (sealhulgas võib x_n osas olla x_0). Tayloriga valemil põhjal

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

Võrrand (1.3) 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

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

selle 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.

Elmises punktis olid ülesannetes näidatud hariliku iteratsioonimeetodi teooriat kasutades saadavad tulemused Newtoni meetodi koonduvuskiiruse kohta. Siin näitame, et nendes 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 $\xi_n \in (x^*, x_n)$, 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 $x_n \rightarrow x^*$, siis $\xi_n \rightarrow x^*$, $f'(\xi_n) \rightarrow f'(x^*) \neq 0$, $f'(x_n) \rightarrow f'(x^*)$, mistõttu $1 - \frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)} \rightarrow 0$. Niisiis, $|\varepsilon_{n+1}| = q_n|\varepsilon_n|$, kus $q_n \rightarrow 0$. See tähendab koondumist kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist. Tulemuse olulisuse rõhutamiseks sõnastame selle eraldi.

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

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

$$\left|1 - \frac{f'(\xi_n)}{f'(x_n)}\right| = \left|\frac{f'(x_n) - f'(\xi_n)}{f'(x_n)}\right| \leq \frac{L|x_n - \xi_n|}{|f'(x_n)|} \leq \frac{L|\varepsilon_n|}{\frac{1}{2}|f'(x^*)|} = \text{const}|\varepsilon_n|,$$

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

Lause. 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 $f'(x) - f'(y) = f''(\xi)(x - y)$, $\xi \in (x, y)$.

3. Newtoni meetodi koonduvuskiirus kordse lahendi korral.

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

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

arendame $f(x_n)$ ja $f'(x_n)$ Tayloriga väärtusi punkti x^* lähedal, saades

$$\begin{aligned} f(x_n) &= f(x^*) + f'(x^*)(x_n - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2!}(x_n - x^*)^2 + \dots + \frac{f^{(m)}(\xi_n)}{m!}(x_n - x^*)^m = \\ &= \frac{f^{(m)}(\xi_n)}{m!}\varepsilon_n^m, \quad \xi_n \in (x_n, x^*), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f'(x_n) &= f'(x^*) + f''(x^*)(x_n - x^*) + \dots + \frac{f^{(m)}(\eta_n)}{(m-1)!}(x_n - x^*)^{m-1} = \\ &= \frac{f^{(m)}(\eta_n)}{(m-1)!}\varepsilon_n^{m-1}, \quad \eta_n \in (x_n, x^*). \end{aligned}$$

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

Lause. 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

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

kus m on lahendi kordsus.

Ülesanne 11. Näidata, et kui $f^{(m)}$ on pidev, siis Newton–Schröderi meetod koonduv kiiremini igast geomeetrilisest progressioonist, kui aga $f^{(m)}$ rahuldab Lipschitzi tingimust, siis Newton–Schröderi meetod on ruutkoonduvusega.

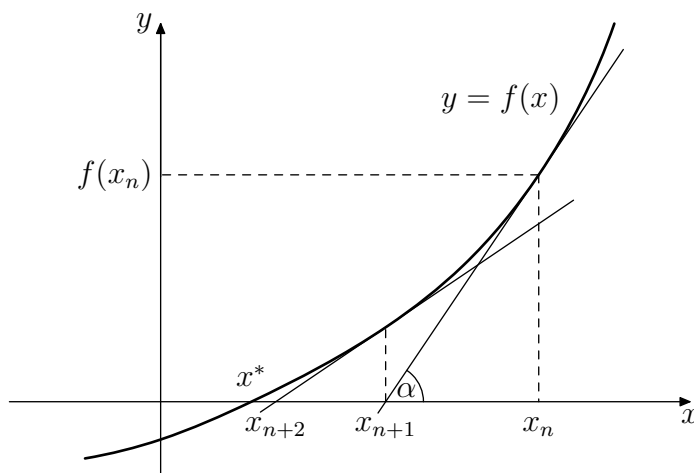
Loomulik on küsida, kuidas saab leida Newton–Schröderi meetodis kasutatavat lahendi kordsust, lähtudes algselt antud võrrandist (1.3) ehk funktsioonist f , sest lahend x^* ei ole teada (seda praktikas ei leita, leitakse selle lähisväärtus) ja ei saa leida f tuletisi kohal x^* .

Ülesanne 12. Tõestada, et m -kordse lahendi puhul, kui x_n on leitud Newtoni meetodiga, siis $\frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} \rightarrow 1 - \frac{1}{m}$ ja $\frac{x_n - x_{n-1}}{-x_{n+1} + 2x_n - x_{n-1}} \rightarrow m$.

Niisiis võib alustada lahendamist Newtoni meetodiga ja kui mõningase 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 liigume vertikaalselt graafikuni, tõmbame sellele seal puutuja ja veendume 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

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

Esitatud joonisel $f'(x) > 0$, $f''(x) > 0$, $x_n > x^*$.

Ülesanne 13. 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 $x_n < x^*$. Kanda joonisele vähemalt kolm järjestikust lähendit x_n, x_{n+1}, x_{n+2} .

Ülesanne 14. 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 koonu;
- c) võrrandil $f(x) = 0$ on lahend olemas, kõik jada x_n liikmed on Newtoni meetodil leitavad, jada x_n on tõkestatud, aga ei koonu.

Geomeetrilist tõlgendust aluseks võttes nimetatakse Newtoni meetodit veel puutujate meetodiks.

5. Modifitseeritud Newtoni meetod.

Modifitseeritud Newtoni meetodi arvutuseeskiri võrrandi (1.3) lahendamisel on

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

s.t. igal sammul kasutatakse alglähendil x_0 leitud tuletist $f'(x_0)$. Võttes siin $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x_0)}$, näeme, et modifitseeritud Newtoni meetod on hariliku 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 võrrandit $f(x) = x^2 - a = 0$. 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 hariliku iteratsioonimeetodi käsitlemisest, teame, et ta on ruutkoonduvusega. Meetod koondub iga alglähendi $x_0 \neq 0$ korral.

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

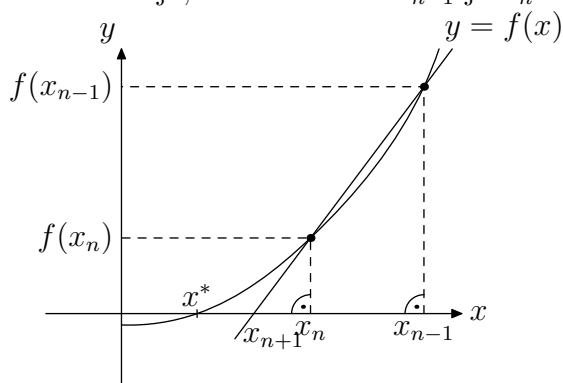
$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 - a}{3x_n^2} = \frac{1}{3} \left(2x_n + \frac{a}{x_n^2} \right).$$

Ülesanne 15. Kui palju on näites 2) alglähendeid ja millised need on, kus Newtoni meetod ei koonu? 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 ja x -telje lõikepunkti esimene koordinaat olgu x_2 . Sama protseduuri kordame lähenditega x_1, x_2 , jne. Tuletame arvutuseeskirja, kus 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

$$\begin{aligned} f(x_{n-1})(x_n - x_{n+1}) &= f(x_n)(x_{n-1} - x_{n+1}), \\ (f(x_n) - f(x_{n-1}))x_{n+1} &= x_{n-1}f(x_n) - x_nf(x_{n-1}), \\ x_{n+1} &= \frac{x_{n-1}f(x_n) - x_nf(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}, \end{aligned}$$

mida võibki kasutada x_{n+1} leidmiseks. Kirjutades lugejasse $\pm x_nf(x_n)$, 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 järjekordse 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 $x_n \rightarrow x^*$ vähemalt geomeetrilise progressiooni kiirusega, s.t. $|x_{n+1} - x^*| \leq q|x_n - x^*|$, $q < 1$. Eesmärgiks on leida, milline on tegelik meetodi koonduvusjärk.

Lähtume võrdusest

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

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

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

mida asume vigade põhivahekorranäitajana uurima. Selle parema poole lugejas kasutame Tayloriga 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 põhivahekorras

$$\begin{aligned} \text{lugeja} &= \frac{1}{2}f''(x^*)\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}) + \\ &+ \frac{1}{6}f'''(\xi_n)\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n^2 - \varepsilon_{n-1}^2) + \\ &+ \frac{1}{6}\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(f'''(\xi_n) - f'''(\xi_{n-1}))\varepsilon_{n-1}^2. \end{aligned}$$

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 $\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1} \rightarrow 0$, kusjuures $f'''(\xi_n)$ on tõkestatud f küllaldase sileduse korral. Viimases 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 $f^{IV}(\bar{\xi}_n)$ tõkestatud. Kui x_{n-1} ja x_n on erineval pool lahendist x^* , näiteks $x_{n-1} < x^* < x_n$, siis $x_{n-1} < \xi_{n-1} < x^* < \xi_n < x_n$ ja $|\xi_n - \xi_{n-1}| \leq |x_{n-1} - x_n| = |\varepsilon_{n-1} - \varepsilon_n|$ ja viimase liidetava kiirem koonduvus pealiikmega võrreldes lugeja esituses 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 $|\xi_n - \xi_{n-1}| \leq |x_{n-1} - x^*|$. Kuid $|x_{n-1} - x^*| \leq |x_{n-1} - x_n| + |x_n - x^*| \leq |x_{n-1} - x_n| + q|x_{n-1} - x^*|$,

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

mille abil

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

ja ka sellel juhul on saadud viimase liidetava kiirem koonduvus kui pealiikmel. Niisiis, põhivahekorras lugeja $\approx \frac{1}{2}f''(x^*)\varepsilon_{n-1}\varepsilon_n(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$. Analoogiliselt toimime vigade põhivahekorras 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

$$\begin{aligned} \text{nimetaja} &= f'(x^*)(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}) + \frac{1}{2}f''(\eta_n)(\varepsilon_n^2 - \varepsilon_{n-1}^2) + \\ &+ \frac{1}{2}(f''(\eta_n) - f''(\eta_{n-1}))\varepsilon_{n-1}^2. \end{aligned}$$

Ka siin on teine liidetav kiiremini koonduv kui esimene 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 $|\eta_n - \eta_{n-1}| \leq \frac{1}{1-q} |\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}|$. Seepärast põhivahekorras 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 tähistasime $a = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$.

Otsime võrrandile $\varepsilon_{n+1} = a\varepsilon_n\varepsilon_{n-1}$ lahendit, kus $\varepsilon_n \rightarrow 0$ ja $|\varepsilon_{n+1}| = b|\varepsilon_n|^\alpha$, milles meid huvitab eelkõige koonduvusjärk α . Siis $|\varepsilon_n| = b|\varepsilon_{n-1}|^\alpha$ ja $|\varepsilon_{n+1}| = b|\varepsilon_n|^\alpha = b(b|\varepsilon_{n-1}|^\alpha)^\alpha = b^{1+\alpha}|\varepsilon_{n-1}|^{\alpha^2}$. Teiselt poolt, $|\varepsilon_{n+1}| = |a\varepsilon_n\varepsilon_{n-1}| = |a|(b|\varepsilon_{n-1}|^\alpha)|\varepsilon_{n-1}| = |a|b|\varepsilon_{n-1}|^{\alpha+1}$, 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 $\varepsilon_n \rightarrow 0$, seepärast sobib ainult $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1,618\dots$ ja sel juhul muidugi leiab aset koondumine $\varepsilon_n \rightarrow 0$ hinnanguga

$$|x_{n+1} - x^*| \leq \text{const} |x_n - x^*|^{1,618\dots}.$$

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 võimalus siin koonduvust kiirendada. Meetodi kirjeldamiseks on mitu võimalust.

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

$$\tilde{x}_2 = x_2 - \frac{(x_2 - x_1)^2}{x_2 - 2x_1 + x_0} = \frac{x_0x_2 - x_1^2}{x_2 - 2x_1 + x_0}.$$

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 kirjeldada

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

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

$$\begin{aligned} f(x_0) &= x_0 - g(x_0) = x_0 - x_1, \\ f(x_1) &= x_1 - g(x_1) = x_1 - x_2, \end{aligned}$$

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

Seega saab Steffenseni meetodit esitada

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

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

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

ehk

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

Uurime meetodi koondumiskiirust hariliku iteratsioonimeetodi kohta saadud tulemusi kasutades ja kolmandat meetodi kirjeldust 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 $\varphi'(x^*) = \lim_{x \rightarrow x^*} \frac{\varphi(x) - \varphi(x^*)}{x - x^*}$. Lagrange'i valemi põhjal

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

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

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{xg(g(x)) - xg(x) + xg(x) - (g(x))^2}{g(g(x)) - g(x) - (g(x) - x)} = \\ &= \frac{xg'(\xi)(g(x) - x) - g(x)(g(x) - x)}{(g'(\xi) - 1)(g(x) - x)} = \\ &= \frac{xg'(\xi) - g(x)}{g'(\xi) - 1}, \end{aligned}$$

mille saamisel kasutame asjaolu $g(x) \neq x$, kui $x \neq x^*$, mis kehtib, kui x on x^* küllalt väikeses ümbruses, ning arvestada tuleb veel tingimust $g'(x^*) \neq 0$. Kasutades veel

asendust $g(x) = g(x^*) + g'(\xi_1)(x - x^*)$, $\xi_1 \in (x, x^*)$, milles asendame $g(x^*)$ arvuga x^* , saame

$$\begin{aligned}\varphi(x) - \varphi(x^*) &= \frac{xg'(\xi) - g(x)}{g'(\xi) - 1} - x^* = \\ &= \frac{xg'(\xi) - x^* - g'(\xi_1)(x - x^*) - x^*g'(\xi) + x^*}{g'(\xi) - 1} = \\ &= \frac{(g'(\xi) - g'(\xi_1))(x - x^*)}{g'(\xi) - 1}.\end{aligned}$$

Nüüd

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

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

Ülesanne 16. 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 paari-kaupa erinevad, s.t. $x_0 \neq x_1, x_1 \neq x_2, x_2 \neq x_0$. On olemas parajasti üks polünoom $P(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$, mis rahuldab tingimusi $P(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2$, ehk tema graafik kui 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 $c_0 + c_1x_i + c_2x_i^2 = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2$, 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 graafiku kahe punkti sirge, mis on esimese astme polünoomi graafik.

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

5. Kõrgemat järku iteratsioonimeetodid.

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

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

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

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

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 jääkliikme 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 17. Eeldades, et lahend on ühekordne, tuletada eeskiri lähendi x_{n+1} leidmiseks (määrata, kumb ruutvõrrandi lahend tuleb võtta), kui x_n 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. korru-tises $(x - x_n)(x - x_n)$ asendame 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.

Ülesanne 18. Tõestada, et nii Euler–Tšebõšovi kui ka Halley meetod on kuup-koonduvusega, 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 $\varepsilon_n = |x_n - x^*|$, siis kuupkoonduvuse korral $\varepsilon_n \sim 10^{-1}$ annab $\varepsilon_{n+1} \sim 10^{-3}$, $\varepsilon_{n+2} \sim 10^{-9}$, ruutkoonduvuses 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 võrrandisüsteeme

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

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

[illegible]

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 igat võrrandit.

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

$$\begin{aligned} \|x\|_2 &= (x_1^2 + \cdots + x_n^2)^{\frac{1}{2}}, \\ \|x\|_1 &= |x_1| + \cdots + |x_n|, \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, \end{aligned}$$

lisaks veel $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$, $1 \leq p < \infty$. Seejuures iga $x \in \mathbb{R}^n$ korral $\lim_{p \rightarrow \infty} \|x\|_p = \|x\|_\infty$. Juhul $n = 1$ on kõik äsjakirjeldatud normid $|x|$.

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

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

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

Teoreem 4 (harilikku iteratsioonimeetodi koondusteoreem). *Kui 1) $G: B \rightarrow B$ ja 2) $\exists q < 1$ nii, et $\|G(x) - G(y)\| \leq q\|x - y\|$ igasuguste $x, y \in B$, $x \neq y$, 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 ($x^m \rightarrow x^*$), kehtib hinnang*

$$\|x^m - x^*\| \leq \frac{q^m}{1-q} \|x^0 - x^1\|.$$

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

Täiendus. 1. Teoreemis tehtud eelduste asemel võib eeldada, et $\|G(x) - G(y)\| \leq q\|x - y\|$ igasuguste $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \neq y$, korral (muidugi siis $G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$). Põhjenduseks märgime, et põhivariandi tõestuses tuleb kera B asemel kõikjal vaadelda tervet ruumi $\mathbb{R}^n$.

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

Järgnevas püüame leida piisavaid tingimusi funktsiooni G ahendavuseks, pidades silmas $n = 1$ korral tuletise kaudu esitatuid. Funktsiooni G diferentseeruvus (selle definitsiooni me siin ei esita) on samaväärne funktsioonide g_i , $i = 1, \dots, n$, diferentseeruvusega (kui n muutuja funtsioonide 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 $G(x) - G(y) = G'(\varepsilon)(x - y)$ 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 $\|G'(x)\| \leq q < 1$, on vaja selgitada, mis on maatriksi norm ja kuidas seda leetakse.

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

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

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

$$\|A\|_{2 \rightarrow 2} \leq \left(\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Ülaltoodud väidetele tuginedes saame järgmised tulemused:

- 1) kui $\max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \leq q < 1 \quad \forall x \in B = \{x: \|x - a\|_\infty \leq r\}$, siis G on ahendav kehas B ∞ -normi suhtes;

- 2) kui $\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \leq q < 1 \quad \forall x \in B = \{x: \|x - a\|_1 \leq r\}$, siis G on ahendav kehas B 1-normi suhtes;
- 3) kui $\sum_{i,j=1}^k \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right)^2 \leq q < 1 \quad \forall x \in B = \{x: \|x - a\|_2 \leq r\}$, siis G on ahendav keras B 2-normi suhtes.

§2. Seideli meetod

Vaatleme süsteemi $x = G(x)$ ehk

[illegible]

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

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

Niis 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.

Teoreem 5. Kehtigu $\|G(x) - G(y)\|_\infty \leq q \|x - y\|_\infty$ ($q < 1$) iga $x, y \in B$, $x \neq y$, korral, kus $B = \{x: \|x - a\|_\infty \leq r\}$, ning $\|G(a) - a\|_\infty \leq (1 - q)r$. Siis süsteemil $x = G(x)$ on keras B olemas parajasti üks lahend x^* , Seideli meetod koondub selleks lahendiks iga algühendi $x^0 \in B$ korral, kehtib hinnang

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

Tõestus. 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 olukorras väidet sisaldav

Ülesanne 19. Olgu $G: B \rightarrow B$, $B = \{x: \|x - a\|_\infty \leq r\}$, $x^{m,i}$ 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.

Ülesanne 20. Tõestada, et teoreemi eeldustel kehtib võrratus $\|x^{m+1} - x^*\|_\infty \leq q \|x^m - x^*\|_\infty$.

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

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

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

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

On loomulik küsida hariliku iteratsioonimeetodi ja Seideli meetodi võrdluse kohta: kumb neist on parem? Põhiküsimusele koondumise kohta anname vastuse hiljem. Arvutuste teostamise seisukohalt on aga hariliku iteratsioonimeetodi eelis see, et 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 tutvusime võrrandite korral, aga teda saab rakendada ka võrrandisüsteemide lahendamisel. Newtoni meetod on vaadeldav hariliku iteratsioonimeetodina, kuid tema põhiidee on teine: süsteemi asendamine lähedase lineaarse süsteemiga.

Antud on süsteem

[illegible]

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

$$x^{m+1} = x^m - (F'(x^m))^{-1}F(x^m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (2.2)$$

kus

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

eeskirjas (2.2) $(F'(x^m))^{-1}$ on pöördmaatriks. Seejuures üleminekusamm (2.2) 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 $\det F'(x^m) \neq 0$.

Teoreem 6. Olgu F' pidevalt diferentseeruv süsteemi (2.1) 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 alg- lähend x^0 valida x^* küllalt väikesest ümbrusest.

Teoreem 7. *Kui lisaks teoreemi 6 eeldustele*

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq L\|x - y\|$$

lahendi x^* ümbruses, siis

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

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 7 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.

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 $n \rightarrow \infty$. Kirjutises esinev märk $\sim$ tähendab siin, et mõlema poole jagatis koondub arvuks 1 protsessis $n \rightarrow \infty$, selle kohta öeldakse, et tehete järk on $\frac{n^3}{3}$.

Vaatame veel tehete arvu 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. Selleks kulub 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 ühe 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), siis iteratsioonimeetod, mis koondub mõnekümne sammuga, on tunduvalt kiirem kui Gaussi meetod.

Lisaks arvutuste mahu võimalikule eelisele iteratsioonimeetodites on veel teine oluline põhjus, miks on vaja iteratsioonimeetodeid lineaarsete süsteemide lahendamisel. See on ümardamisvigade olemasolu, mis on näiteks arvuti kasutamisel vältimatu. Gaussi ja eriti Kramerit 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.

vahetult kontrollitav, et λ on A omaväärtus parajasti siis, kui $\det(A - \lambda I) = 0$ ehk

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

Viimane 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 spektriaks ja tähistatakse $\sigma(A)$.

Teoreem 10. *Harilik iteratsioonimeetod süsteemi $x = Bx + b$ lahendamisel koondub süsteemi ainsaks lahendiks iga algühendi 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 komplekstasandi ühikringi sees.

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

Ülesanne 21. Veenduda, et kui $\|B\| < 1$, siis $|\lambda| < 1$ iga $\lambda \in \sigma(B)$ korral.

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

Kuigi on olemas tarvilik ja piisav tingimus hariliku iteratsioonimeetodi koondumise kindlakstegemiseks, ei ole see praktikas siiski 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 ainult 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.

Võrrandite 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 maatriksis $B = (b_{ij})$ 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 diagonaاليةlementid 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 diagonaاليةlementide 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

$$\begin{aligned} \|B\|_{\infty \rightarrow \infty} &= \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} = \\ &= \max_{1 \leq i \leq n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|a_{ii}|}{|a_{ii}|} = 1. \end{aligned}$$

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

Ülesanne 22. 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 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$, siin diagonaal domineerib veergude kaupa. Diagonaali avaldamine viib maatriksini $B = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Hindame selle maatriksi normi, kasutades ruumis $\mathbb{R}^2$ traditsioonilisi varem vaadeldud p -norme, $1 \leq p \leq \infty$. Olgu $\bar{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, siis $\|\bar{x}\|_p = 1$, $1 \leq p \leq \infty$. Ühtlasi leiame, et $B\bar{x} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$ ja $\|B\bar{x}\|_p = 2$ iga p -normi korral. Saame

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

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

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

Ülesanne 23. 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.

lahendid on mooduli poolest väiksemad arvust 1. Seejuures

$$\begin{aligned}\det((I - L)^{-1}(D + U) - \lambda I) = 0 &\Leftrightarrow \det(D + U - \lambda(I - L)) = 0 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \det(\lambda L + D + U - \lambda I) = 0.\end{aligned}$$

Sellega on tõestatud järgmine

Teoreem 11. *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 (arvestatakse, 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 24. 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 hariliku iteratsioonimeetodi korral, on ka Seideli meetodi jaoks vaja vahe-
tult kontrollitavaid tingimusi, mis ei nõua karakteristliku võrrandi taolise võrrandi lahendamist. Anname need järgmise tulemusena.

Teoreem 12. *Kui $\max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1$ või $\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |b_{ij}| < 1$, siis Seideli meetod koondub.*

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

Ülesanne 25. Tõestada, et kui $\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |b_{ij}| < 1$, siis arv λ , kus $|\lambda| \geq 1$, ei saa olla võrrandi $\det(\lambda L + D + U - \lambda I) = 0$ lahend. Soovitus: näidata, et kui $|\lambda| \geq 1$, 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

$$\begin{aligned} Ax = b &\Leftrightarrow (R_L + D + R_U)x = b \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow Dx = -R_Lx - R_Ux + b \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow x = -D^{-1}R_Lx - D^{-1}R_Ux + D^{-1}b. \end{aligned}$$

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 elementid vastavalt diagonaali all ja peal. Viimasena saadud süsteemile Seideli meetodi rakendamine toimub eeskirjaga

$$x^{m+1} = -D^{-1}R_Lx^{m+1} - D^{-1}R_Ux^m + D^{-1}b, \quad m = 0, 1, \dots,$$

alates algühendist x^0 .

Ülesanne 26. Veenduda, et vaadeldud iteratsioonimeetodi sammu saab kirjutada kujul

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

või

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

Ülesanne 27. Tõestada, et kui maatriksi A diagonaal domineerib ridade või veergude kaupa, siis Gauss–Seideli meetod koondub.

6. Richardsoni meetod.

Vaatleme antud süsteemi $Ax = b$. Richardsoni meetodil leitakse alglähendist x^0 lähtudes järgmised lähendid

$$x^{m+1} = x^m - \omega(Ax^m - b), \quad m = 0, 1, \dots,$$

kus $\omega \in \mathbb{C}$, $\omega \neq 0$, on fikseeritud. Seda meetodit võib vaadelda kui harilikku iteratsioonimeetodit, mida on rakendatud süsteemile

$$x = (I - \omega A)x + \omega b.$$

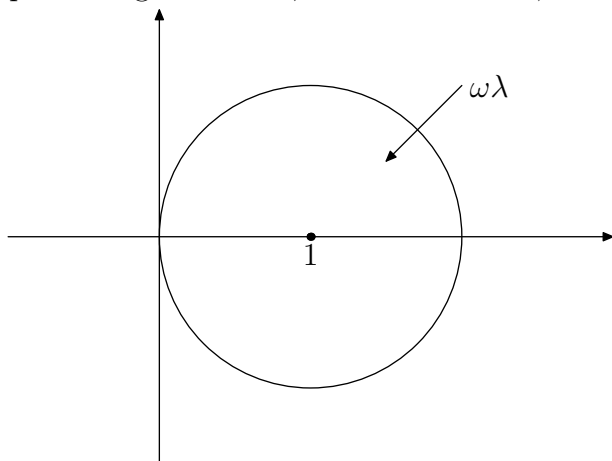
Teame, et koonduvus sõltub ainult maatriksist $B = I - \omega A$, tarvilik ja piisav on, et $\lambda \in \sigma(B)$ korral oleks $|\lambda| < 1$.

Paneme tähele, et

$$\begin{aligned} \lambda \in \sigma(A) &\Leftrightarrow \exists x \neq 0: Ax = \lambda x \Leftrightarrow \exists x \neq 0: -\omega Ax = -\omega \lambda x \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \exists x \neq 0: x - \omega Ax = x - \omega \lambda x \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \exists x \neq 0: (I - \omega A)x = (1 - \omega \lambda)x. \end{aligned}$$

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 $\{z \in \mathbb{C} : |z - 1| < 1\}$ 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

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

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

Lause 13. *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 3. *Kui $\sigma(A) \subset (0, \infty)$, siis leidub ω nii, et Richardsoni meetod koondub. Sobiv arv ω on selline, et $0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{\max}}$, kus $\lambda_{\max}$ 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 $0 < \omega\lambda < \frac{2\lambda}{\lambda_{\max}} \leq 2$, s.t. $0 < \lambda\omega < 2$ ehk $-1 < \omega\lambda - 1 < 1$, aga sellest järeldub, et $|\omega\lambda - 1| < 1$.

Järeldus 4. *Kui $\sigma(A) \subset (0, \infty)$ ja $0 < \omega < \frac{2}{\|A\|}$, siis Richardsoni meetod koondub.*

Tõestus. Eespool sisuliselt kasutasime asjaolu, et iga $\lambda \in \sigma(A)$ korral $|\lambda| \leq \|A\|$. Tehtud eeldustel $\lambda > 0$ iga $\lambda \in \sigma(A)$ puhul ja seepärast $\frac{2}{\|A\|} \leq \frac{2}{\lambda_{\max}}$. Seega $0 < \omega < \frac{2}{\|A\|}$ korral $0 < \omega < \frac{2}{\lambda_{\max}}$ ja jääb kasutada Järeldust 3.

Järelduse 4 olulisus on selles, et maatriksi A omaväärtuste leidmine võib olla tunduvalt komplitseeritum kui tema normi hindamine.

Järeldus 5. *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 $A^T Ax = A^T b$, 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 $A^T A$ on positiivselt määratud, sest $x \neq 0$ korral $Ax \neq 0$ ja $(A^T Ax, x) = (Ax, Ax) > 0$. Järelduse 5 põhjal saab leida ω nii, et Richardsoni meetod

$$x^{m+1} = x^m - \omega(A^T Ax^m - A^T b)$$

koondub. Seejuures ei tarvitse korrutist $A^T A$ 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. Liige $A^T b$ leitakse ainult ühel korral, teda ei ole vaja igal sammul uuesti leida.

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

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

kus M_m on $n \times n$ maatriksite jada. Nendest erijuhtudena käsitlesime 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 reaalselt sõltuvust mõõtmisvigade piires. Kui tekib vajadus funktsiooni väärtuste järele argumentide 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 $\varphi(x_i) = f_i$ interpolatsiooningimusteks. Interpolantideks võetakse sellised funktsioonid, millega on lihtne opereerida, näiteks polünoomid, trigonomeetrilised polünoomid, ratsionaalfunktsioonid, splineid (sealhulgas sellised, mis on täiesti 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

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

seejuures 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 interpolatsiooningimustest. 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

$$c_0\psi_0(x_i) + \dots + c_n\psi_n(x_i) = f_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

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

$$\begin{vmatrix} \psi_0(x_0) & \dots & \psi_n(x_0) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_0(x_n) & \dots & \psi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0.$$

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

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} &= \prod_{i>j} (x_i - x_j) = \\ &= (x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1}) \cdot \\ &\quad \cdot (x_{n-1} - x_0) \dots (x_{n-1} - x_{n-2}) \cdot \\ &\quad \dots \\ &\quad \cdot (x_1 - x_0) \neq 0. \end{aligned}$$

Sellega on tõestatud järgmine

Lause 14. 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 $P_n(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, n$.

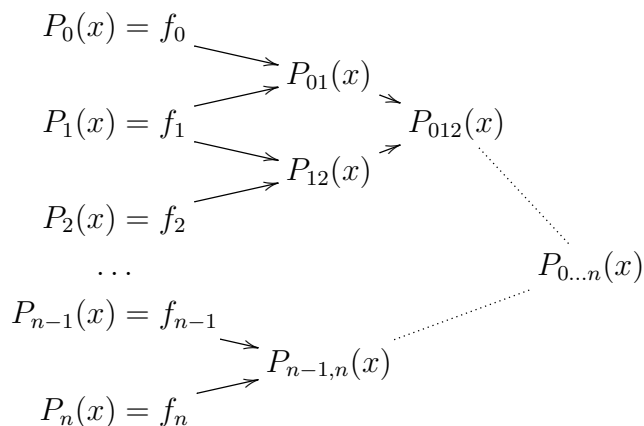
Järgnevas vaatame võimalusi interpolatsioonipolünoomi leidmiseks. Ühe võimaluse annab

Ülesanne 28. 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 14 väljendatud interpolatsioonipolünoomi leidmiseks:



3. Lagrange'i fundamentaalpolünoomid.

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

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

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

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

seejuures a_i on konstant, sest kui ta oleks esimese või kõrgema astme polünoom, ületaks ℓ_{ni} aste n . Peale nullkohtade tingimuse kehtib ka veel $\ell_{ni}(x_i) = 1$ 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

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

või

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

Ülesanne 29. Olgu $\omega_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n)$. Näidata, et $\ell_{ni}(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_i)\omega'_n(x_i)}$.

Polünoome ℓ_{ni} , $i = 0, \dots, n$, nimetatakse Lagrange'i fundamentaalpolünoomideks. Nad 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.

Ülesanne 30. 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 $f_0, \dots, f_n$. Väidame, et siis polünoom

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

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,

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

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

Kasutades varemtoodud ℓ_{ni} avaldise võime kirjutada

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{i=0}^n f_i \frac{(x-x_0) \dots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \dots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \dots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \dots (x_i-x_n)} = \\ &= \sum_{i=0}^n f_i \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j} = \sum_{i=0}^n f_i \frac{\omega_n(x)}{(x-x_i)\omega'_n(x_i)}. \end{aligned}$$

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 $x_0, \dots, x_n$ ja indeksiga i , sest see ei muutu sõlmede järjekorra muutmisel.

2) Lagrange'i fundamentaalpolünoomid $\ell_{n0}, \dots, \ell_{nn}$ moodustavad baasi kõigi ülimalt n astme polünoomide ruumis $\mathcal{P}_n$, sest $\dim \mathcal{P}_n = n+1$ ja Lagrange'i

fundamentaalspolünoomid on lineaarselt sõltumatud. Iga $P \in \mathcal{P}_n$ korral $P(x) = \sum_{i=0}^n P(x_i) \ell_{ni}(x)$, mis tuleneb sellest, et P ja $\sum_{i=0}^n P(x_i) \ell_{ni}$ rahuldavad mõlemad samu interpolatsioonitingimusi, nende aste ei ületa n , kuid interpolatsioonipolünoom on üheselt määratud.

5. Diferentssuhted.

Olgu antud argumenti väärtused $x_0, \dots, x_n$, $x_i \neq x_j$, kui $i \neq j$, ja $f(x_0), \dots, f(x_n)$. 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

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

Üldisemalt, k . järku diferentssuhte määrame võrdusega

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

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

Lause 15. *Kehtib võrdus*

$$\begin{aligned} f(x_0, x_1, \dots, x_n) &= \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} = \\ &= \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)} = \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\omega'_n(x_i)}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Tõestus. Võrdus (3.1) on kirjutatud ülevaatlikkuse huvides sõlmede $x_0, \dots, x_n$ jaoks, ta kehtib muidugi suvalise paarikaupa mittevõrdsete sõlmede komplekti korral.

Tõestame võrduse (3.1) 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 (3.1) kehtib k sõlme korral, ja näitame, et (3.1) kehtib ka $k + 1$ sõlme korral. Definitsiooni ja eeldust kasutades saame

$$\begin{aligned} f(x_0, x_1, \dots, x_k) &= \frac{f(x_1, \dots, x_k) - f(x_0, \dots, x_{k-1})}{x_k - x_0} = \\ &= \frac{1}{x_k - x_0} \left(\frac{f(x_1)}{\prod_{j=2}^k (x_1 - x_j)} + \dots + \frac{f(x_k)}{\prod_{j=1}^{k-1} (x_k - x_j)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{f(x_0)}{\prod_{j=1}^{k-1} (x_0 - x_j)} - \dots - \frac{f(x_{k-1})}{\prod_{j=0}^{k-2} (x_{k-1} - x_j)} \right). \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &\frac{1}{x_k - x_0} \left(\frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k (x_i - x_j)} - \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{k-1} (x_i - x_j)} \right) = \\ &= \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{k-1} (x_i - x_j)} \cdot \frac{1}{x_k - x_0} \left(\frac{1}{x_i - x_k} - \frac{1}{x_i - x_0} \right) = \\ &= \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^k (x_i - x_j)}. \end{aligned}$$

- 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) $(cf)(x_0, \dots, x_n) = cf(x_0, \dots, x_n)$,
 3) diferentssuhe on sümmeetriline argumentide suhtes.

Esimesed kaks järeldust tähendavad, et diferentssuhte võtmine on lineaarne (adiitiivne ja homogeenne) funktsiooni suhtes, millest suhe võetakse. Kolmanda järelduse põhjenduseks märgime, et kui muuta sõlmede järjekorda diferentssuhtes, siis muutub liidetavate järjekord võrduse (3.1) 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 16. *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

$$\begin{aligned} P_n(x_n) &= P_{n-1}(x_n) + (x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1}) \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)} = \\ &= P_{n-1}(x_n) + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_i) \dots (x_n - x_{n-1})}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)} f(x_i) + \\ &\quad + \frac{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1})}{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1})} f(x_n) = f(x_n), \end{aligned}$$

sest

$$\frac{(x_n - x_0) \dots (x_n - x_i) \dots (x_n - x_{n-1})}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)} = - \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n-1} \frac{x_n - x_j}{x_i - x_j} = -\ell_{n-1,i}(x_n)$$

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

Newtoni interpolatsioonivalemis kasutatavate diferentssuhete arvutamine toimub kolmnurkse skeemi abil

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

kusjuures interpolatsioonivalemis kasutatakse ainult iga veeru esimesi elemente.

Ülesanne 31. 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 küsimus 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' vähemalt (a, b) vähemalt $n+1$ erinevat nullkohta, need asuvad funktsiooni φ nullkohtade

vahel. Analoogiliselt jätkates, funktsioonil φ'' on n erinevat nullkoha, 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, seejuures võib ξ võtta suvalise. Võib küsida, kas funktsioon $x \rightarrow f^{(n+1)}(\xi(x))$ on pidev? Kas ta on mingi arv korda pidevalt diferentseeruv?

Ülesanne 32. Tõestada, et eksisteerib $\lim_{x \rightarrow x_i} f^{(n+1)}(\xi(x))$. Soovitus: kasutada L'Hospitali reeglit.

Ülesanne 33. Tõestada, et on olemas $\xi_i \in [a, b]$ nii, et $f^{(n+1)}(\xi_i) = \lim_{x \rightarrow x_i} f^{(n+1)}(\xi(x))$.

Ülesanne 34. Tõestada, et funktsioon $x \rightarrow f^{(n+1)}(\xi(x))$ on pidevalt diferentseeruv.

Arvestades, et $f^{(n+1)}$ on pidev, on ta tõkestatud lõigus $[a, b]$. Olgu $M_{n+1} = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$. Siis $|R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_n(x)|$, see võimaldab hinnata interpolatsiooni täpsust.

Ülesanne 35. Tõestada, et kui $f \in C^{n+1}[a, b]$ ja $x_i \rightarrow x_0$, $i = 1, \dots, n$, siis interpolatsioonivalemist saab piirväärtusena Tayloriga 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

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

Murdudega 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 $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_n(x)$. Kahte jääkliikme esitust kõrvutades saame

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

Sõnastame selle tulemuse järgmiselt.

Teoreem 17 (Teoreem diferentssuhte esitusest). *Kui $f \in C^n[a, b]$ ja $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$, siis $f(x_0, \dots, x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$, $\xi \in (a, b)$.*

Erijuhul $n = 1$ saame siit laialdaselt tuntud Lagrange'i valemi

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

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

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

Vaatleme mingit funktsiooni $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$. 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 $\max_{a \leq x \leq b} |P_n(x) - f(x)| \rightarrow 0$, kui $n \rightarrow \infty$?

Teoreem 18 (Faber, 1914). *Iga sõlmede süsteemi $x_{ni} \in [a, b]$, $n = 0, 1, \dots$, $i = 0, \dots, n$, korral on olemas funktsioon $f \in C[a, b]$ nii, et $\max_{a \leq x \leq b} |P_n(x) - f(x)| \rightarrow 0$ ei leia aset, kui $n \rightarrow \infty$. On olemas isegi funktsioon f , kus $\max_{a \leq x \leq b} |P_n(x) - f(x)| \rightarrow \infty$, kui $n \rightarrow \infty$.*

Lisatulemus. Iga sõlmede süsteemi korral $\max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^n |\ell_{ni}(x)| \geq c \ln n$, kus c on positiivne konstant.

Analüüsime selle tulemuse valguses andmete vigade mõju interpoleerimisel. Ole-tame, et täpsete väärtuste $f(x_{ni})$ asemel leitakse arvud f_{ni} nii, et $|f_{ni} - f(x_{ni})| \leq \varepsilon$. Leitud arvude f_{ni} abil moodustatakse tegelikult kasutatavad interpolatsioonipolünoomid $\tilde{P}_n(x) = \sum_{i=0}^n f_{ni} \ell_{ni}(x)$. Siis

$$\begin{aligned} \max_{a \leq x \leq b} |\tilde{P}_n(x) - P_n(x)| &= \max_{a \leq x \leq b} \left| \sum_{i=0}^n (f_{ni} - f(x_{ni})) \ell_{ni}(x) \right| \leq \\ &\leq \max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^n |f_{ni} - f(x_{ni})| |\ell_{ni}(x)| \leq \\ &\leq \varepsilon \max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^n |\ell_{ni}(x)| \rightarrow \infty, \text{ kui } n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Siin hinnangutes võivad võrratused olla võrdsed, sest $\max_{a \leq x \leq b} \sum_{i=0}^n |\ell_{ni}(x)| = \sum_{i=0}^n |\ell_{ni}(x_0)|$ mingi $x_0 \in [a, b]$ korral ja vastavalt $\ell_{ni}(x_0)$ märkidele võib esineda sobivalt $f_{ni} - f(x_{ni}) = \pm \varepsilon$ nii, et

$$\begin{aligned} \max_{a \leq x \leq b} \left| \sum_{i=0}^n (f_{ni} - f(x_{ni})) \ell_{ni}(x) \right| &\geq \\ &\geq \left| \sum_{i=0}^n (f_{ni} - f(x_{ni})) \ell_{ni}(x_0) \right| = \\ &= \sum_{i=0}^n |f_{ni} - f(x_{ni})| |\ell_{ni}(x_0)| = \varepsilon \sum_{i=0}^n |\ell_{ni}(x_0)|. \end{aligned}$$

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

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

Interpolatsioonitingimused annavad lineaarse süsteemi kordajate c_{ij} määramiseks. Kordajaid on $(m+1)+m+\dots+1 = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$, interpolatsioonitingimusi ehk 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. Kui 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

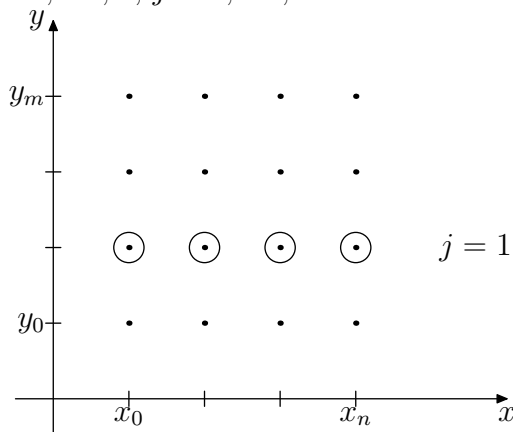
$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & y_0 \\ 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0$$

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 arutelu annab, et kolme sõlme-
ga (x_i, y_i) , $i = 0, 1, 2$, interpolatsiooniülesanne 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 jär-
ku 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 kui
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 riskülikuline sõlmede võrk (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 muu-
tuja 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

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

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 in-

deksi 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. $\tilde{P}_{nm}(x_i, y) = \tilde{P}_{im}(y)$, $i = 0, \dots, n$.

Ülesanne 36. Tõestada, et $\tilde{P}_{nm}(x, y) = P_{nm}(x, y)$. Soovitus: kasutada Lagrange'i interpolatsioonivalemit.

§2. Funktsioonide lähendamine vähimruutude meetodil

Meenutame paari asjaolu funktsioonide interpoleerimisel polünoomidega. Praktikas on tavaline, et katsetulemused $f_0, \dots, f_n$ saadakse 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

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n &= f_1, \\ \dots & \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n &= f_m, \end{cases} \quad (3.2)$$

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

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

siis võime süsteemi (3.2) kirjutada $Ax = f$. Üldiselt ei tarvitse sellel süsteemil olla lahendit. Olgu $x \in \mathbb{R}^n$ korral

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

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

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

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

Definitsioon 19. Vektorit $x \in \mathbb{R}^n$ nimetatakse süsteemi (3.2) 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 $x \rightarrow \|R(x)\|^2 = g(x_1, \dots, x_n)$ on n muutuva 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

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

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

$$A^T A x = A^T f, \tag{3.3}$$

kus

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

on transponeeritud maatriks. Süsteemi (3.3) nimetatakse normaalkõrvalandite 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 (3.3) vabaliige $A^T f$ on n komponendiline vektor.

Eelneva aruteluga nägime, et ülesande (3.2) lahend vähimruutude mõttes on süsteemi (3.3) lahend. Näitame, et ka vastupidi, süsteemi (3.3) iga lahend on ülesande (3.2) lahend vähimruutude mõttes. Olgu x süsteemi (3.3) lahend. Võtame suvaliselt $y \in \mathbb{R}^n$. Siis

$$\begin{aligned} \|f - Ay\|^2 &= \|f - Ax + Ax - Ay\|^2 = (f - Ax + A(x - y), f - Ax + A(x - y)) = \\ &= \|f - Ax\|^2 + 2(A(x - y), f - Ax) + \|A(x - y)\|^2 = \\ &= \|f - Ax\|^2 + 2(x - y, A^T(f - Ax)) + \|A(x - y)\|^2 \geq \|f - Ax\|^2, \end{aligned}$$

sest $A^T(f - Ax) = 0$ ja $\|A(x - y)\|^2 \geq 0$. Niisiis on süsteemi (3.2) lahendamine vähimruutude mõttes samaväärne normaalkõrrandite süsteemi lahendamisega.

Ülesanne 37. Tõestada, et normaalkõrrandite süsteemil on alati olemas lahend. Soovitus: tõestada, et $\text{ran } A^T A = \text{ran } A^T$, kus $m \times n$ maatriksi A korral defineeritakse $\text{ran } A = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$.

Teoreem 20. Normaalkõrrandite süsteem (3.3) on üheselt lahenduv parajasti siis, kui maatriksi A veerud on lineaarselt sõltumatud.

Tõestus. Olgu

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

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

$$\begin{aligned} Ay &= \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}y_1 + \dots + a_{1n}y_n \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}y_1 + \dots + a_{mn}y_n \end{pmatrix} = y_1 a_1 + \dots + y_n a_n. \end{aligned}$$

Nüüd

$$\begin{aligned} &a_1, \dots, a_n \text{ on lineaarselt sõltumatud} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow &\{y_1 a_1 + \dots + y_n a_n = 0 \Rightarrow y_1 = \dots = y_n = 0\} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow &\{Ay = 0 \Rightarrow y = 0\} \Leftrightarrow \{A^T Ay = 0 \Rightarrow y = 0\} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow &\text{süsteem (3.3) on üheselt lahenduv.} \end{aligned}$$

Selles tõestuses kasutasime järgmise ülesande väidet.

Ülesanne 38. Tõestada, et võrdusest $A^T Ay = 0$ järeldeb, et $Ay = 0$.

On selge, et kui $Ay = 0$, siis $A^T Ay = 0$. 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 $x_0, \dots, x_m$ ja vastavad arvud $f_0, \dots, f_m$ (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 $\varphi_0, \dots, \varphi_n$ on antud. Kui $m = n$ ja kordajad c_j leitakse süsteemist $\varphi(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, m$, ehk

$$\sum_{j=0}^n c_j \varphi_j(x_i) = f_i, \quad i = 0, \dots, m, \quad (3.4)$$

siis saadakse interpolant. Kui süsteemil (3.4) lahend puudub (mis on loomulik nähtus, kui $m > n$), siis lahendades süsteemi (3.4) tundmatute c_j suhtes vähimruutude meetodil, räägitakse lähendamisest vähimruutude mõttes. Antud juhul on süsteemi (3.4) 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

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

Normaalvõrrandite süsteem on siin üheselt lahenduv parajasti siis, kui maatriksi

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

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 (3.4) kordajad on siin $\varphi_j(x_i) = x_i^j$, normaalvõrrandite süsteem on

$$\sum_{j=0}^n \left(\sum_{i=0}^m x_i^{k+j} \right) c_j = \sum_{i=0}^m x_i^k f_i, \quad k = 0, \dots, n. \quad (3.5)$$

Teoreem 21. *Normaalvõrrandite süsteem (3.5) on üheselt lahenduv parajasti siis, kui sõlmede $x_0, \dots, x_m$ hulgas on vähemalt $n + 1$ omavahel erinevat.*

Tõestus. Tugineme eespool tõestatud teoreemile normaalvõrrandite süsteemi ühesest lahenduvusest. Selleks on tarvilik ja piisav, et lähtesüsteemi maatriksi veerud, antud juhul

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

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

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

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 mõttes 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 vastavad 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

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

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 tegeletakse optimeerimise 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 $x_0, \dots, x_n$, siis n on paarisarv ja $n = 2m$, diferentseerides sõlmes x_m . Muidugi ollakse sunnitud kasutama ka valemid, kus sõlmed ei paikne sümmeetriliselt selle sõlme ümber, milles diferentseeritakse, näiteks tekitab sellise olukorra väärtuste f_i kättesaadavus. Vaatleme järgnevas olulisemaid praktikas eettetulevaid valemid, kus kasutame tähistust $f_i = f(x_i)$. Kui $n = 2$, siis

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= \frac{1}{2h}(f_2 - f_0) - \frac{h^2}{6}f'''(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_2], \\ f''(x_1) &= \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - \frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi), \end{aligned}$$

kui aga $n = 4$, siis

$$\begin{aligned} f'(x_2) &= \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4) + \frac{h^4}{30}f^V(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_4], \\ f'''(x_2) &= \frac{1}{2h^3}(-f_0 + 2f_1 - 2f_3 + f_4) - \frac{h^2}{4}f^V(\xi). \end{aligned}$$

Tuletame nendest valemitest esimese kujul

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

Taylori arendist kasutades leiame

$$\begin{aligned} \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) &= \frac{1}{2h}(f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1) - \\ &\quad - (f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2))) = \\ &= f'(x) + \frac{h^2}{12}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)), \end{aligned}$$

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

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

ehk

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

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

Ülesanne 39. 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 katseandmetes, tinglik viga on aga jääkliikme suurus või selle hinnang. Siin ilmneb järgmine nähtus: kui vähendada jääkliiget, suureneb tingimatu vea mõju. Selgitame seda näite varal, kuigi see esineb kõigis numbrilise diferentseerimise valemite.

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

$$\begin{aligned} \left| \frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - f'(x_0) \right| &= \left| \frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2} \right| = \\ &= \left| \frac{\tilde{f}_1 - f_1}{h} - \frac{\tilde{f}_0 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2} \right| \leq \\ &\leq \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{M}{2}h = g(h). \end{aligned}$$

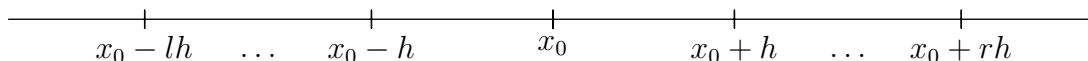
Kui $h \rightarrow 0$, siis $\frac{M}{2}h \rightarrow 0$ (jääkliikme hinnang ehk tinglik viga väheneb), kuid $\frac{2\varepsilon}{h} \rightarrow \infty$ (tingimatu vea ε mõju suureneb).

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 koonduvus.

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



Olgu antud numbrilise diferentseerimise valem

$$f^{(k)}(x_0) = \frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^r b_i f(x_0 + ih) + R_h(f). \quad (3.6)$$

Loeme k, l, r ja kordajad b_i fikseerituks. Valemis (3.6) esinevat osa $\frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^r b_i f(x_0 + ih)$ nimetame diferentsavaldiseks.

Definitsioon 22. Ütleme, et valem (3.6) või selles esinev diferentsavaldis koondub, kui iga funktsiooni $f \in C^k[x_0 - \delta, x_0 + \delta]$ korral protsessis $h \rightarrow 0$

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

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

Võtame kasutusele diferentsavaldise karakteristliku funktsiooni

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

kus vaatame $\chi: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ või $\chi: \mathbb{C} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{C}$. Osutub, et valemi (3.6) paljud omadused sõltuvad selle funktsiooni käitumisest.

Teoreem 23. *Selleks, et numbrilise diferentseerimise valem (3.6) koonduks, on tarvilik ja piisav, et*

$$\chi(1) = 0, \chi'(1) = 0, \dots, \chi^{(k-1)}(1) = 0, \chi^{(k)}(1) = k! \quad (3.7)$$

Tõestus. Kasutame Taylori arendisi diferentsavaldises

$$\frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^r b_i f(x_0 + ih) = \frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^r b_i \left(f(x_0) + f'(x_0)ih + \frac{f''(x_0)}{2}i^2h^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}i^k h^k + \alpha_i \right),$$

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

$$\begin{cases} \sum_{i=-l}^r b_i = 0 & (f(x_0) \text{ kordaja}), \\ \sum_{i=-l}^r b_i i = 0 & (f'(x_0) \text{ kordaja}), \\ \sum_{i=-l}^r b_i i^2 = 0 & (f''(x_0) \text{ kordaja}), \\ \dots \\ \sum_{i=-l}^r b_i i^{k-1} = 0, \\ \sum_{i=-l}^r b_i \frac{i^k}{k!} = 1 & \text{ehk } \sum_{i=-l}^r b_i i^k = k! \end{cases} \quad (3.8)$$

Arvestades, et $\sum_{i=-l}^r b_i \frac{\alpha_i}{h^k} \rightarrow 0$, kui $h \rightarrow 0$, saame, et tingimuste (3.8) täidetuse korral (3.6) koondub ehk $R_h(f) \rightarrow 0$ iga $f \in C^k$ korral.

Teisipidi, eeldame, et (3.6) koondub ehk $R_h(f) \rightarrow 0$ iga $f \in C^k$ korral protsessis $h \rightarrow 0$. Kasutame testfunktsiooni f , mille korral

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

siis saame esimese võrduse (3.8). Kui võtame f nii, et

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

saame teise võrduse (3.8), 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 (3.8). Sobivad testfunktsioonid on näiteks $f(x) = \frac{(x - x_0)^j}{j!}$, $j = 0, 1, \dots, k$.

Senise aruteluga oleme näidanud, et (3.6) koondub parajasti siis, kui kehtivad võrdused (3.8). Teoreemi väites olid võrdused

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi(1) = \sum_{i=-l}^r b_i = 0, \\ \chi'(1) = \sum_{i=-l}^r b_i i = 0, \\ \chi''(1) = \sum_{i=-l}^r b_i i(i-1) = 0, \\ \dots \\ \chi^{(k-1)}(1) = \sum_{i=-l}^r b_i i(i-1) \dots (i-(k-2)) = 0, \\ \chi^{(k)}(1) = \sum_{i=-l}^r b_i i(i-1) \dots (i-(k-1)) = k! \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Esimesed kaks võrdust on mõlemas komplektis (3.9) ja (3.8) samad. Arvestades teist võrdust on samaväärsed ka kolmandad. Selliselt jätkates näeme (3.9) ja (3.8) samaväärsust.

Ülesanne 40. Tõestada, et valem (3.6) koondub parajasti siis, kui tema karakteristik funktsioon avaldub $\chi(z) = z^{-l}(z-1)^k Q(z)$, kus Q on polünoom ning $Q(1) = 1$.

Näidetena vaatleme valemeid

- 1) $f'(x) = \frac{1}{h}(f(x+h) - f(x)) - \frac{h}{2}f''(\xi),$
- 2) $f'(x) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{6}f'''(\xi),$
- 3) $f''(x) = \frac{1}{h^2}(f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)) - \frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi).$

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

Esimeses valemis karakteristik 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 $h \rightarrow 0$.

Jääkliikmete järgi saab otsustada valemite koonduvuskiiruse üle. Öeldakse, et valem (3.6) koondub kiirusega h^m , kui $|R_h(f)| \leq ch^m$ küllalt sileda funktsiooni f korral. Esimeses valemis on koonduvuskiirus h , teises ja kolmandas valemis h^2 . Koonduvuskiirust valemis (3.6) on võimalik leida diferentsavaldise järgi, kasutades pikemaid Taylori arendisi.

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 nimetatakse 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

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

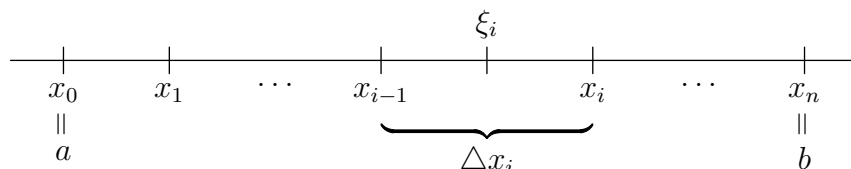
siin argumendi väärtusi x_i nimetatakse kvadratuurvalemi sõlmedeks, arve A_i kvadratuurvalemi kordajateks, avaldist $\sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$ kvadratuursummaks. Loomulik on

eeldada, et $x_i \in [a, b]$.

Olgu f suvaline Riemanni mõttes integreeruv funktsioon. Integraali definitsiooni põhjal

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

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



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 mõistetenä 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

$$1^\circ \quad p(x) \geq 0, \quad x \in [a, b], \quad \text{eksisteerib} \quad \int_a^b p(x)dx > 0,$$

$$2^\circ \quad \text{eksisteerivad} \quad \int_a^b p(x)x^k dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

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 24. Kvadratuurvalemit

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + R_n(f) \quad (4.1)$$

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 $P_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$, P_n aste ei ületa arvu n .

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

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

iga funktsiooni f korral parajasti siis, kui $A_i = \int_a^b p(x)\ell_{ni}(x)dx$. Sellega on tõestatud

Lause 25. Kvadratuurvalem (4.1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui tema kordajad avalduvad $A_i = \int_a^b p(x)\ell_{ni}(x)dx$.

Niisiis on interpolatsioonitüüpi valemite 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 26. *Kvadratuurvalem (4.1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui tema jääkliige avaldub interpolatsioonivalemi jääkliikme kaudu kujul $R_n(f) = \int_a^b p(x)R_n(x)dx$.*

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

Teoreem 27. *Kvadratuurvalem (4.1) on interpolatsioonitüüpi parajasti siis, kui ta on täpne kõigi ülimalt n astme polünoomide korral.*

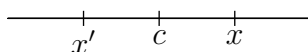
Tõestus. Kui (4.1) on täpne kõigi n astme polünoomide korral, siis on ta täpne ka Lagrange'i fundamentaalpolünoomide ℓ_{ni} korral. Seepärast

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

sest $\ell_{ni}(x_j) = \delta_{ij}$. Sellega on näidatud, et (4.1) on interpolatsioonitüüpi.

Teisipidi tõestuses eeldame, et (4.1) 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 (4.1) 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 $2c - x \in D$. Analooiliselt defineeritakse paaritu funktsioon mingi punkti suhtes.



Ülesanne 41. Tõestada, et kui interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemis kaalu-funktsioon p on paaris integreerimispiirkonna keskpunkti $c = \frac{a+b}{2}$ suhtes ja sõl-med 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 valemite 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 $A_i = \int_a^b \ell_{ni}(x) dx$. Arvestades 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 $dx = hdt$, $x - x_j = a + th - (a + jh) = (t - j)h$, $x_k - x_j = a + kh - (a + jh) = (k - j)h$ ja integraali rajad a ja b asenduvad vastavalt arvudega 0 ja n . Selle tulemusena arvutame

$$\begin{aligned} A_i &= h \int_0^n \frac{t(t-1) \dots (t-(i-1))(t-(i+1)) \dots (t-n)}{i(i-1) \dots 1 \cdot (-1) \dots (i-n)} dt = \\ &= \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_0^n t(t-1) \dots (t-(i-1))(t-(i+1)) \dots (t-n) dt \\ &= (b-a)B_i, \end{aligned}$$

kus arvud B_i ei sõltu integreerimispiirkonnast $[a, b]$, küll sõltuvad nad arvust n , seepärast 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 mõned kordajate B_i omadused.

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

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

3) $\sum_{i=0}^n |B_{ni}| \rightarrow \infty$, kui $n \rightarrow \infty$; 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

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=0}^n B_{ni} \tilde{f}_i - \sum_{i=0}^n B_{ni} f(x_i) \right| &= \left| \sum_{i=0}^n B_{ni} (\tilde{f}_i - f(x_i)) \right| \leq \\ &\leq \sum_{i=0}^n |B_{ni}| |\tilde{f}_i - f(x_i)| \leq \sum_{i=0}^n |B_{ni}| \varepsilon \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

kui $n \rightarrow \infty$.

2. Newton–Cotesi valemite jääkliige.

Eelmise paragrahvi lõpus näitasime, kuidas saab esitada interpolatsioonitüüpi kvadratuurvalemi jääkliiget sileda funktsiooni korral. Newton–Cotesi valemite 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 $M_{n+1} = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$, saaksime hinnangu

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

kuid see on oluliselt üle hinnatud, sest ω_n muudab sõlmest läbimineku märki (selline arutelu sobib ka teiste interpolatsioonitüüpi valemite korral, kus üldjuhul esineb ka kaalufunktsioon p). Osutub, et Newton–Cotesi valemite saab jääkliikme teisendada märksa sobivamale kujule kui üldjuhul.

Meil läheb vaja analüüsi kursusest pärit integraalarvutuse keskvaartusteoreemi. 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). Erijuht, kus $g(x) = 1$ iga $x \in [a, b]$ korral, on laialdasemalt tuntud, siis

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

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

$$\begin{aligned} R_1(f) &= \frac{1}{2!} \int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b)dx = \\ &= \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi), \end{aligned}$$

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

Üldiselt saab tõestada (tuginedes keskvaartusteoreemile, 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 (põhjenduseks märgime, et siin $\int_a^b \omega_n(x)dx = 0$, sest ω_n on paaritu punkti $\frac{a+b}{2}$ suhtes); kui aga n on paaritu, siis

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

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

$$\begin{aligned} R_2(f) &= \frac{f^{\text{IV}}(\xi)}{4!} \int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx = \\ &= -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{\text{IV}}(\xi), \text{ siin võetakse } c = \frac{a+b}{2}, \\ R_3(f) &= -\frac{3}{80} \left(\frac{b-a}{3}\right)^5 f^{\text{IV}}(\xi). \end{aligned}$$

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

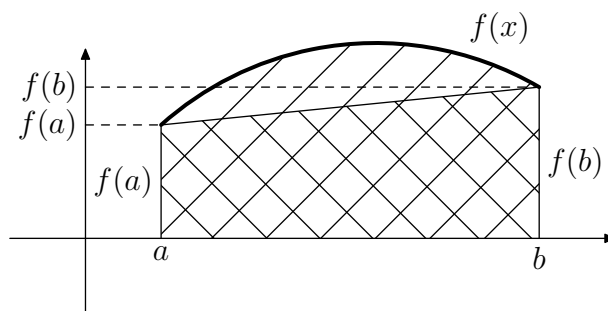
1. Vaatleme Newton–Cotesi valemit juhul $n = 1$. Leidmata on veel ainult korrajad. Nende korral

$$\begin{aligned} B_0 + B_1 &= 1, \\ B_0 &= B_1, \end{aligned}$$

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

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

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 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

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

Kokku saame valemi

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

Seejuures

$$n \min_{1 \leq i \leq n} f''(\xi_i) \leq \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \leq n \max_{1 \leq i \leq n} f''(\xi_i),$$

millest

$$\begin{aligned} \min_{\xi_1 \leq x \leq \xi_n} f''(x) &\leq \min_{1 \leq i \leq n} f''(\xi_i) \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f''(\xi_i) \leq \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq n} f''(\xi_i) \leq \max_{\xi_1 \leq x \leq \xi_n} f''(x). \end{aligned}$$

Kui f'' on pidev, siis ta saavutab kõik väärtused minimaalse 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 $\sum_{i=1}^n f''(\xi_i) = n f''(\xi)$.

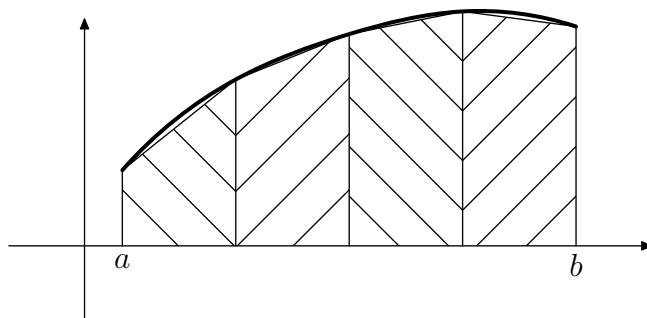
Sellise üldise iseloomuga keskmistamise tulemusena võime jääkliikme kirjutada

$$R_n(f) = -\frac{nh^3}{12}f''(\xi) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi).$$

Kvadratuurvalem saab kuju (siin $f_i = f(x_i)$)

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2n}(f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi).$$

Geomeetriliselt tähendab sellise 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 leiab aset võrratus $-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi) > 0$ 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

$$\begin{aligned} B_0 + B_1 + B_2 &= 1, \\ B_0 &= B_2. \end{aligned}$$

Kordajad B_i ei sõltu lõigust $[a, b]$, arvutuste lihtsuse huvides võtame hetkeks $[a, b] = [0, 2]$ ja integreeritavaks polünoomi $f(x) = x^2$, kusjuures teame, et siis valem on täpne. Siis $\int_0^2 x^2 dx = \frac{8}{3} = 2(B_0 \cdot 0 + B_1 \cdot 1 + B_2 \cdot 4)$ 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 $n = 2$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)) - \frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\xi).$$

Seda valemit nimetatakse Simpsoni valemiks. Analoogiliselt trapetsvalemi juhtumiga jaotame lõigu $[a, b]$ n osaks, kus nüüd valime n paarisarvu, kuid ikka olgu

$h = \frac{b-a}{n}$. Avaldame integraali $\int_a^b f(x)dx$ summana integraalidest üle osalõikude $[a, a+2h]$, $[a+2h, a+4h]$, $\dots$, $[b-2h, b]$ ning igale osaintegraalile rakendame Simpsoni valemit. Tulemusena saame

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n/2} \frac{2h}{6} (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})) - \sum_{i=1}^{n/2} \frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi_i).$$

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

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{3n} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 4f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{IV}(\xi).$$

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 42. Näidata, kuidas leitakse kordajad $B_0, \dots, B_3$ Newton–Cotesi valemis.

Tähistades $h = \frac{b-a}{3}$, saame

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{8} (f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)) - \frac{3}{80} h^5 f^{IV}(\xi),$$

seda nimetatakse Newtoni $\frac{3}{8}$ -valemiks.

Toimides analoogiliselt eelnevate juhtudega võtame kolmega jaguva arvu n , siis $h = \frac{b-a}{n}$ ja lahutame integraali $\int_a^b f(x)dx$ osaintegraalideks üle lõikude $[a, a+3h]$, $[a+3h, a+6h]$, $\dots$, $[b-3h, b]$. Seejärel rakendame igale osaintegraalile Newtoni $\frac{3}{8}$ -valemit ja keskmistame jääkliikmes tekkiva f^{IV} väärtuste summa, tulemusena

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{3(b-a)}{8n} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + 2f_3 + 3f_4 + \dots + 3f_{n-1} + f_n) - \frac{(b-a)^5}{80n^4} f^{IV}(\xi).$$

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 $h \rightarrow 0$ või $n \rightarrow \infty$ 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

$$\begin{aligned} \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n) &= \\ &= \frac{1}{2}h(f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1}) + \frac{1}{2}h(f_1 + f_2 + \dots + f_n) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{2} \int_a^b f(x)dx + \frac{1}{2} \int_a^b f(x)dx = \int_a^b f(x)dx, \end{aligned}$$

sest kvadratuursumma jaotasime 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.

Ülesanne 43. 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 $\int_a^b xdx = \frac{x^2}{2} \Big|_a^b = \frac{b^2 - a^2}{2} = \frac{(b-a)(b+a)}{2}$, 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 esitust. Saame Taylori arendist kasutades

$$\begin{aligned} R_0(f) &= \int_a^b f(x)dx - (b-a)f(x_0) = \\ &= \int_a^b (f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(\xi(x))}{2}(x-x_0)^2)dx - (b-a)f(x_0) = \\ &= \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-x_0)^2 dx, \end{aligned}$$

sest $\int_a^b (x-x_0)dx = 0$. Edasises teisenduses tugineme asjaolule, mille sõnastame üldisemalt.

Ülesanne 44. Tõestada, et Taylori valemis

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

on funktsioon $x \rightarrow f^{(n)}(\xi(x))$ pidev, kui $f \in C^n[x_0 - \delta, x_0 + \delta]$ mingi $\delta > 0$ korral.

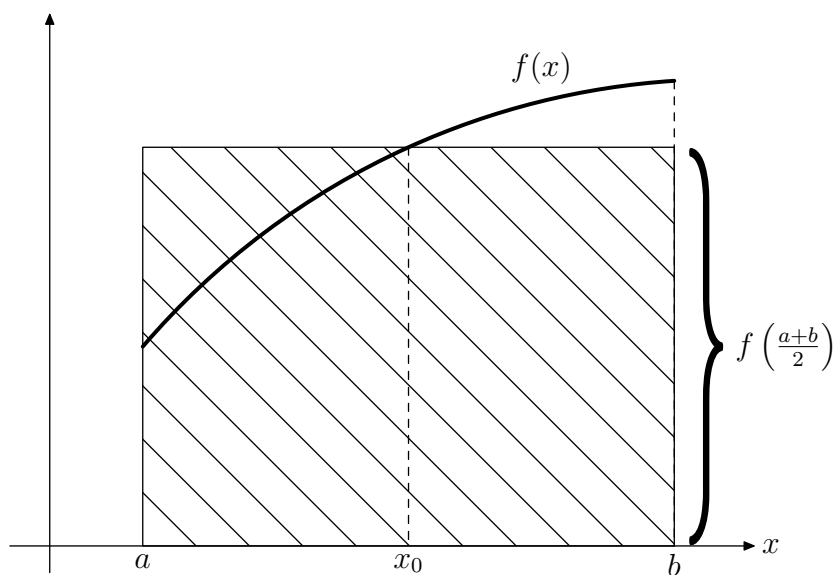
Kasutades integraalarvutuse keskväärtusteoreemi, saame ülesande väitele tuginedes

$$R_0(f) = \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-x_0)^2 dx = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi).$$

Sellisel oleme saanud valemi

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi),$$

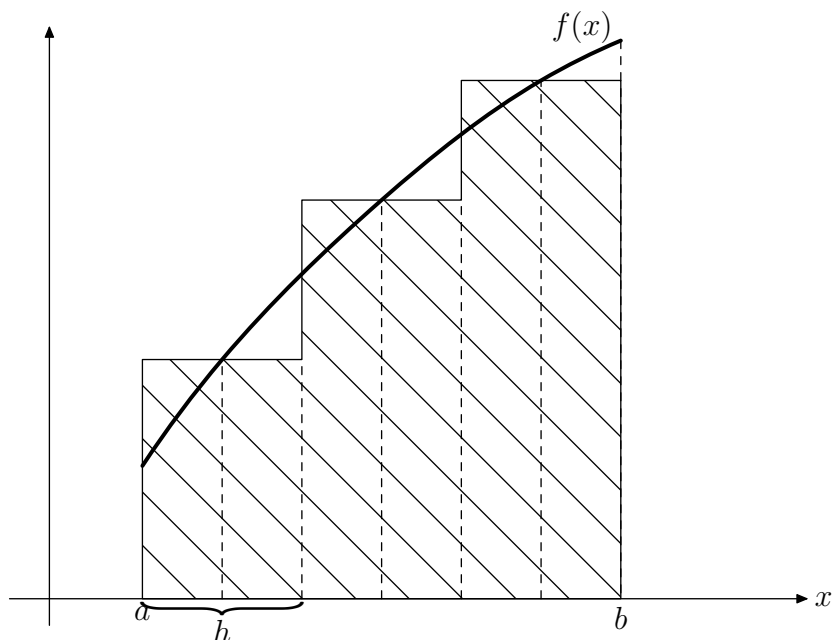
mida nimetatakse ristkülikvalemiks. Tema nimetus tuleb sellest, et geomeetriliselt tähendab kvadratuursumma ristküliku pindala, mis asendab integraali.



Liitvalem tuleb siin kujul

$$\int_a^b f(x)dx = h \left(f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f\left(a + \frac{3}{2}h\right) + \dots + f\left(b - \frac{h}{2}\right) \right) + \frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\xi).$$

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 45. Kas trapetsvalem, Simpsoni valem, Newtoni $\frac{3}{8}$ -valem, ristkülikvalem (liitvalemid) on interpolatsioonitüüpi?

§4. Kvadratuurvalemid jääkliikme peaosas

Vaatleme kvadratuurvalemite

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

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 $n \rightarrow \infty$ ja $h \rightarrow 0$.

Definitsioon 28. Kui küllalt sileda funktsiooni f korral $R_h(f) = K(f)h^q + \varrho_h(f)$, kus $\varrho_h(f) = O(h^{q+1})$, $K(f)$ on konstant, mis ei sõltu arvust h , seejuures eksisteerib sile funktsioon f nii, et $K(f) \neq 0$, siis osa $K(f)h^q$ nimetatakse jääkliikme peaosaks.

Leiame näiteks trapetsvalemis jääkliikme peaosas. 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 Tayloriga arendist

$$f''(\xi_i) = f''\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) + f'''(\eta_i) \left(\xi_i - \left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right)\right),$$

$\eta_i \in \left(x_{i-1} + \frac{h}{2}, \xi_i\right)$ või $\eta_i \in \left(\xi_i, x_{i-1} + \frac{h}{2}\right)$. Siis

$$R_h(f) = -\sum_{i=1}^n \frac{h^3}{12} \left(f''\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) + f'''(\eta_i) \left(\xi_i - \left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right)\right) \right)$$

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 ristkülikvalemis 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 $\left|\xi_i - \left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right)\right| \leq \frac{h}{2}$ 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 $K(f) = -\frac{1}{12} \int_a^b f''(x) dx = \frac{1}{12}(f'(a) - f'(b))$.

Ülesanne 46. Leida Simpsoni valemi ja Newtoni $\frac{3}{8}$ -valemi jääkliikme peaosad.

Jääkliikme peosa 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 47. Leida ristkülikvalemi jääkliikme peasa.

§5. Runge meetod

Vaatleme eelmise paragrahvi situatsiooni, kus jääkliikmes on välja eraldatud peasa ehk $R_h = Kh^q + \varrho_h$, $\varrho_h = O(h^{q+1})$. Kasutame integraali tähisena 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. Selles olukorras

$$\begin{aligned} R_h &= Kh^q + \varrho_h = I - I_h, \\ R_H &= KH^q + \varrho_H = I - I_H \end{aligned}$$

ning lahutades saame

$$\begin{aligned} K(H^q - h^q) + \varrho_H - \varrho_h &= I_h - I_H, \\ K &= \frac{I_h - I_H}{H^q - h^q} + \frac{\varrho_h - \varrho_H}{H^q - h^q}. \end{aligned}$$

Selle abil

$$R_h = Kh^q + \varrho_h = \frac{I_h - I_H}{\left(\frac{H}{h}\right)^q - 1} + \frac{\varrho_h - \varrho_H}{\left(\frac{H}{h}\right)^q - 1} + \varrho_h.$$

Vaatame edasi juhtu, kus $H = kh$, $k = \text{const} > 1$. Siis

$$R_h = \frac{I_h - I_H}{k^q - 1} + \frac{\varrho_h - \varrho_H}{k^q - 1} + \varrho_h.$$

Seejuures $\varrho_H = O(H^{q+1}) = O((kh)^{q+1}) = O(h^{q+1})$, seega

$$\frac{\varrho_h - \varrho_H}{k^q - 1} + \varrho_h = O(h^{q+1})$$

ning

$$R_h = \frac{I_h - I_H}{k^q - 1} + O(h^{q+1}).$$

Siit on näha, et jääkliikme ligikaudne väärtus on $\frac{I_h - I_H}{k^q - 1}$, sest see on sama järku peaosaga Kh^q . Levinuim arvutustes kasutatav juht on $k = 2$, siis on jääkliikme ligikaudne väärtus $\frac{I_h - I_{2h}}{2^q - 1}$. Näiteks trapetsvalemi korral $q = 2$ ning $R_h \approx \frac{I_h - I_{2h}}{3}$, Simpsoni ja Newtoni $\frac{3}{8}$ -valemi korral $q = 4$ ning $R_h \approx \frac{I_h - I_{2h}}{15}$. Rõhutame, et Runge meetodil leitakse jääkliikme ligikaudne väärtus, mis võib olla positiivne või negatiivne.