

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

С. В. Русаков, М. М. Бузмакова

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Курс лекций: часть 2

*Допущено методическим советом
Пермского государственного национального
исследовательского университета в качестве
учебного пособия для студентов, обучающихся
по направлению подготовки бакалавров
«Прикладная математика и информатика»*



Пермь 2020

УДК 519.6(075.8)

ББК 22.192я73

P88

Русаков С. В.

P88 Численные методы: курс лекций : учебное пособие / С. В. Русаков, М. М. Бузмакова ; Пермский государственный национальный исследовательский университет. – Пермь, 2020. – Ч. 2. – 112 с.

ISBN 978-5-7944-3565-8

Курс лекций содержит материалы по дисциплине «Численные методы», предназначенные для студентов механико-математического факультета. Он может быть использован в качестве учебного пособия как для освоения основной дисциплины, так и для подготовки к лабораторным, самостоятельным работам и итоговым контрольным мероприятиям.

Материалы курса лекций соответствуют учебной программе и УМК дисциплины. Курс включает основы теории приближений, численного дифференцирования и интегрирования, методов аппроксимации и интерполяции, методов решений обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений с частными производными. В конце каждой лекции приводится список вопросов и заданий для закрепления учебного материала. Кроме того, прилагается список литературы, который студенты могут использовать для более детального изучения какого-либо раздела курса.

УДК 519.6(075.8)

ББК 22.192я73

*Печатается по решению ученого совета механико-математического факультета
Пермского государственного национального исследовательского университета*

Рецензенты: кафедра прикладной математики Оренбургского государственного университета (зав. каф. – д-р техн. наук, профессор **И. П. Болодурин**);

зав. кафедрой информатики и вычислительной техники Пермского государственного гуманитарно-педагогического университета, канд. пед. наук, доцент **А. П. Шестаков**

ISBN 978-5-7944-3565-8

© ПГНИУ, 2020

© Русаков С. В., Бузмакова М. М., 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	6
Лекция 7. Теория приближений	7
7.1. Постановка задач приближения функций.....	7
7.2. Интерполирование функций.....	10
7.2.1. Разрешимость задачи.....	10
7.2.2. Интерполирование полиномами.....	11
7.3. Интерполирование многомерных функций.....	18
7.4. Сходимость интерполяционных процессов.....	19
7.5. Приложение 1.....	21
7.6. Приложение 2.....	23
7.6.1. Нахождение корней трансцендентных уравнений методом обратного интерполирования.....	23
7.6.2. Метод интерполяции для разворачивания векового определителя.....	24
7.7. Вопросы и задания к лекции.....	25
Лекция 8. Теория приближений (элементы теории сплайнов) ...	26
8.1. Обобщение задачи интерполирования. Интерполяционные полиномы Эрмита.....	26
8.2. Интерполирование сплайнами.....	28
8.2.1. Понятие сплайна.....	28
8.2.2. Интерполяционный кубический сплайн дефекта 1.....	30
8.3. Базисные сплайны с конечными носителями.....	33
8.3.1. Построение $S_{3,1}(f; x)$ через базисные сплайны.....	36
8.3.2. Экстремальные свойства кубических сплайнов дефекта 1.....	37
8.3.3. Многомерная интерполяция сплайнами.....	38
8.4. Вопросы и задания к лекции.....	39
Лекция 9. Дополнение к теории приближения (приближение в линейных пространствах)	40
9.1. Наилучшие приближения в линейном нормированном пространстве.....	40
9.2. Наилучшее приближение в гильбертовом пространстве (среднеквадратичное приближение).....	41
9.3. Наилучшее равномерное приближение.....	44
9.4. Ортогональные многочлены Чебышева.....	46
9.5. Приложение. Тригонометрическая интерполяция. Дискретное преобразование Фурье.....	49

9.6. Вопросы и задания к лекции.....	50
9.7. Лабораторная работа № 5 на тему «Интерполирование. Среднеквадратичное приближение».....	51
Лекция 10. Численное дифференцирование и интегрирование...	52
10.1. Формулы численного дифференцирования.....	52
10.1.1. Дифференцирование интерполяционных полиномов.....	52
10.1.2. Метод неопределенных коэффициентов.....	52
10.1.3. Вычислительная погрешность формул численного дифференцирования.....	55
10.2. Численное интегрирование.....	57
10.2.1. Формулы Ньютона-Котеса.....	57
10.2.2. Квадратурные формулы Гаусса.....	61
10.2.3. Интегралы от быстро осциллирующих функций и нерегулярные (несобственные) интегралы.....	62
10.2.4. Повышение точности интегрирования за счет разбиения отрезка на равные части (составные квадратурные формулы).....	64
10.2.5. Оценка погрешности результата интегрирования методом Рунге.....	65
10.2.6. Устойчивость численного интегрирования.....	66
10.3. Вычисление многомерных интегралов.....	67
10.3.1. Кубатурные формулы.....	67
10.3.2. Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний)...	67
10.4. Вопросы и задания к лекции.....	70
10.5. Лабораторная работа № 6 на тему «Численное интегрирование».....	71
Лекция 11. Численные методы решения задачи Коши для ОДУ..	72
11.1. Решение задачи Коши для ОДУ с помощью формулы Тейлора...	72
11.2. Методы Рунге–Кутты.....	74
11.2.1. Метод Эйлера.....	74
11.2.2. Методы типа «предиктор-корректор».....	75
11.2.3. Общая формулировка методов Рунге–Кутты.....	78
11.2.4. Частные случаи методов Рунге–Кутты.....	78
11.2.5. Автоматический контроль точности (идея метода Рунге) и автоматического выбора шага.....	80
11.3. Многошаговые методы.....	80
11.3.1. Общая схема многошаговых методов.....	80
11.3.2. Метод Адамса (1855 г.).....	81
11.4. Вопросы и задания к лекции.....	82

Лекция 12. Численное решение краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и интегральных уравнений.....	83
12.1. Метод стрельб.....	83
12.2. Конечно-разностная схема.....	85
12.3. Метод конечных элементов.....	87
12.4. Интегральные уравнения.....	89
12.5. Вопросы и задания к лекции.....	92
Лекция 13. Метод конечных разностей для решения уравнений в частных производных.....	93
13.1. Уравнения эллиптического типа.....	94
13.1.1. Краевые задачи для уравнений эллиптического типа.....	95
13.2. Уравнение параболического типа.....	95
13.3. Уравнение гиперболического типа.....	95
13.4. Конечно-разностные схемы для решения уравнения теплопроводности.....	96
13.4.1. Явная конечно-разностная схема.....	96
13.4.2. Неявная конечно-разностная схема.....	97
13.4.3. Двухслойная неявная схема с весами (схема Кранка-Николсона).....	98
13.4.4. Устойчивость решения.....	98
13.4.5. Консервативные разностные схемы.....	101
13.5. Многомерный случай.....	102
13.5.1. Первая краевая задача для двумерного случая.....	102
13.5.2. Уравнения эллиптического типа.....	104
13.6. Уравнение переноса.....	106
13.7. Вопросы и задания к лекции.....	108
13.8. Лабораторная работа № 7 на тему «Численное решение краевых задач для ОДУ. Численное решение уравнения теплопроводности».....	109
Список литературы.....	111

ВВЕДЕНИЕ

Настоящий курс лекций читается уже на протяжении нескольких десятилетий на специальности «Прикладная математика» (в настоящее время направление «Прикладная математика и информатика») механико-математического факультета Пермского государственного университета (с 2010 года Пермского государственного национального исследовательского университета). С переходом на стандарты 3-го поколения произошла замена традиционной триады «Знания, Умения, Навыки» понятием «Компетенции». Последние могут являться результатом всего процесса обучения в целом, а не отдельных его фрагментов. Все это привело к естественному результату, максимальному сокращению фундаментальных дисциплин в пользу сиюминутных прикладных. Произошло резкое снижение аудиторных часов большинства дисциплин «математического» цикла, в том числе и «Численных методов». Объем курса из годового превратился в семестровый, при этом часы, отводимые на лекции, сократились в два раза, а практические и лабораторные занятия – в три. В этих условиях встала задача максимально «сузить» дисциплину, сохранив ее основное содержание. Результат такой модернизации представлен в настоящем пособии, которое включает материал 14 лекций (28 часов) и 7 лабораторных работ (14 часов). При этом сделана попытка по возможности сочетать прикладную (алгоритмическую) часть курса с теоретическими основами «Вычислительной математики», уделяя особое внимание условиям применимости методов, их вычислительной устойчивости и сходимости, вычислительной сложности и т.п. Большой объем материала привел к необходимости разделить курс на две части.

Первая часть включает такие разделы, как: «Основы теории погрешности», «Численные методы линейной алгебры», «Решение нелинейных уравнений и поиск экстремумов». Практической отработке этих тем посвящены четыре лабораторные работы. Во второй части рассматриваются элементы численного анализа: «Теория приближений», «Численное дифференцирование и интегрирование», «Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений», «Решение уравнений в частных производных». В этой части предполагается выполнение трех лабораторных работ.

Лекция 7. Теория приближений

7.1. Постановка задач приближения функций

Пусть $x \in X$, $y \in Y$, $x \leftrightarrow y$ – отражение зависимости, где

- 1) $y = f(x)$ – функциональная;
- 2) $\{x_i, y_i\}$, $i = \overline{0, n}$ – табличная.

Определение 7.1. Задача о *приближении (аппроксимации) функций*: данную функцию $f(x)$ требуется приближенно заменить (*аппроксимировать*) некоторой функцией $\varphi(x)$ так, чтобы отклонение (в некотором смысле) $\varphi(x)$ от $f(x)$ в заданной области значений аргумента было наименьшим. Функция $\varphi(x)$ при этом называется *аппроксимирующей*.

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

Определение 7.2. *Интерполированием* функции $f(x)$ называется ее аппроксимация, при которой аппроксимирующая функция $\varphi(x)$ выбирается таким образом, что

$$\varphi(x_i) = y_i, \quad x_i \neq x_k \text{ при } i \neq k, \quad i = \overline{0, n},$$

где точки x_i называют *узлами интерполяции*, а функцию $\varphi(x)$ – *интерполирующей* функцией (рис.7.1).

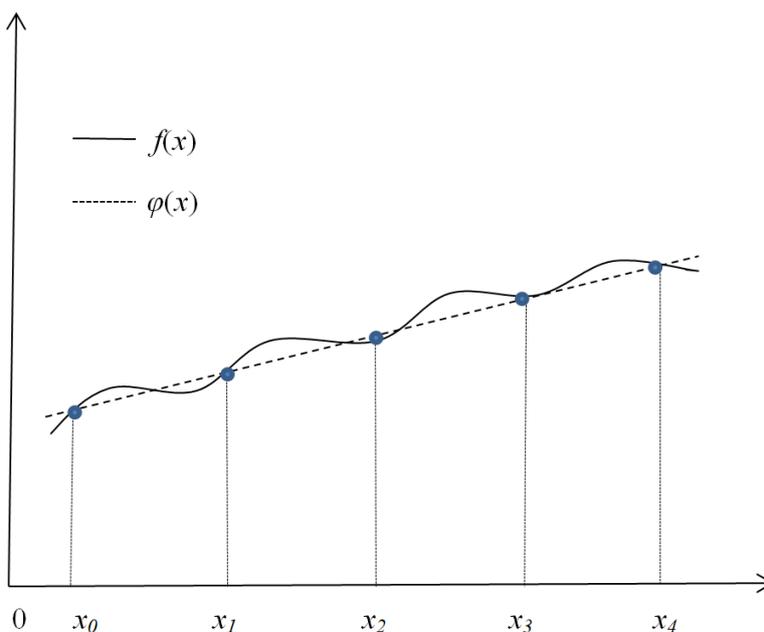


Рис.7.1. Интерполяция

Определение 7.3. Среднеквадратичным приближением называется мера отклонения аппроксимирующей функции $\varphi(x)$ от заданной $f(x)$ на множестве точек $\{x_i, y_i\}, i = \overline{0, n}$

$$S = \sum_{i=0}^n (\varphi(x_i) - y_i)^2.$$

Функция $\varphi(x)$ выбирается таким образом, чтобы величина S была наименьшей. В этом состоит суть метода наименьших квадратов. Среднеквадратичное приближение в случае непрерывной (интегральной) аппроксимации мерой отклонения имеет величину (см., например, рис. 7.2)

$$S = \int_a^b (\varphi(x) - f(x))^2 dx,$$

минимизация которой и служит критерием выбора функции $\varphi(x)$.

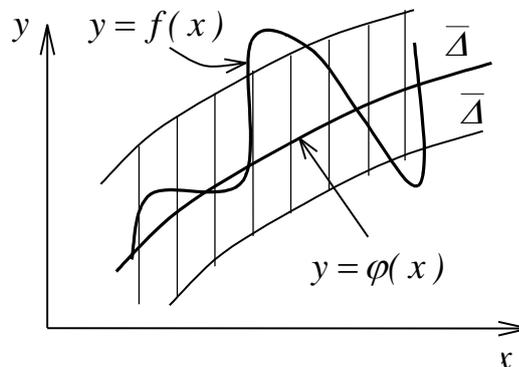


Рис.7.2. Среднеквадратичное приближение

Определение 7.4. Равномерной аппроксимацией называется такая аппроксимация, при которой требуется, чтобы во всех точках некоторого отрезка $[a, b]$ отклонение функции $\varphi(x)$ от $f(x)$ было по абсолютной величине наименьшим (рис. 7.3)

$$\max_{a \leq x \leq b} |\varphi(x) - f(x)|.$$

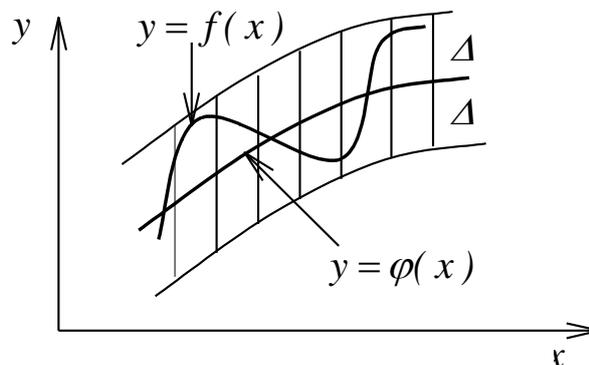


Рис.7.3. Равномерное приближение

Обозначим

$$\Delta = \max | \varphi(x) - f(x) | .$$

Тогда *среднеквадратичное отклонение* $\bar{\Delta} = \sqrt{S/n}$.

В общем случае поставленные задачи о построении аппроксимирующей функции $\varphi(x)$ являются некорректными, так как каждая из них может иметь бесконечное множество решений. Так, например, даже в случае $n = 1$, через две точки (x_0, y_0) , (x_1, y_1) можно провести сколь угодно много функций, удовлетворяющих условию интерполяции (например, рис. 7.4).

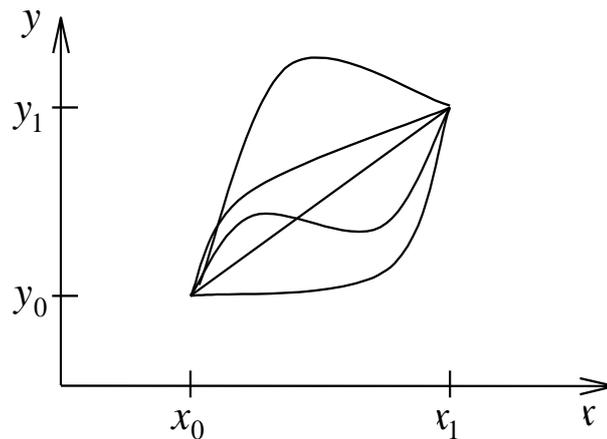


Рис.7.4. Некорректность задачи приближения

Одним из основных способов обеспечения однозначности решения является построение аппроксимирующей функции в виде линейной комбинации базисных. Пусть дана система *линейно независимых функций (базис)*

$$\{ \varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x), \dots \} .$$

Функции вида

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \dots + c_m\varphi_m(x),$$

где c_0, c_1, \dots, c_m — постоянные коэффициенты, называются *обобщенными многочленами* или *обобщенными полиномами*.

Тогда *задача о приближении* ставится следующим образом: данную функцию $f(x)$ требуется приближенно заменить (аппроксимировать) обобщенным полиномом $\varphi(x)$ так, чтобы *отклонение*, в некотором смысле, функции $\varphi(x)$ от $f(x)$ на заданном множестве $X = \{x\}$ было наименьшим. Этого можно достичь, например, за счет надлежащего выбора коэффициентов c_i $i = \overline{0, m}$. При этом обобщенный полином $\varphi(x)$ называется *аппроксимирующим*.

Формально это можно записать так:

$$\min_{\varphi \in F} \| f - \varphi \|,$$

где норма $\| f - \varphi \|$ устанавливает способ определения «близости» функций. F — класс функций, из которого выбирается аппроксимирующая.

7.2. Интерполирование функций

7.2.1. Разрешимость задачи

Дано

$$\{x_i, y_i\}, i = \overline{0, n}.$$

Пусть $\{\varphi_k(x)\}_{k=\overline{0, n}}$ — заданная система базисных функций и

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \dots + c_n\varphi_n(x).$$

Условия интерполяции

$$\varphi(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}.$$

Откуда

$$c_0\varphi_0(x_0) + c_1\varphi_1(x_0) + \dots + c_n\varphi_n(x_0) = y_0,$$

...

$$c_0\varphi_0(x_n) + c_1\varphi_1(x_n) + \dots + c_n\varphi_n(x_n) = y_n.$$

(7.1)

То есть, для определения неизвестных коэффициентов разложения требуется решить систему линейных алгебраических уравнений (7.1).

Определение 7.5. Система функций $\{\varphi_k(x)\}_{k=\overline{0, n}}$ называется *Чебышевской системой*, если при любом выборе узлов $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ отличен от нуля определитель системы

$$\det(\varphi) = \begin{vmatrix} \varphi_0(x_0), & \varphi_1(x_0), & \dots & \varphi_n(x_0) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_n), & \varphi_1(x_n), & \dots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0.$$

Тогда из решения СЛАУ (7.1) однозначно определяются коэффициенты $c_k, k = \overline{0, n}$.

Примеры $\{\varphi_k(x)\}_{k=\overline{0, n}}$ приведены ниже:

- 1) $\varphi_k(x) = x^k, \quad k=0, 1, \dots, n; \quad \varphi(x) = P_n(x)$ – полином степени n .
- 2) $\varphi_k(x) = \cos(kx), \quad k=0, 1, \dots, n; \quad \varphi(x)$ – тригонометрический многочлен.
- 3) дробно-рациональная функция

$$\varphi_{m,l}(x) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_m x^m}{\beta_0 + \beta_1 x + \dots + \beta_l x^l}.$$

7.2.2. Интерполирование полиномами

7.2.2.1. «Классический» базис

Выберем систему базисных функций вида:

$$\varphi_k(x) = x^k, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k.$$

Получим СЛАУ:

$$P_n(x_j) = \sum_{k=0}^n c_k x_j^k = y_j, \quad j = \overline{0, n}.$$

Определитель Вандермонда:

$$\det(P_n) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{n \geq k > m \geq 0} (x_k - x_m) \neq 0.$$

Затраты на решение СЛАУ методом LU разложения – величина

$O\left(\frac{2}{3}n^3\right)$, затраты на расчет одной точки по схеме Горнера $O(n)$:

$$P_n(x) = c_0 + x(c_1 + x(c_2 + x(\dots + c_n x))).$$

Рекуррентный алгоритм схемы Горнера:

$$P_n^{(0)}(x) = c_n,$$

$$P_n^{(k)}(x) = c_{n-k} + x \cdot P_n^{(k-1)}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Решение СЛАУ (7.1) при больших n – непростая трудоемкая задача, к тому же с ростом n быстро растет и число обусловленности соответствующей матрицы.

7.2.2.2. Интерполяционная формула Лагранжа

Выберем другой набор базисных функций, используя базис *полиномов Лагранжа* $\{L_k(x)\}$ степени n или *коэффициентов Лагранжа*:

$$L_k(x_i) = \begin{cases} 1, & \text{если } i=k, \\ 0, & \text{если } i \neq k, \quad i, k = \overline{0, n}. \end{cases}$$

Очевидно,

$$L_k(x) = \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\dots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\dots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\dots(x_k-x_n)}.$$

Полином $L_k(x)$ определяется единственным образом. В самом деле, пусть существует еще один полином $L_k^*(x)$: тогда их разность $L_k^*(x) - L_k(x) = q_n(x)$ – есть полином степени n , обращающийся в нуль в $(n+1)$ точках $x_i, i = \overline{0, n}$. Это возможно только при $L_k^*(x) - L_k(x) \equiv 0$.

Итак,

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k L_k(x).$$

Из условия интерполяции имеем:

$$y_i = P_n(x_i) = \sum_{k=0}^n c_k L_k(x_i) = c_i, \quad i = \overline{0, n}.$$

Тогда СЛАУ (7.1) сводится к диагональному виду. Отсюда получаем формулу Лагранжа:

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k L_k(x) = \sum_{k=0}^n y_k \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}.$$

Затраты на расчет значения интерполяционного многочлена в одном узле $O(n^2)$.

Оценка погрешности интерполирования. Пусть $P_n(x)$ приближает функцию $f(x)$, тогда *остаточный член (погрешность интерполирования)*:

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x).$$

Очевидно

$$R_n(x_k) = f(x_k) - P_n(x_k) = 0, \quad k = \overline{0, n}.$$

Оценим остаточный член погрешности в некоторой точке $x \in [a, b]$,
 $x \neq x_k, k = \overline{0, n}$.

Рассмотрим вспомогательную функцию

$$g(s) = f(s) - P_n(s) - K \cdot \omega_{n+1}(s),$$

где $s \in [a, b]$, а K – постоянная и $\omega_{n+1}(s) = (s - x_0)(s - x_1) \dots (s - x_n)$ – полином $(n+1)$ -ой степени, корни которого совпадают с узлами интерполяции. Выберем K из условия $g(x) = 0$:

$$K = \frac{f(x) - P_n(x)}{\omega_{n+1}(x)}.$$

Предположим, что функция имеет $n+1$ непрерывную производную на отрезке $[a, b] : f(s) \in C^{n+1}[a, b]$. Функция $g(s)$ имеет не менее $n+2$ нулей на $[a, b]$: в точках $x, x_k, k = \overline{0, n}$. Поэтому, по теореме Ролля, функция $g^{(n+1)}(s)$ по крайней мере один раз обращается в нуль на $[a, b]$. Тем самым $\exists \xi \in [a, b]$ такая, что

$$g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!K = 0 \rightarrow$$

$$f^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!K = (n+1)! \frac{f(x) - P_n(x)}{\omega_{n+1}(x)} \Rightarrow$$

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi) \omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \Rightarrow$$

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1} |\omega_{n+1}(x)|}{(n+1)!},$$

где $M_{n+1} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|$.

Замечание. Если $f(x)$ – алгебраический многочлен степени n , то интерполирование, проведенное по любым точкам $x_k, k = \overline{0, n}$, осуществляется точно, то есть $P_n(x) = f(x)$. Таким образом, интерполяция по заданному набору $n + 1$ точек является еще одним способом однозначного представления многочлена n -ой степени.

Пример 7.1. Пусть $f(x) = 3^x, (-1 \leq x \leq 1)$. Приблизим эту функцию полиномом $P_2(x)$ при $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$: $f(x_0) = \frac{1}{3}, f(x_1) = 1, f(x_2) = 3$.

Положим, что $P_2(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$. Получим СЛАУ:

$$c_0 - c_1 + c_2 = 1/3,$$

$$c_0 = 1,$$

$$c_0 + c_1 + c_2 = 3.$$

В результате решения которой, имеем $c_0 = 1, c_1 = 4/3, c_2 = 2/3$

$$P_2(x) = 1 + \frac{4x}{3} + \frac{2x^2}{3}.$$

Если строить интерполяционный многочлен по формуле Лагранжа, то получим тот же результат:

$$P_2(x) = \frac{1}{3} \cdot \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} + 1 \cdot \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)} + 3 \cdot \frac{(x+1)(x-0)}{(1+1)(1-0)} = 1 + \frac{4x}{3} + \frac{2x^2}{3}.$$

Оценим остаточный член $P_2(x)$ в точке $x = 0.1$: $f'''(x) = (3^x) \ln^3 3, M_3 = 3 \ln^3 3$

$$\approx 3.978, |R_2(x)| \leq \frac{M_3 |\omega_3(0.1)|}{3!} \leq 0.066.$$

7.2.2.3. Интерполяционная формула Ньютона

Основной недостаток формулы Лагранжа состоит в высоких вычислительных затратах, квадратичных относительно степени интерполяционного многочлена. Рассмотрим еще один способ построения интерполяционного многочлена – интерполяционную формулу Ньютона.

Выберем систему базисных функций вида:

$$\varphi_0(x) = \omega_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = \omega_1(x) = (x - x_0),$$

$$\varphi_2(x) = \omega_2(x) = (x - x_0)(x - x_1), \dots, \quad \varphi_n(x) = \omega_n(x).$$

Очевидное следующее свойство:

$$\omega_k(x_i) = 0 \quad \text{для } i = \overline{0, k-1}, \quad k = \overline{1, n}.$$

Интерполяционный многочлен запишется следующим образом:

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k \omega_k(x).$$

Условия интерполяции

$$P_n(x_i) = \sum_{k=0}^n c_k \omega_k(x_i) = \sum_{k=0}^{i-1} c_k \omega_k(x_i) = y_i, \quad i = \overline{0, n}.$$

Относительно коэффициентов c_k имеем СЛАУ с нижней треугольной матрицей, решение которой элементарно (обратный ход в методе Гаусса) и требует вычислительных затрат $O(n^2)$.

Для удобства вычислений применяют форму записи интерполяционного многочлена, связанную с *разделенными разностями*.

Разделенные разности первого порядка:

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}, \quad i, j = \overline{0, n}, \quad i \neq j.$$

Разделенные разности второго порядка:

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

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{f(x_2, x_3) - f(x_1, x_2)}{x_3 - x_1},$$

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

Аналогично определяются разделенные разности более высокого порядка. Например, если известны разности k -го порядка

$$f(x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k}), \quad f(x_{j+1}, x_{j+2}, \dots, x_{j+k+1}),$$

то разделенная разность $(k+1)$ -го порядка определяется как:

$$f(x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k+1}) = \frac{f(x_{j+1}, x_{j+2}, \dots, x_{j+k+1}) - f(x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+k})}{x_{j+k+1} - x_j}.$$

Построение разделенных разностей удобнее всего организовать в виде таблицы, где каждый последующий столбец определяется через предыдущий и разности соответствующих аргументов:

x_0	$f(x_0)$			
		$f(x_0, x_1)$		
x_1	$f(x_1)$		$f(x_0, x_1, x_2)$	
		$f(x_1, x_2)$		$f(x_0, x_1, \dots, x_n)$
x_2	$f(x_2)$		$f(x_1, x_2, x_3)$	
\vdots	\vdots	\vdots	$f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n)$	
		$f(x_{n-1}, x_n)$		
x_n	$f(x_n)$			

Свойства разделенных разностей:

$$1^{\circ} f(x_0, x_1, \dots, x_k) = \sum_{i=0}^k \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_k)} = \sum_{i=0}^k \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^k (x_i - x_j)}.$$

$$2^{\circ} f(x_k) = f(x_0) + f(x_0, x_1)\omega_1(x_k) + f(x_0, x_1, x_2)\omega_2(x_k) + \dots + f(x_0, x_1, x_2, \dots, x_k)\omega_k(x_k).$$

3^o Если $f(x)$ имеет на $[a, b]$ непрерывную производную порядка k , то на $[a, b]$ существует такая точка ξ , что:

$$f(x_0, x_1, \dots, x_k) = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}, \quad \xi \in [x_0, x_k].$$

Доказательство свойства 2^o.

При $k = 1$:

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

при $k = 2$:

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

Тогда $f(x_1, x_2) = f(x_0, x_1) + f(x_0, x_1, x_2)(x_2 - x_0)$. Далее по индукции.

Решение системы:

$$P_n(x_i) = \sum_{k=0}^{i-1} c_k \omega_k(x_i) = f(x_i), \quad i = \overline{0, n}.$$

$$f(x_0) = P_n(x_0) = c_0.$$

Далее

$$\begin{aligned} f(x_1) &= P_n(x_1) = c_0 + c_1 \omega_1(x_1) = f(x_0) + c_1 \omega_1(x_1) = \\ &= f(x_0) + c_1(x_1 - x_0) \rightarrow c_1 = f(x_0, x_1). \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} f(x_2) &= P_n(x_2) = c_0 + c_1 \omega_1(x_2) + c_2 \omega_2(x_2) = \\ &= f(x_0) + f(x_0, x_1) \omega_1(x_2) + c_2 \omega_2(x_2) \rightarrow c_2 = f(x_0, x_1, x_2). \end{aligned}$$

Продолжая действовать таким же образом, приходим к интерполяционной формуле Ньютона:

$$P_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)\omega_1(x) + f(x_0, x_1, x_2)\omega_2(x) + \dots + f(x_0, x_1, \dots, x_n)\omega_n(x).$$

Необходимо отметить, что вычислительные затраты на построение таблицы разделенных разностей составляют $O(n^2)$ арифметических операций, а при непосредственном интерполировании только $O(n)$ на каждую точку x , поскольку здесь также применима схема Горнера.

Поскольку интерполяционные формулы Лагранжа и Ньютона отличаются только формой записи, представление погрешности

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}$$

справедливо и для формулы Ньютона.

Рассмотрим разделенную разность в соответствии со свойством **1**^o:

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

и имеющую порядок $n+1$. Отсюда найдем

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

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

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

Отсюда следует, что: $\exists \xi \in [a, b]$, для которой (аналогично свойству **3**^o)

$$f(x, x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Затраты на построение таблицы разделенных разностей $O(n^2)$, на восстановление функции в одной точке $O(n)$.

Таким образом, формулу Ньютона можно рассматривать как некоторый аналог ряда Тейлора:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + (x-x_0)^2 \frac{f''(x_0)}{2!} + \dots$$

где вместо производных используются разделенные разности.

Пример 7.2. Пусть $f(x) = 3^x$, где $(-1 \leq x \leq 1)$. Построим таблицу разделенных разностей:

k	x_k	$f(x_k)$	$f(x_k, x_{k+1})$	$f(x_k, x_{k+1}, x_{k+2})$
0	-1	1/3		
			2/3	
1	0	1		2/3
			2	
2	1	3		

Откуда, по формуле Ньютона, получаем:

$$P_2(x) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}(x+1) + \frac{2}{3}(x+1)x = 1 + \frac{4}{3}x + \frac{2}{3}x^2.$$

То есть, мы имеем результат, аналогичный полученному результату в примере 7.1.

7.3. Интерполирование многомерных функций

Ограничимся случаем двух переменных, для которого отметим некоторые принципиальные затруднения, возникающие при построении интерполяционного многочлена.

Пусть на плоскости (x, y) заданы $n+1$ точка (x_0, y_0) , $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, в которых функция принимает соответственно значения z_0, z_1, \dots, z_n . Если искомым многочлен записать в виде:

$$P(x, y) = a_{00} + a_{10}x + a_{01}y + a_{20}x^2 + a_{11}xy + a_{02}y^2 + \dots \\ \dots + a_{m0}x^m y + a_{m-1,1}x^{m-1}y + \dots + a_{0m}y^m,$$

то условия интерполяции:

$$P(x_i, y_i) = z_i, \quad i = \overline{0, n}.$$

Число неизвестных $a_{i,j} = 1 + 2 + \dots + (m+1) = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$.

Тогда необходимо, чтобы $\frac{(m+1)(m+2)}{2} = n+1$.

Кроме того, СЛАУ относительно коэффициентов полинома не всегда разрешима. Так, при $n = 2$ получаем СЛАУ с определителем:

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

Но этот определитель будет обращаться в нуль, если три точки (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) лежат на одной прямой.

Аналогично, при $n = 5$ определитель обращается в нуль, если шесть узлов интерполирования лежат на одной кривой второго порядка и т.д. Таким образом, второе принципиальное затруднение: узлы интерполирования не могут быть расположены произвольно. В свою очередь, проверка того, что определители обращаются в нуль при достаточно больших n , становится весьма сложной задачей.

Третье принципиальное затруднение возникает при оценке остаточных членов. Теорема Ролля, которой мы пользовались ранее, в этом случае действовать не будет. Эти проблемы снимаются при специальном выборе узлов интерполирования – например, регулярных (прямоугольных) сетках, пример которых мы рассмотрим в лекции 9.

7.4. Сходимость интерполяционных процессов

Возникает вопрос, будет ли стремиться к нулю погрешность интерполирования $f(x) - P_n(x)$, если число узлов n неограниченно увеличивается. Ответ, вообще говоря, отрицательный. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

Множество точек x_k , $k = \overline{0, n}$ таких, что

$$a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$$

назовем *сеткой* на $[a, b]$ и обозначим через Ω_n . Рассмотрим последовательность сеток с возрастающим числом узлов:

$$\Omega_0 = \{x_0^{(0)}\}, \quad \Omega_1 = \{x_0^{(1)}, x_1^{(1)}\}, \dots,$$

$$\Omega_n = \{x_0^{(n)}, x_1^{(n)}, \dots, x_n^{(n)}\}, \dots$$

Пусть функция $f(x)$ определена и непрерывна на $[a, b]$. Тогда можно задать последовательность интерполяционных многочленов $P_n[f(x)]$, построенных для функции $f(x)$ по ее значениям в узлах сетки Ω_n .

Определение 7.6. Говорят, что интерполяционный процесс для функции $f(x)$ сходится в точке $x^* \in [a, b]$, если существует

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n[f(x)] = f(x^*).$$

Определение 7.7. Равномерная сходимость на отрезке $[a, b]$ означает, что

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - P_n[f(x)]| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Свойство сходимости или расходимости интерполяционного процесса зависит как от выбора последовательности сеток, так и от гладкости функции $f(x)$.

Пример 7.3. (С. Н. Берштейн, 1916 г.)

Пусть $f(x) = |x|$, $x \in [-1, 1]$, $x_i = -1 + n \cdot h$, $i = \overline{0, n}$, $h = \frac{2}{n}$.

Тогда последовательность $P_n[f(x)]$, не сходится к функции $|x|$ ни в одной точке отрезка $[-1, 1]$, кроме точек $-1, 0, 1$ (см. рис. 7.5).

Теорема Фабера. Какова бы ни была последовательность сеток Ω_n , найдется непрерывная на $[a, b]$ функция $f(x)$ такая, что последовательность интерполяционных многочленов $P_n[f(x)]$ не сходится к $f(x)$ равномерно на $[a, b]$.

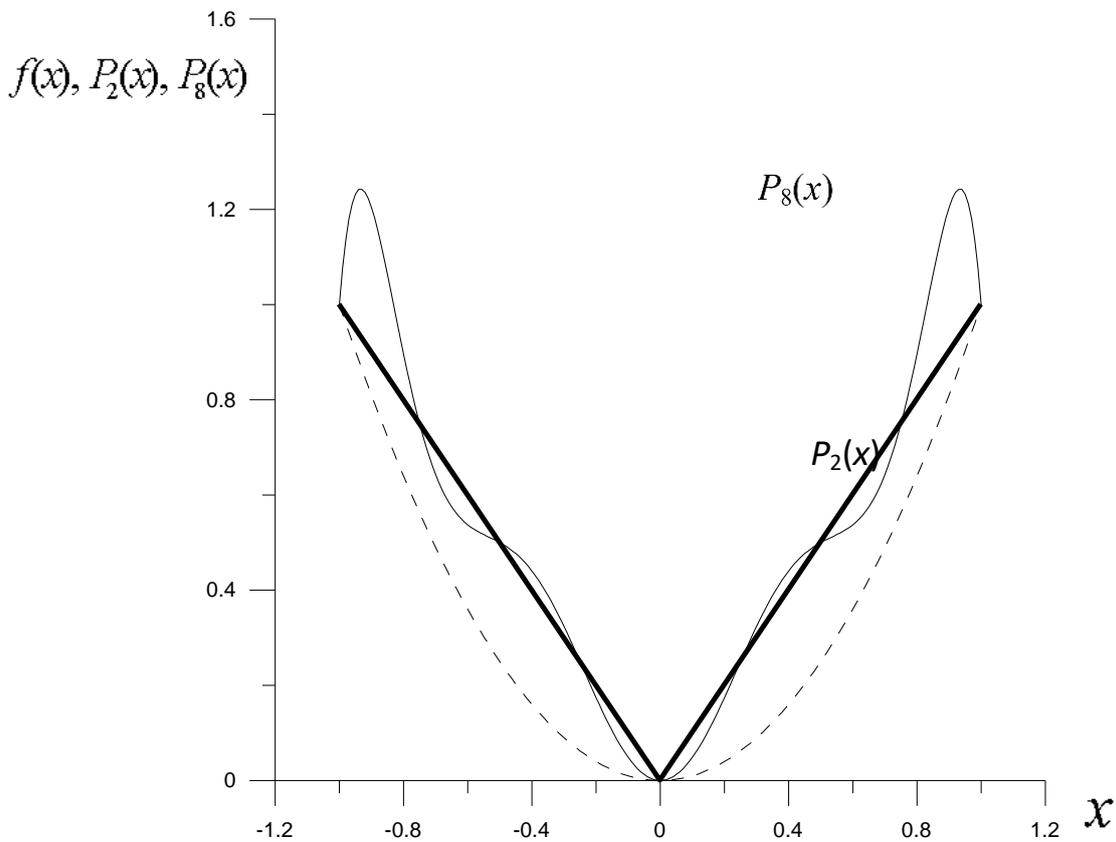


Рис. 7.5. Иллюстрация примера С.Н. Бернштейна

С другой стороны, справедлива другая теорема.

Теорема Марцинкевича. Если $f(x)$ непрерывна на $[a, b]$, то найдется такая последовательность сеток, для которой соответствующий интерполяционный процесс сходится равномерно на $[a, b]$.

Таким образом, мы видим, что сходимость процесса интерполяции зависит как от свойств интерполируемой функции, так и от способа построения последовательности сеток.

7.5. Приложение 1

Интерполяционная формула Ньютона для равноотстоящих узлов

В случае равностоящих узлов формула Ньютона несколько упрощается, пусть

$$x_k = x_0 + kh, f(x_k) = f(x_0 + kh) = y_k, k = \overline{0, n}.$$

В этом случае вместо разделенных разностей можно использовать *конечные разности*:

$\Delta y_k = f(x_k + h) - f(x_k) = y_{k+1} - y_k$ – первая конечная разность функции $f(x)$ в точке x_k .

$\Delta^m y_k = \Delta(\Delta^{m-1} y_k)$ – конечная разность m -го порядка.

Например,

$$\begin{aligned} \Delta^2 y_k &= \Delta(f(x_k + h) - f(x_k)) = \\ &= (f(x_k + 2h) - f(x_k + h)) - (f(x_k + h) - f(x_k)) = \\ &= f(x_k + 2h) - 2f(x_k + h) + f(x_k). \end{aligned}$$

Основные свойства оператора Δ (дельта), полагая $\Delta^0 y = y$:

1°. $\Delta(u + v) = \Delta u + \Delta v$;

2°. $\Delta(cu) = c\Delta u, c = const$;

3°. $\Delta^m(\Delta^n u) = \Delta^{m+n} u$, где m и n – целые неотрицательные числа;

4°. $f(x + nh) = \sum_{m=0}^n c_n^m \Delta^m f(x)$, где $c_n^m = \frac{n(n-1)\dots(n-(m-1))}{m!}$ – число сочетаний из n элементов по m ;

5°. $\Delta^n f(x) = f(x + nh) - c_m^1 f(x + (n-1)h) + c_m^2 f(x + (n-2)h) - \dots + (-1)^n f(x)$;

6°. $\Delta^n f(x) = h^n f^{(n)}(x + \theta nh), 0 < \theta < 1$.

Нетрудно показать, что для равноотстоящих узлов $f(x_0, x_1, \dots, x_k) = \frac{\Delta^k y_0}{k!h^k}$.

Пусть $q = \frac{x-x_0}{h}$, тогда

$$\omega_k(x) = (x - x_0)(x - x_0 - h) \dots (x - x_0 - (k - 1)h) = qh(qh - h) \dots (qh - (k - 1)h) = h^k q(q - 1) \dots (q - (k - 1)).$$

Первая интерполяционная формула Ньютона:

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)\Delta^2 y_0}{2!} + \dots + \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)\Delta^n y_0}{n!}.$$

Остаточный член:

$$R_n(x) = \frac{h^{n+1} q(q-1) \dots (q-n) f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Вторая интерполяционная формула Ньютона ($q = \frac{x - x_n}{h}$):

$$P_n(x) = y_n + q y_{n-1} + \frac{q(q+1)\Delta^2 y_{n-2}}{2!} + \dots + \frac{q(q+1)\dots(q+n-1)\Delta^n y_0}{n!}.$$

где конечные разности берутся по нижнему краю таблицы.

В зависимости от порядка обхода таблицы конечных разностей при ручном счете используется еще целый ряд интерполяционных формул (Гаусса, Стирлинга, Бесселя). Обычно при практических вычислениях интерполяционная формула Ньютона обрывается на членах, содержащих такие разности, которые в пределах заданной точности можно считать постоянными. Предполагая, что $\Delta^{n+1}y$ почти постоянна для функции $y = f(x)$ приближенно можно посчитать:

$$f^{(n+1)}(\xi) \approx \frac{\Delta^{n+1} y_0}{h^{n+1}}.$$

В этом случае остаточный член первой интерполяционной формулы Ньютона приближенно равен

$$R_n(x) \approx \frac{q(q-1)\dots(q-n)\Delta^{n+1} y_0}{(n+1)!}.$$

7.6. Приложение 2

7.6.1. Нахождение корней трансцендентных уравнений методом обратного интерполирования

Под задачей обратного интерполирования понимается задача нахождения аргумента x таблично заданной функции $f(x)$, соответствующего некоторому значению этой функции. При этом значения функции и аргумента не совпадают с уже известными (табличными) значениями и требуется существование обратной функции $x = f^{-1}(y)$.

Метод обратного интерполирования применяется для численного решения скалярных уравнений вида $f(x) = 0$. Рассмотрим его подробнее.

Пусть требуется определить корень уравнения

$$f(x) = 0,$$

и удалось выделить (например, графически) отрезок $x \in [a, b]$, на котором функция $f(x)$ монотонно возрастает (или убывает) и содержит корень.

Выберем на этом отрезке точки $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ и вычислим значения $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$. В силу монотонности функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ имеем $y_0 < y_1 < \dots < y_n$ (или $y_0 > y_1 > \dots > y_n$). Тогда мы можем построить интерполяционный многочлен $P_n(y)$, для которого $P_n(y_i) = x_i$, $i = \overline{0, n}$.

Очевидно $P_n(0) \approx x^*$, где x^* – корень уравнения. При этом погрешность решения можно определить с помощью формулы

$$|f(y) - P_n(y)| \leq \frac{M_{n+1} |\omega_{n+1}(y)|}{(n+1)!},$$

\max
где $M_{n+1} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|$.

7.6.2. Метод интерполяции для разворачивания векового определителя

Интерполяционный метод успешно применяется для определения векового определителя матрицы. Пусть дана матрица A , ее вековой определитель имеет вид:

$$D(\lambda) = |A - \lambda E|.$$

Данный вековой определитель можно найти численно методом интерполяции в виде многочлена:

$$P_n(\lambda) = \lambda^n - p_1 \lambda^{n-1} - \dots - p_n.$$

Известно, что полином степени n , соответствующий вековому определителю, вполне определяется своими значениями в точке и может быть восстановлен по этим значениям с помощью какой-либо интерполяционной формулы.

Рассмотрим функцию $f(t) = |A - tE|$, найдем ее значения в некотором наборе точек $\{t_k\}_{k=1, \overline{n}}$. Тогда получим СЛАУ вида:

$$p_1 t_1^{n-1} + \dots + p_n = t_1^n - f(t_1),$$

...

$$p_1 t_n^{n-1} + \dots + p_n = t_n^n - f(t_n),$$

решив которую, найдем коэффициенты характеристического многочлена.

На самом деле эти коэффициенты можно явно не определять, то есть не решать систему. Очевидно, $P_n(t) = t^n - Q_{n-1}(t)$, где $Q_{n-1}(t)$ – интерполяционный многочлен $(n-1)$ -го порядка, построенный по таблично

заданной функции $\{t_k, f(t_k)\}_{k=1, \overline{n}}$. Значения многочлена $Q_{n-1}(t)$ можно вычислять по формуле Лагранжа или Ньютона, и тогда задача на определение собственных значений сведется к решению трансцендентного уравнения $f(t) = P_n(t)$. Этот метод применим и для разворачивания определителей

$|A - \lambda B|$, где $B = (b_{ij})_{i, j=1, \overline{n}}$.

Замечание. Относительно выбора точек t_k , можно рекомендовать следующий способ:

$$t_k = -\|A\| + (k-1) \frac{2\|A\|}{n-1}, \quad k = \overline{1, n}.$$

7.7. Вопросы и задания к лекции

1. Что такое *аппроксимация*? Какая функция называется *аппроксимирующей*, а какая *аппроксимируемой*?
2. Что такое *интерполяция*?
3. Какие интерполяционные формулы вы знаете?
4. Какое основное требование должно выполняться, чтобы для задачи интерполирования существовало решение, и притом единственное.
5. Постройте интерполяционный многочлен $P_2(x)$ с узлами в точках 0, 1, 2 для функции $f(x) = x^3 + 2x + 1$. Найдите оценку погрешности интерполяции в точке $x = 1.5$.
6. Постройте интерполяционный многочлен $P_1(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y$ с узлами интерполяции (0,0), (1,0), (0,1) для функции $f(x, y) = 1 + x^2 + y^3$.

Лекция 8. Теория приближений (элементы теории сплайнов)

8.1. Обобщение задачи интерполирования. Интерполяционные полиномы Эрмита

Пусть табулирована не только функция $f(x)$, но и ее производные до некоторого порядка. Тогда можно потребовать, чтобы в некоторых узлах совпадали не только значения функций $f(x)$ и $\varphi(x)$, но и значения их производных вплоть до некоторого порядка. Такую интерполяцию называют *эрмитовой*.

Пусть $\forall x_k$, где $k = \overline{0, m}$ известны $f(x_k), f'(x_k), \dots, f^{(N_k-1)}(x_k)$, т.е. всего известно $N_0 + N_1 + \dots + N_m$ величин. Тогда возникает задача – построить алгебраический многочлен:

$$H_n(x) = \sum_{j=0}^n c_j x^j,$$

где $n = N_0 + N_1 + \dots + N_m - 1$, для которого выполняются условия интерполяции:

$$H_n^{(i)}(x_k) = f^{(i)}(x_k), \quad n = \overline{0, m}, \quad i = \overline{0, N_k - 1}. \quad (8.1)$$

Многочлен $H_n(x)$ является *интерполяционным полиномом Эрмита* для функции $f(x)$. Число N_k называется *кратностью узла x_k* . Число неизвестных в СЛАУ (8.1) равно $N_0 + N_1 + \dots + N_m = n + 1$. Поэтому достаточно показать, что однородная система

$$H_n^{(i)}(x_k) = 0, \quad k = \overline{0, m}, \quad i = \overline{0, N_k - 1},$$

имеет только тривиальное решение $c_0 = c_1 = \dots = c_n = 0$.

Условия (8.1) означают, что число x_k является корнем кратности N_k многочлена $H_n(x)$. Таким образом, многочлен $H_n(x)$ имеет всего с учетом кратности не менее $N_0 + N_1 + \dots + N_m = n + 1$ корня на $[a, b]$. Поскольку степень $H_n(x)$ равна n , то этот многочлен тождественно равен нулю, следовательно, равны нулю его коэффициенты, и однородная система уравнений имеет единственное решение: $c_0 = c_1 = \dots = c_n = 0$. Таким образом, неоднородная система однозначно разрешима при любых правых частях.

Для эрмитовых интерполяционных многочленов справедлива оценка погрешности интерполирования

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

где $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)^{N_0} (x - x_1)^{N_1} \cdots (x - x_m)^{N_m}$.

Пример 8.1. Пусть $x_0 < x_1$ – точки, в которых заданы значения $f(x_0) = f_0$, $f(x_1) = f_1$, $f'(x_0) = f'_0$, $f'(x_1) = f'_1$. Необходимо построить многочлен Эрмита $H_3(x)$ такой, что

$$H_3(x_0) = f_0, \quad H_3(x_1) = f_1, \quad H'_3(x_0) = f'_0, \quad H'_3(x_1) = f'_1. \quad (8.2)$$

Решение. Будем искать многочлен Эрмита в виде

$$H_3(x) = H_3(x_0 + \tau h_0) = \varphi_{0,0}(\tau) f_0 + \varphi_{0,1}(\tau) f_1 + h_0 \varphi_{1,0}(\tau) f'_0 + h_0 \varphi_{1,1}(\tau) f'_1,$$

где $h_0 = x_1 - x_0$, $\tau = \frac{x - x_0}{h_0}$, $\tau \in [0, 1]$.

$$\text{Отсюда } H'_3(x) = \frac{\varphi'_{0,0}(\tau) f_0 + \varphi'_{0,1}(\tau) f_1}{h_0} + \varphi'_{1,0}(\tau) f'_0 + \varphi'_{1,1}(\tau) f'_1.$$

В соответствии с соотношениями (8.2) имеем:

$$\begin{aligned} \varphi_{0,0}(0) &= 1, & \varphi_{0,1}(0) &= 0, & \varphi_{1,0}(0) &= 0, & \varphi_{1,1}(0) &= 0; \\ \varphi_{0,0}(1) &= 0, & \varphi_{0,1}(1) &= 1, & \varphi_{1,0}(1) &= 0, & \varphi_{1,1}(1) &= 0; \\ \varphi'_{0,0}(0) &= 0, & \varphi'_{0,1}(0) &= 0, & \varphi'_{1,0}(0) &= 1, & \varphi'_{1,1}(0) &= 0; \\ \varphi'_{0,0}(1) &= 0, & \varphi'_{0,1}(1) &= 0, & \varphi'_{1,0}(1) &= 0, & \varphi'_{1,1}(1) &= 1. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Из этих условий следует, что:

$$\begin{aligned} \varphi_{0,1}(\tau) &= \varphi_{0,0}(1 - \tau) = \varphi_0(\tau), \\ \varphi_{1,1}(\tau) &= -\varphi_{1,0}(1 - \tau) = \varphi_1(\tau). \end{aligned}$$

Из (8.3) нетрудно получить, что:

$$\varphi_0(\tau) = (1 + 2\tau)(1 - \tau)^2, \quad \varphi_1(\tau) = \tau(1 - \tau)^2.$$

При этом получаем погрешность интерполяции

$$f(x) - H_3(x) = \frac{f^{IV}(\xi)(x - x_0)^2(x - x_1)^2}{24} = \frac{f^{IV}(\xi)h_0^4\tau^2(1 - \tau)^2}{24},$$

и

$$|f(x) - H_3(x)| \leq \frac{h_0^4}{384} M_4, \quad M_4 = \max_{x \in [x_0, x_1]} \left(\left| f^{(IV)}(x) \right| \right).$$

8.2. Интерполирование сплайнами

8.2.1. Понятие сплайна

Определение 8.1. Сплайн-функцией или сплайном называют кусочно-полиномиальную функцию, определенную на отрезке $[a, b]$ и имеющую на этом отрезке некоторое число непрерывных производных.

Определение 8.2. Пусть на отрезке $[a, b]$ задана некоторая, достаточно гладкая, функция $f(x)$ и сетка с узлами $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$. Тогда функция $S_{n,v}(f; x)$ называется *интерполяционным сплайном* степени n дефекта v (где v – целое число, $0 \leq v \leq n \pm 1$), соответствующим данной функции $f(x)$ и данным узлам $\{x_i\}$, $i = \overline{0, N}$, если на каждом отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ функция $S_{n,v}(f; x)$ является многочленом степени n и

$$S_{n,v}(f; x) \in C^{n-v}[a, b], \quad (8.4)$$

то есть в узлах сетки сплайн непрерывен вместе со своими производными до порядка $(n - v)$ включительно. Кроме того, в узлах сетки сплайн совпадает со значениями функции $f(x)$ и ее производных вплоть до K -го порядка:

$$S_{n,v}^{(r)}(f; x_i) = f^{(r)}(x_i), \quad i = \overline{0, N}, \quad r = \overline{0, K}. \quad (8.5)$$

Очевидно, последнее условие обеспечивает гладкость функции $S_{n,v}(f; x)$ вплоть до производных K -го порядка, откуда следует естественное ограничение

$$n - v \geq K. \quad (8.6)$$

Учитывая то, что на каждом отрезке сетки сплайн $S_{n,v}(f; x)$ – полином n -го для его построения требуется:

на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ – $(n+1)$ условий,

на отрезке $[a, b]$ – $(n+1)N$ условий.

Имеем:

из (8.5) на $[x_i, x_{i+1}]$ – $2 \cdot (K+1)$ условий,

из (8.5) на $[a, b]$ – $2 \cdot (K+1)N$ условий,

из (8.4) на $[a, b]$ – $(n-v-K)(N-1)$ условий.

Баланс:

$$\begin{aligned} B &= (n+1)N - 2(K+1)N - (n-\nu-K)(N-1) = \\ &= (n+1-2(K+1)-(n-\nu-K))N + (n-\nu-K) = \\ &= (\nu-K-1)N + (n-\nu-K). \end{aligned}$$

Положим:

$$\nu = K+1. \quad (8.7)$$

В итоге получаем, что:

$$B=(n-\nu-K).$$

При $K = 0$ (в условиях (8.5) используются только значения $f(x_i)$) из соотношений (8.7) следует $\nu=1$ и соответствующие сплайны имеют название *интерполяционных сплайнов дефекта 1*; при $K > 0$ – имеем эрмитовые сплайны.

Рассмотрим два простых примера сплайнов из двух этих классов.

Пусть $S_{1,1}(f;x)$ – интерполяционный сплайн первого порядка дефекта 1.

Тогда очевидно, что:

$$B = (n - \nu - K) = 0.$$

Представим интерполяционный сплайн в виде:

$$S_{1,1}(f;x) = (1-\tau)f_i + \tau f_{i+1}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = \overline{0, N-1},$$

где $\tau = \frac{(x-x_i)}{h_i}$, $h_i = x_{i+1} - x_{x_i}$, $f_i = f(x_i)$.

При этом оценка погрешности:

$$\omega_2(x) = (x-x_i)(x-x_{i+1}) = -h_i^2\tau(1-\tau),$$

$$\left| f(x) - S_{1,1}(f;x) \right| \leq \frac{1}{2} M_2 \cdot \max_{i=0, N-1} (h_i^2) \cdot \max_{\tau \in [0,1]} \tau(1-\tau) \leq \frac{M_2 h^2}{8},$$

где

$$M_2 = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|,$$

$$h = \max_{i=0, N-1} (h_i).$$

Получили сходимость процесса аппроксимации решения на последовательности сеток с квадратичной скоростью.

Пусть $S_{3,2}(f; x)$ – эрмитовый кубический сплайн дефекта 2.

Тогда $K = 1$ и из (8.7) $\Rightarrow \nu = 2$. Отсюда: $B = (n - \nu - K) = (3 - 2 - 1) = 0$.

Задача построения сплайна однозначно разрешима. Очевидно, на каждом из отрезков $[x_i, x_{i+1}]$ сплайн $S_{3,2}(f; x)$ совпадает с эрмитовым интерполяционным многочленом $H_3(x)$.

$$S_{3,2}(f; x) = H_3([x_i, x_{i+1}], x) = \varphi_0(\tau) f_i + \varphi_0(1 - \tau) f_{i+1} + h_i (\varphi_1(\tau) f'_i - \varphi_1(1 - \tau) f'_{i+1}),$$

$$x \in [x_i, x_{i+1}], i = \overline{0, N-1},$$

где

$$\varphi_0(\tau) = (1 + 2\tau)(1 - \tau)^2, \quad \varphi_1(\tau) = \tau(1 - \tau)^2,$$

$$\tau = \frac{x - x_i}{h_i}, \quad h_i = x_{i+1} - x_i.$$

В этом случае погрешность аппроксимации:

$$|f(x) - S_{3,2}(f; x)| \leq M_4 \cdot \max_{i=0, N-1} (h_i^4) \cdot \max_{i \in [0,1]} \frac{\tau^2 (1 - \tau)^2}{24} \leq \frac{M_4 h^4}{384},$$

где $M_4 = \max_{x \in [a, b]} |f^{IV}(x)|, \quad h = \max_{i=0, N-1} (h_i).$

8.2.2. Интерполяционный кубический сплайн дефекта 1

Пусть функция $f(x)$ задана таблично:

$$\{x_i, f_i\}, i = \overline{0, N}.$$

В этом случае $K = 0, \nu = 1 \rightarrow B = (n - \nu - K) = (3 - 1 - 0) = 2$, т.е. недостает двух условий. Для определенности положим, что заданы

$$f'_0 = f'(x_0), \quad f'_N = f'(x_N). \quad (8.8)$$

Из условия гладкого сопряжения (8.4) вытекает, что:

$$S'_{3,1}(f; x_i - 0) = S'_{3,1}(f; x_i + 0), i = \overline{1, N-1},$$

$$S''_{3,1}(f; x_i - 0) = S''_{3,1}(f; x_i + 0), i = \overline{1, N-1}.$$

Обозначим

$$m_i = S'_{3,1}(f; x_i \pm 0), i = \overline{1, N-1}. \quad (8.9)$$

Причем, из дополнительных условий (8.8) очевидно, что

$$m_0 = S'_{3,1}(f; x_0) = f'_0, \quad m_N = S'_{3,1}(f; x_N) = f'_N.$$

Обозначения (8.9) позволяют задать сплайн $S_{3,1}(f; x)$ формулой вида:

$$S_{3,1}(f; x) = \varphi_0(\tau)f_i + \varphi_0(1-\tau)f_{i+1} + h_i(\varphi_1(\tau)m_i - \varphi_1(1-\tau)m_{i+1}), \\ x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = \overline{0, N-1}.$$

Очевидно, в этом случае:

$$S_{3,1}(f; x_i) = f_i, \quad S'_{3,1}(f; x_i) = m_i, \quad i = \overline{0, N}.$$

Величины m_i ($i = \overline{0, N-1}$) определим с помощью условия гладкого сопряжения:

$$S''_{3,1}(f; x_i - 0) = S''_{3,1}(f; x_i + 0), \quad i = \overline{1, N-1},$$

где

$$S''_{3,1}(f; x_i - 0) = \frac{1}{h_{i-1}^2} (\varphi''_0(1)f_{i-1} + \varphi''_0(0)f_i) + \frac{1}{h_{i-1}} (\varphi''_1(1)m_{i-1} - \varphi''_1(0)m_i), \\ S''_{3,1}(f; x_i + 0) = \frac{1}{h_i^2} (\varphi''_0(0)f_i + \varphi''_0(1)f_{i+1}) + \frac{1}{h_i} (\varphi''_1(0)m_i - \varphi''_1(1)m_{i+1}).$$

Откуда

$$\lambda_i m_{i-1} + 2m_i + \mu_i m_{i+1} = 3\lambda_i(f_i - f_{i-1})/h_{i-1} + 3\mu_i(f_{i+1} - f_i)/h_i,$$

где

$$\mu_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}, \quad \lambda_i = \frac{h_i}{h_{i-1} + h_i} = 1 - \mu_i, \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Для определения m_i получили СЛАУ с трехдиагональной матрицей, имеющей диагональное преобладание, очевидно, что в этом случае решение этой системы существует и единственно. Из этого факта следует существование соответствующего сплайна.

Выполним оценку погрешности интерполяции:

$$\|f(x) - S_{3,1}(f; x)\| = \|f(x) - S_{3,1}(f; x) + S_{3,2}(f; x) - S_{3,2}(f; x)\| \leq \\ \leq \|f(x) - S_{3,2}(f; x)\| + \|S_{3,2}(f; x) - S_{3,1}(f; x)\| \leq \\ \leq \|f(x) - S_{3,2}(f; x)\| + \max_{i=0, N-1} (h_i(|\varphi_1(\tau)| \cdot |f'_i - m_i| + \\ + \varphi_1(1-\tau)| \cdot |f'_{i+1} - m_{i+1}|)) \leq \\ \leq \|f(x) - S_{3,2}(f; x)\| + \frac{8}{27} h \cdot \max_{i=0, N} |f'_i - m_i|.$$

Известно, что для достаточно гладких функций $f(x)$ справедливо:

$$\max_{i=0, N} |f'_i - m_i| \leq \frac{M_4}{24} h^3.$$

Отсюда

$$\|f(x) - S_{3,1}(f; x)\| \leq (1/81 + 1/384)h^4 M_4.$$

Таким образом, на последовательности сеток мы имеем равномерную сходимость процесса интерполяции с четвертым порядком (уменьшение шага сетки в 2 раза приводит к уменьшению погрешности в 16 раз).

В случае равномерной сетки оценки могут быть улучшены:

$$\max_{i=0, N} |f'_i - m_i| \leq \frac{M_5}{60} h^4,$$

$$\|f(x) - S_{3,1}(f; x)\| \leq \tau^2(1-\tau)^2 \frac{h^4}{24} M_4 + (\varphi_1(\tau) + \varphi_1(1-\tau)) \frac{h^5}{60} M_5 \leq \left(\frac{M_4}{384} + \frac{M_5 h}{240} \right) h^4.$$

Алгоритм построения интерполяционного кубического сплайна дефекта 1:

- 1) Решая СЛАУ методом прогонки, находим величины m_i , $i = \overline{0, N}$, затраты при этом будут $O(N)$.
- 2) Определив отрезок $[x_i, x_{i+1}]$, которому принадлежит точка x , вычисляем:

$$S_{3,1}(f; x) = \varphi_0(\tau)f_i + \varphi_0(1-\tau)f_{i+1} + h_i(\varphi_1(\tau)m_i - \varphi_1(1-\tau)m_{i+1}).$$

В случае, когда необходимо выполнить интерполяцию в целом наборе точек x , выполняется только пункт 2).

Пример 8.2. Построить интерполирующую функцию в виде сплайна $S_{3,1}(f; x)$ для функции $f(x) = \sin(x)$, заданную в четырех точках $x_i = i\pi/6$, $i = 0, 1, 2, 3$.

В этом случае неизвестные m_1 и m_2 определяются из системы уравнений:

$$\begin{aligned} m_0 &= f'_0, \\ m_0 + 4m_1 + m_2 &= 3(f_2 - f_0)/h, \\ m_1 + 4m_2 + m_3 &= 3(f_3 - f_1)/h, \\ m_3 &= f'_3, \end{aligned}$$

где $h = \pi/6$.

i	x_i	f_i	m_i	$f'(x_i)$
0	0	0.0000	1.0000	1.0000
1	$\pi/6$	0.5000	0.8655	0.8660
2	$\pi/3$	0.8660	0.4998	0.5000
3	$\pi/2$	1.0000	0.0000	0.0000

$$M_4 = 1 \Rightarrow |f(x) - S_{3,1}(f; x)| \leq 0,01495 \cdot \left(\frac{\pi}{6}\right)^4 \approx 0,00112.$$

Таким образом, мы видим достаточно высокое качество приближения даже на «грубой» сетке.

8.3. Базисные сплайны с конечными носителями

Функция $S_n(x)$, заданная на отрезке $[a, b]$ и имеющая $n - \nu$ непрерывных производных, называется сплайном степени n дефекта ν ($\nu -$ целое число, $0 \leq \nu \leq n + 1$) с узлами на сетке $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$, если на каждом отрезке

$[x_l, x_{l+1}]$ функция $S_n(x)$ является многочленом степени n , т.е.:

$$S_n(x) = \sum_{k=0}^n a_l^k (x - x_l)^k,$$

где $x \in [x_l, x_{l+1}]$, $l = 0, 1, 2, \dots, N - 1$.

Множество сплайнов, удовлетворяющих данному уравнению, образуют линейное пространство. В этом пространстве можно задать различные системы базисных функций.

Рассмотрим базисные сплайны с конечными (финитными) носителями минимальной длины (B -сплайны), которые образуют базис конечномерного пространства размерности $N + n - 1$ сплайнов степени n дефекта 1.

Построение такого базиса рассмотрим на примере кубических сплайнов дефекта 1. Сетку $\{x_i, i = \overline{0, N}; a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b\}$ дополним узлами

$$x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < a \text{ и } b < x_{N+1} < x_{N+2} < x_{N+3}.$$

Определение 8.3. Назовем базисными сплайнами с конечными носителями минимальной длины (B -сплайнами) функции $B_i(x)$, $i = \overline{-1, N+1}$, обладающие следующими свойствами (рис. 8.1, 8.2):

$$1) B_i(x) = \begin{cases} > 0, & x \in (x_{i-2}, x_{i+2}) \\ \equiv 0, & x \notin (x_{i-2}, x_{i+2}) \end{cases}, \quad (8.10)$$

2) $B_i(x)$ при $x \in (x_{i-2}, x_{i+2})$ – кубический сплайн дефекта 1.

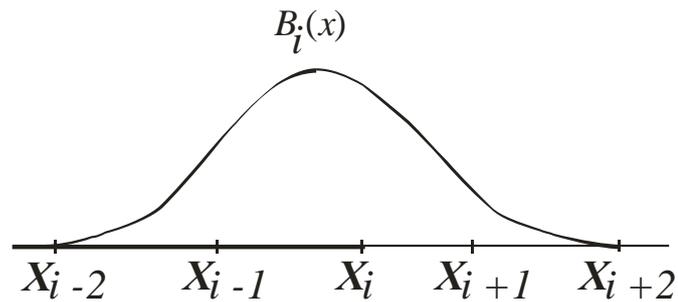


Рис. 8.1. Вид базисного сплайна $B_i(x)$

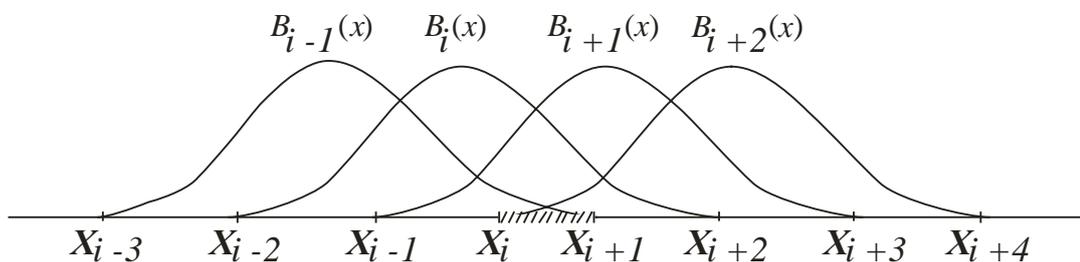


Рис. 8.2. Покрытие отрезка $[x_i, x_{i+1}]$

Утверждение 8.1. Функции $B_i(x)$, $i = \overline{-1, N+1}$ являются линейно-независимыми.

Доказательство. Предположим противное: пусть существуют такие постоянные C_i , $i = \overline{-1, N+1}$, не все равны нулю, для которых:

$$C_{-1}B_{-1}(x) + C_0B_0(x) + \dots + C_{N+1}B_{N+1}(x) = 0.$$

Выберем $x \in (x_{-3}, x_{-2})$, из (9.1) имеем:

$$C_{-1}B_{-1}(x) = 0.$$

Но $B_{-1}(x) > 0$, следовательно, $C_{-1} = 0$.

Далее, выберем $x \in (x_{-2}, x_{-1})$. Тогда $C_0B_0(x) = 0$, откуда $C_0 = 0$. Действуя подобным образом, можно показать, что $C_i = 0$, $i = \overline{-1, N+1}$. Следовательно, функции $B_i(x)$ – линейно независимы. Утверждение доказано.

Согласно определению, функции $B_i(x)$ можно представить следующим образом:

$$B_i(x) = \sum_{\alpha=0}^3 \beta_{k,\alpha}^{(i)} (x - x_{i+k})^\alpha, \quad x \in [x_{i+k}, x_{i+1+k}], \quad k = \overline{-2, 1}.$$

С другой стороны, произвольный кубический сплайн $S_{3,1}(x)$ можно выразить через базисные функции:

$$S_{3,1}(x) = \sum_{i=-1}^{N+1} b_i B_i(x).$$

Тогда для $x \in [x_i, x_{i+1}]$ имеем:

$$\begin{aligned} S_{3,1}(x) &= \sum_{i=-1}^{N+1} b_i B_i(x) = \sum_{\ell=-1}^2 b_{i+\ell} \cdot B_{i+\ell}(x) = \\ &= \sum_{\ell=-1}^2 b_{i+\ell} \sum_{\alpha=0}^3 \beta_{-\ell,\alpha}^{(i+\ell)} (x-x_i)^\alpha = \sum_{\alpha=0}^3 (x-x_i)^\alpha \sum_{\ell=-1}^2 b_{i+\ell} \beta_{-\ell,\alpha}^{(i+\ell)} = \\ &= \sum_{\alpha=0}^3 a_{i\alpha} (x-x_i)^\alpha, \end{aligned}$$

где $a_{i\alpha} = \sum_{\ell=-1}^2 b_{i+\ell} \beta_{-\ell,\alpha}^{(i+\ell)}$.

Полученное соотношение устанавливает взаимно однозначную связь между кусочно-полиномиальным представлением и представлением через базисные сплайны.

Конкретный вид базисных функций $B_i(x)$ зависит только от сетки, для которой они построены. В случае равномерной сетки ($h_i = h, i = \overline{0, N-1}$):

$$B_i(x) = \begin{cases} \frac{\tau^3}{6}, & \tau = (x - x_{i-2})/h, \quad x \in [x_{i-2}, x_{i-1}], \\ \frac{1}{6} + \frac{1}{2}\tau(1 + \tau(1 - \tau)), & \tau = (x - x_{i-1})/h, \quad x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{1}{6} + \frac{1}{2}(1 - \tau)(1 + \tau(1 - \tau)), & \tau = (x - x_i)/h, \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \\ \frac{(1 - \tau)^3}{6}, & \tau = (x - x_{i+1})/h, \quad x \in [x_{i+1}, x_{i+2}]. \end{cases}$$

Откуда

$$\begin{aligned} B_i(x_{i\pm 1}) &= \frac{1}{6}, \quad B_i(x_i) = \frac{2}{3}, \quad B_i'(x_{i-1}) = \frac{1}{2h}, \quad B_i'(x_{i+1}) = -\frac{1}{2h}, \\ B_i'(x_i) &= 0, \quad B_i''(x_{i\pm 1}) = \frac{1}{h^2}, \quad B_i''(x_i) = -\frac{2}{h^2}. \end{aligned} \tag{8.11}$$

8.3.1. Построение $S_{3,1}(f; x)$ через базисные сплайны

Задача построения сплайна $S_{3,1}(f; x)$ через базисные сплайны:

$$S_{3,1}(f; x) = \sum_{i=-1}^{N+1} b_i B_i(x)$$

сводится к задаче нахождения коэффициентов b_i , $i = \overline{-1, N+1}$. Из условий интерполяции и дополнительных (краевых) условий имеем:

$$\begin{aligned} b_{-1} B'_{-1}(x_0) + b_0 B'_0(x_0) + b_1 B'_1(x_0) &= f'(x_0), \\ b_{i-1} B_{i-1}(x_i) + b_i B_i(x_i) + b_{i+1} B_{i+1}(x_i) &= f(x_i), \quad i = \overline{0, N}, \\ b_{N-1} B'_{N-1}(x_N) + b_N B'_N(x_N) + b_{N+1} B'_{N+1}(x_N) &= f'(x_N). \end{aligned}$$

На равномерной сетке из (8.11) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{b_1 - b_{-1}}{2h} &= f'(x_0), \\ \frac{1}{6} b_{i-1} + \frac{2}{3} b_i + \frac{1}{6} b_{i+1} &= f(x_i), \quad i = \overline{0, N}, \\ \frac{b_{N+1} - b_{N-1}}{2h} &= f'(x_N). \end{aligned}$$

Окончательно:

$$\begin{cases} 2b_0 + b_1 = 3f(x_0) + hf'(x_0), \\ b_{j-1} + 4b_j + b_{j+1} = 6f(x_j), \\ b_{N-1} + 2b_N = 3f(x_N) - hf'(x_N), \end{cases} \quad j = \overline{1, N-1}.$$

Замечание 8.1. Базисные сплайны первого порядка

Аналогично рассмотренному выше, можно вводить базисы с финитными функциями и для сплайнов других порядков. Так, для сплайна первого порядка дефекта 1 такой базис имеет вид (рис. 8.3):

$$B_i(x) = \begin{cases} \tau, & \tau = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ 1 - \tau, & \tau = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0, & & x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \end{cases}$$

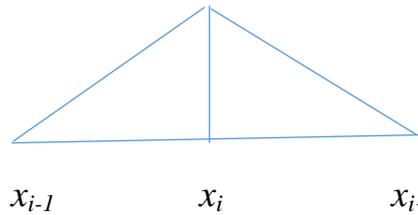


Рис. 8.3. Вид базисного сплайна первого порядка

При этом задача построения сплайна через этот базис решается максимально просто:

$$S_{1,1}(f;x) = \sum_{i=0}^N f(x_i) B_i(x).$$

Замечание 8.2. Вейвлет-функции

Весьма популярным классом функций с финитным базисом являются так называемые *вейвлет-функции*. Их особенность состоит в том, что чаще всего финитность достигается асимптотически, при этом обеспечивается свойство ортогональности элементов базиса, что существенно упрощает решение целого ряда задач теории приближения функций. Простейшим примером таких функция может служить вейвлет Хаара (рис. 8.4):

$$\psi(x) = \begin{cases} 1, & x \in \left[0, \frac{1}{2}\right), \\ -1, & x \in \left[\frac{1}{2}, 1\right), \\ 0, & x \notin [0, 1). \end{cases}$$

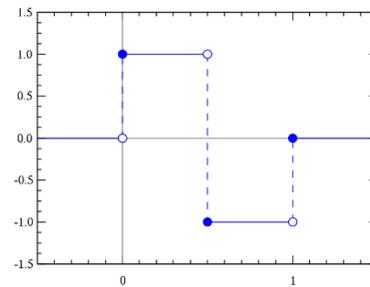


Рис. 8.4.
Вейвлет Хаара

8.3.2. Экстремальные свойства кубических сплайнов дефекта 1

Пусть мы имеем функцию, заданную на сетке $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ таблично: $\{x_i, y_i\}$, $i = \overline{0, N}$. Кроме того, пусть заданы y'_0 и y'_N — значения производных от исходной функции на концах отрезка $[a, b]$. Рассмотрим множество функций, удовлетворяющих исходной таблице:

$$W_{[a, b]} = \{f(x) \in C^2[a, b]: f(x_i) = y_i, i = \overline{0, N}; \\ f'(x_0) = y'_0, f'(x_N) = y'_N\}.$$

Теорема 8.1. Минимум функционала вида $J(f) = \int_a^b (f''(x))^2 dx$ на множестве

функций $f(x) \in W_{[a, b]}$ обеспечивает кубический сплайн дефекта 1 — $S_{3,1}(f;x)$.

Доказательство. Обозначим $S(x) = S_{3,1}(f;x)$. Очевидно, что:

$$J(f - S) = \int_a^b (f''(x) - S''(x))^2 dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_a^b \left((f''(x))^2 - (S''(x))^2 - 2S''(x)(f''(x) - S''(x)) \right) dx = \\
&= J(f) - J(S) - 2I,
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
I &= \int_a^b S''(x)(f''(x) - S''(x)) dx = S''(x)(f'(x) - S'(x)) \Big|_a^b - \\
&\quad - \int_a^b S'''(x)(f'(x) - S'(x)) dx.
\end{aligned}$$

Очевидно, что первое слагаемое равно 0. Кроме того, третья производная от кубического сплайна – кусочно-постоянная функция. Используя это, получим:

$$\begin{aligned}
I &= - \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} S'''(x)(f'(x) - S'(x)) dx = \\
&= - \sum_{i=0}^{N-1} S'''(x_i + 0)(f(x) - S(x)) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = 0,
\end{aligned}$$

так как $f(x_i) = S(x_i) = y_i$. Тогда $J(S) = J(f) - J(f - S)$. Поскольку $J(f - S) \geq 0$, то $J(S) \leq J(f)$.

Теперь докажем единственность. Пусть $\exists f(x) \in W_{[a, b]}$ такая, что $J(f) = J(S)$. Тогда $J(S - f) = 0$. Отсюда следует, что $f''(x) = S''(x)$ и $f(x) = S(x) + c_1x + c_2$. Поскольку $f(x_i) = S(x_i) = y_i$, имеем $c_1x_i + c_2 = 0$, $i = \overline{0, N}$. Очевидно СЛАУ при $N > 1$ имеет только тривиальное (нулевое) решение. Таким образом, единственность доказана. Теорема доказана.

8.3.3. Многомерная интерполяция сплайнами

Для простоты рассмотрим двумерный случай. Пусть на регулярной (прямоугольной) сетке $\{x_k, k = \overline{0, N_x}; x_0 < x_1 < \dots < x_{N_x}\} \times \{y_m, m = \overline{0, N_y}; y_0 < y_1 < \dots < y_{N_y}\}$ функция задана таблицей $\{f(x_k, y_m)\}$, $k = \overline{0, N_x}$, $m = \overline{0, N_y}$. Кроме того, на границах области заданы дополнительные условия:

$$\begin{aligned}
&\{f'_x(x_0, y_m), f'_x(x_{N_x}, y_m)\}, m = \overline{0, N_y}, \\
&\{f'_y(x_k, y_0), f'_y(x_0, y_{N_y})\}, k = \overline{-1, N_x + 1}.
\end{aligned}$$

Будем искать приближающую функцию в виде сплайна:

$$S_{3,1}(f; x, y) = \sum_{i=-1}^{N_x+1} \sum_{j=-1}^{N_y+1} b_{i,j} B_i(x) \cdot \overline{B}_j(y).$$

Для построения сплайна $S_{3,1}(f; x, y)$ необходимо определить коэффициенты разложения $\{b_{i,j}\}$, $i = \overline{-1, N_x+1}$, $j = \overline{-1, N_y+1}$:

$$S_{3,1}(f; x, y) = \sum_{i=-1}^{N_x+1} B_i(x) \sum_{j=-1}^{N_y+1} b_{i,j} \overline{B}_j(y) = \sum_{i=-1}^{N_x+1} B_i(x) V_i(y),$$

где $V_i(y) = \sum_{j=-1}^{N_y+1} b_{i,j} \overline{B}_j(y)$ – кубические сплайны по переменной y .

Положим $y = y_m$, $m = \overline{0, N_y+1}$. Тогда:

$$S_{3,1}(f; x, y_m) = \sum_{i=-1}^{N_x+1} V_i(y_m) B_i(x) = \sum_{i=-1}^{N_x+1} b_i^{(m)} B_i(x) - \text{кубический сплайн по}$$

переменной x , а $V_i(y_m) = b_i^{(m)}$. В соответствии с алгоритмом, описанным выше, мы можем определить коэффициенты разложения $b_i^{(m)}$, $i = \overline{-1, N_x+1}$ на основе таблицы:

$$\{f(x_k, y_m), k = \overline{0, N_x}; f'(x_0, y_m), f'(x_{N_x}, y_m)\}.$$

Решая эту задачу последовательно для $m = 0, 1, \dots, N_y$, мы найдем значения $\{b_i^{(m)}\}$, $i = \overline{-1, N_x+1}$, $m = \overline{0, N_y}$. Далее, используя таблицу, найдем

$$\{b_i^{(m)}, m = \overline{0, N_y}; f_y'(x_i, y_0), f_y'(x_i, y_{N_y})\}$$

для каждого значения $i = -1, 0, \dots, N_x+1$, строим сплайны $V_i(y_m)$, определяя тем самым коэффициенты $\{b_{i,j}\}$.

8.4. Вопросы и задания к лекции

1. Что такое эрмитова интерполяция?
2. Что такое сплайн и интерполяция сплайнами?
3. Что такое базисные сплайны с конечными носителями?
4. В чем суть многомерной интерполяции сплайнами?
5. Для функции $f(x) = x^4 + x + 1$ на сетке $x_i = 0.5i$, $i = \overline{0, 2}$ постройте сплайн $S_{3,1}(f; x)$. Найдите значение $m_1 = S'_{3,1}(f; 0.5)$.

Лекция 9. Дополнение к теории приближения (приближение в линейных пространствах)

9.1. Наилучшие приближения в линейном нормированном пространстве

Множество R – линейное нормированное пространство, если это множество линейно и каждому элементу $f \in R$ поставлено в соответствие действительное число $\|f\|$ – норма f , которая удовлетворяет следующим условиям (аксиомам нормы):

- 1) $\|f\| > 0$, причем $\|f\| = 0$ тогда и только тогда, когда $f \equiv 0$;
- 2) $\|cf\| = |c| \|f\|$ для любого c ;
- 3) $\|f_1 + f_2\| \leq \|f_1\| + \|f_2\|$.

Линейно нормированные пространства всегда являются метрическими.

Пусть $f \in R$, где R – линейное нормированное пространство. Требуется найти:

$$f \approx \sum_{i=1}^n c_i g_i,$$

где $g_1, g_2, \dots, g_n \in R$, линейно независимы.

Если выполняется условие

$$\|f - \sum_{i=1}^n c_i^{(0)} g_i\| = \Delta = \inf_{c_1, \dots, c_n} \|f - \sum_{i=1}^n c_i g_i\|,$$

то $\sum_{i=1}^n c_i^{(0)} g_i$ – элемент наилучшего приближения.

Теорема 9.1. Для любого элемента нормированного пространства существует хотя бы один элемент наилучшего приближения из конечномерного подпространства.

Определение 9.1. Линейное пространство R называется строго нормированным, если для $\forall f_1, f_2 \in R$ равенство $\|f_1 + f_2\| = \|f_1\| + \|f_2\|$ верно тогда и только тогда, когда $f_2 = \alpha f_1, \alpha \geq 0$.

Теорема 9.2. Если пространство R строго нормировано, то элемент наилучшего приближения единственен.

Доказательство. Предположим противное, то есть, что $\exists f_1, f_2, f_1 \neq f_2, f_k =$

$$\sum_{i=1}^n c_i^{(k)} g_i \quad (k = 1, 2) \text{ такие, что } \|f - f_k\| = \Delta, k = 1, 2.$$

Очевидно $\Delta \neq 0$, поскольку иначе $f_1 = f = f_2$.

Кроме того,

$$\begin{aligned} \|f - \frac{f_1 + f_2}{2}\| &= \left\| \frac{f - f_1}{2} + \frac{f - f_2}{2} \right\| \leq \frac{\|f - f_1\|}{2} + \frac{\|f - f_2\|}{2} = \\ &= \frac{1}{2} (\|f - f_1\| + \|f - f_2\|) = \Delta. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\|f - \frac{f_1 + f_2}{2}\| \leq \Delta.$$

$$\begin{aligned} \frac{f_1 + f_2}{2} &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{c_i^{(1)} + c_i^{(2)}}{2} \right) g_i \Rightarrow \|f - \frac{f_1 + f_2}{2}\| \geq \Delta \Rightarrow \\ \Rightarrow \left\| \frac{f - f_1}{2} + \frac{f - f_2}{2} \right\| &= \left\| \frac{f - f_1}{2} \right\| + \left\| \frac{f - f_2}{2} \right\| = \Delta. \end{aligned}$$

Тогда, из строгой нормированности пространства $R \Rightarrow$

$$\frac{f - f_1}{2} = \alpha \frac{f - f_2}{2}.$$

Если $\alpha \neq 1$, то $f = \frac{f_1 - \alpha f_2}{1 - \alpha} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{c_i^{(1)} - \alpha c_i^{(2)}}{1 - \alpha} \right) g_i \Rightarrow f$ – линейная комбинация элементов g_i и поэтому $\Delta = 0$. При $\alpha = 1$ имеем $f_1 = f_2$.

9.2. Наилучшее приближение в гильбертовом пространстве (среднеквадратичное приближение)

Линейное нормированное пространство называется гильбертовым, если в нем введено скалярное произведение и $\|f\|^2 = (f, f)$.

Пусть R – гильбертово пространство, H – линейное подпространство пространства R , f – некоторый элемент из множества R . Можно поставить такую задачу: найти элемент h_0 из подпространства H , дающий наилучшее приближение элементу f , т.е. элемент, для которого выполняется следующее:

$$\|f - h_0\| = \min_{h \in H} \|f - h\|.$$

Теорема 9.3. h_0 – элемент наилучшего приближения к f , тогда и только тогда, когда разность $f - h_0$ ортогональна ко всем элементам подпространства H , т.е.:

$$(f - h_0, h) = 0, \quad \forall h \in H.$$

Доказательство. 1) Пусть h_0 – элемент наилучшего приближения и $\exists h_1 \in H$, для которого $(f - h_0, h_1) = \alpha \neq 0$. Поскольку вместо h_1 можно взять $h_1 / \|h_1\|$, то предполагаем $\|h_1\| = 1$.

Рассмотрим элемент $h_2 = h_0 + \alpha h_1 \in H$:

$$\begin{aligned} \|f - h_2\|^2 &= (f - h_0 - \alpha h_1, f - h_0 - \alpha h_1) = \\ (f - h_2, f - h_2) &= (f - h_0 - \alpha h_1, f - h_0 - \alpha h_1) = \end{aligned}$$

$$= (f - h_0, f - h_0) - \alpha(h_1, f - h_0) - \bar{\alpha}(f - h_0, h_1) + \alpha\bar{\alpha}(h_1, h_1),$$

но $(h_1, f - h_0) = \overline{(f - h_0, h_1)} = \bar{\alpha}$.

Получаем

$$\|f - h_2\|^2 = \|f - h_0\|^2 - \alpha\bar{\alpha} - \bar{\alpha}\alpha + \alpha\bar{\alpha} = \|f - h_0\|^2 - |\alpha|^2 < \|f - h_0\|^2.$$

Но тогда h_0 – не элемент наилучшего приближения.

2) Пусть $(f - h_0, h) = 0$ для $\forall h \in H$.

$$\begin{aligned} \|f - h\|^2 &= (f - h_0 + h_0 - h, f - h_0 + h_0 - h) = \\ &= (f - h_0, f - h_0) + (h_0 - h, f - h_0) + (f - h_0, h_0 - h) + (h_0 - h, h_0 - h). \end{aligned}$$

Так как $h_0 - h \in H$, то второе и третье слагаемые обратятся в нуль. Имеем

$$\|f - h\|^2 = \|f - h_0\|^2 + \|h - h_0\|^2 \Rightarrow \|f - h\|^2 > \|f - h_0\|^2 \text{ при } h \neq h_0.$$

Так как гильбертово пространство строго нормировано, единственность

элемента наилучшего приближения вида $\sum_{i=1}^n c_i g_i$ следует из теоремы 8.2.

Задача среднеквадратичного приближения

Дано:

$$F(c_1, \dots, c_n) = \Delta^2(c_1, \dots, c_n) = \|f - \sum_{i=1}^n c_i g_i\|^2 = (f - \sum_{i=1}^n c_i g_i, f - \sum_{i=1}^n c_i g_i).$$

Найти: $\min_{c_1, \dots, c_n} F(c_1, \dots, c_n)$.

Можно воспользоваться условиями определения экстремумов:

$$\frac{\partial F}{\partial c_i} = 0, \quad i = \overline{1, n} \Rightarrow \text{имеем СЛАУ.}$$

Рассмотри другой алгоритм.

Пусть $\{g_i\}_{i=\overline{1, n}}$ линейно-независимые функции, тогда $\sum_{i=1}^n c_i g_i$ образуют

подпространство H . Если элемент $\sum_{i=1}^n c_i g_i$ осуществляет наилучшее

приближение, то $(f - \sum_{i=1}^n c_i g_i, g_j) = 0$ при $j = \overline{1, n}$. Тогда $\sum_{i=1}^n c_i (g_i, g_j) = (f, g_j)$,

$j = \overline{1, n}$. Поскольку элемент наилучшего приближения существует, то отсюда следует существование решения получаемой СЛАУ.

Оценка погрешности:

Пусть g – наилучшее приближение к f . Тогда $(f - g, h) = 0$ при $h \in H$.

Полагая $h_0 = g$ и $h = 0$, получим:

$$\|f\|^2 = \|f - g\|^2 + \|g\|^2 \Rightarrow \|f - g\|^2 = \|f\|^2 - \|g\|^2.$$

Если $(g_i, g_j) = \delta_{i-j}$, элементы g_i образуют ортонормированную систему, то соответствующая СЛАУ имеет диагональный вид: $c_i = (f, g_i)$.

$$\begin{aligned} \text{Тогда } g &= \sum_{i=1}^n (f, g_i) g_i \text{ и } \|f - g\|^2 = \|f\|^2 - \|g\|^2 = (f, f) - \left(\sum_{i=1}^n c_i g_i, \sum_{i=1}^n c_i g_i \right) = \\ &= (f, f) - \sum_{i,j=1}^n c_i \bar{c}_j \delta_{i-j} = (f, f) - \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = (f, f) - \sum_{i=1}^n |(f, g_i)|^2. \end{aligned}$$

Поскольку $\|f - g\|^2 \geq 0 \Rightarrow (f, f) \geq \sum_{i=1}^n |(f, g_i)|^2$ – неравенство Бесселя.

Пример 9.1. Найти наилучшее приближение функции $f(x) = x^2$ на отрезке $x \in [0, 1]$ в пространстве полиномов первого порядка.

Решение

Базис $g_1(x) = 1, g_2(x) = x$.

Коэффициенты и правая часть СЛАУ:

$$\begin{aligned} (f, g) &= \int_0^1 f(x)g(x)dx \Rightarrow (f, g_1) = \frac{1}{3}, \quad (f, g_2) = \frac{1}{4}, \\ (g_1, g_1) &= 1, \quad (g_1, g_2) = \frac{1}{2}, \quad (g_2, g_2) = \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 + \frac{1}{2}c_2 = \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2}c_1 + \frac{1}{3}c_2 = \frac{1}{4} \end{array} \right\} \Rightarrow c_1 = -\frac{1}{6}, \quad c_2 = 1$$

$$c_1 + \frac{1}{2}c_2 = \frac{1}{3}.$$

Ответ:

$$g(x) = c_1 g_1(x) + c_2 g_2(x) = x - \frac{1}{6}.$$

Погрешность приближения:

$$\|f - g\|^2 = \|f\|^2 - \|g\|^2 = \frac{1}{5} - \frac{7}{36} = \frac{1}{180} \Rightarrow \|f - g\| = \frac{1}{6\sqrt{5}} \approx 0.0745.$$

Замечание

В общем случае:

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

где весовая функция

$$\rho(x) > 0, x \in [a, b].$$

Пример 9.2. Найти наилучшее приближение функции, заданной таблицей в пространстве полиномов первого порядка.

Дано:

I	1	2	3	4	5
x_i	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i)$	0.90	2.05	3.10	3.85	5.05

Решение

Базис $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$.

Скалярное произведение:

$$(f, g) = \sum_{k=1}^n f(x_k) \cdot g(x_k).$$

Коэффициенты и правая часть СЛАУ:

$$(f, g_1) = \sum_{k=1}^5 f(x_k) \cdot g_1(x_k) = \sum_{k=1}^5 f(x_k) = 14.95;$$

$$(f, g_2) = 10, \quad (g_1, g_1) = 5, \quad (g_1, g_2) = 2.5, \quad (g_2, g_2) = 1.875.$$

$$5c_1 + 2.5c_2 = 14.95,$$

$$2.5c_1 + 1.875c_2 = 10.00, \Rightarrow c_1 = 0.97, c_2 = 4.04.$$

Ответ:

$$g(x) = c_1 g_1(x) + c_2 g_2(x) = 4.04x + 0.97.$$

Погрешность приближения:

$$\|f - g\|^2 = \|f\|^2 - \|g\|^2 = 54.9475 - 54.9415 = 0.046 \Rightarrow$$

$$\|f - g\| = \sqrt{0.046} \approx 0.214.$$

9.3. Наилучшее равномерное приближение

Пусть \mathcal{R} – пространство ограниченных вещественных функций, определенных на отрезке $[a, b]$ и $\|f\| = \sup_{x \in [a, b]} |f(x)|$. Ищется наилучшее

приближение вида:

$$Q_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j.$$

Согласно теореме 9.1, $\exists Q_n^{(0)}(x)$ – многочлен наилучшего равномерного приближения $E_n(f) = \|f - Q_n^{(0)}\| \leq \|f - Q_n\|$ существует для $\forall Q_n(x)$.

Теорема Чебышева. Чтобы многочлен $Q_n(x)$ был многочленом наилучшего приближения непрерывной функции $f(x)$, необходимо и достаточно существования на $[a, b]$ по крайней мере $n + 2$ точек $x_0 < x_1 < \dots < x_{n+1}$ таких,

что $f(x_i) - Q_n(x_i) = \alpha (-1)^i \|f - Q_n\|$, $i = \overline{0, n+1}$, $\alpha = 1$ (или $\alpha = -1$) одновременно для всех i . Точки x_0, x_1, \dots, x_{n+1} , удовлетворяющие условиям теоремы, принято называть *точками Чебышевского альтерананса*.

Пример 9.3. Непрерывная на $[a, b]$ функция $f(x)$ приближается многочленом нулевой степени.

Решение. Пусть $\sup_{[a,b]} f(x) = f(x_0) = M$, $\inf_{[a,b]} f(x) = f(x_1) = m$.

Тогда $Q_0(x) = (M + m)/2$ является многочленом наилучшего приближения, x_0, x_1 – точками Чебышевского альтерананса:

$$\|f - Q_0\| = \sup_{[a,b]} |f(x) - Q_0(x)| = M - \frac{M+m}{2} = \frac{M-m}{2}.$$

$$f(x_0) - Q_0(x_0) = M - \frac{m+M}{2} = \frac{M-m}{2} = 1 \times \|f - Q_0\|.$$

$$f(x_1) - Q_0(x_1) = m - \frac{m+M}{2} = -\frac{M-m}{2} = -1 \times \|f - Q_0\|.$$

Графическая иллюстрация разобранный примера дана на рис. 9.1.

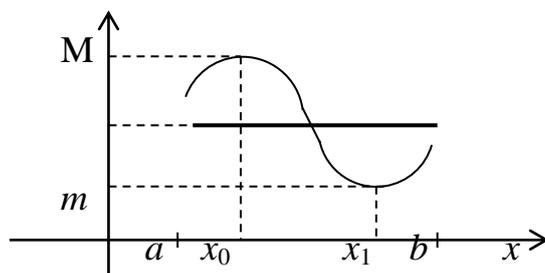


Рис. 9.1. Равномерное приближение многочленом нулевой степени

Алгоритм решения (геометрическая интерпретация). Находим точки, в которых приближаемая функция достигает максимума $M=f(x_0)$ и минимума $m=f(x_1)$. Проводим прямую $Q_0(x)=(m+M)/2$.

Пример 9.4. Выпуклая на $[a, b]$ функция $f(x)$ приближается многочленом $Q_1(x) = a_0 + a_1x$.

Решение. $f(x) - (a_0 + a_1x)$ имеет только одну внутреннюю точку экстремума (вследствие выпуклости $f(x)$), обозначим ее d . Тогда a, b, d – точки Чебышевского альтерананса (рис. 9.2). По теореме Чебышева имеем ($L = \|f - Q_1\|$):

$$f(a) - (a_0 + a_1 \cdot a) = \alpha L,$$

$$f(d) - (a_0 + a_1 \cdot d) = -\alpha L,$$

$$f(b) - (a_0 + a_1 \cdot b) = \alpha L.$$

и

$$f'(d) - a_1 = 0.$$

Учитывая, что:

$$f(b) - f(a) = a_1(b - a),$$

$$f(a) + f(d) - 2a_0 = a_1(a + d),$$

решение этой системы:

$$a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}, \quad f'(d) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a},$$
$$a_0 = \frac{f(a) + f(d) - a_1(a + d)}{2}.$$

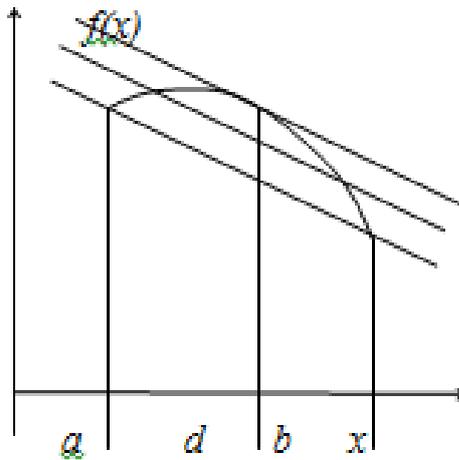


Рис. 9.2. Равномерное приближение выпуклой функции многочленом первой степени

Алгоритм решения (геометрическая интерпретация). Проводим прямую через точки $(a, f(a))$ и $(b, f(b))$. Ее наклон равен a_1 . Проводим параллельную ей касательную к кривой $y = f(x)$. Проводим прямую, проходящую посередине между этими прямыми.

9.4. Ортогональные многочлены Чебышева

Во многих задачах приближения функций в качестве базиса удобнее использовать ортогональные многочлены. Рассмотрим один из таких базисов, последовательность ортогональных многочленов Чебышева:

$$\{T_j(x)\}_{j=0,1,2,\dots} \quad x \in [-1, 1]:$$

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad (9.1)$$

$$T_{n+1}(x) = 2x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n \geq 1.$$

Наряду с рекуррентным имеет место и тригонометрическое представление:

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x), \quad n = 0, 1, \dots \quad (9.2)$$

Докажем эквивалентность представлений (9.1) и (9.2) для $x \in [-1, 1]$.

При $n = 0$ и $n = 1$ их совпадение очевидно. Известно, что

$$\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta) = 2\cos \alpha \cdot \cos \beta.$$

Положим $\alpha = n\theta, \beta = \theta \Rightarrow \cos((n+1)\theta) = 2\cos(n\theta) \cdot \cos \theta - \cos((n-1)\theta)$.

Обозначив $\theta = \arccos x$, получим третье из соотношений (9.1).

Корни многочленов $T_n(x)$ на отрезке $x \in [-1, 1]$. Из тригонометрического представления (9.2) имеем:

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x) = 0,$$

и

$$\begin{aligned} n \cdot \arccos x_m^{(n)} &= \frac{\pi}{2} (2m + 1), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ x_m^{(n)} &= \cos \frac{\pi(2m+1)}{2n}, \quad m = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Аналогично, точки экстремумов многочленов Чебышева –

$$X_m^{(n)} = \cos \left(\frac{\pi m}{n} \right), \quad m = \overline{0, n}, \quad (9.4)$$

и

$$T_n(X_m^{(n)}) = (-1)^m.$$

Экстремальное свойство многочлена Чебышева.

Многочлен $\bar{T}_n(x) = 2^{1-n} T_n(x) = x^n + \dots$ – многочлен наименее уклоняющийся от 0.

Лемма 9.1. Если $P_n(x)$ – многочлен степени n , с коэффициентом при старшей степени равным 1, то $\max_{x \in [-1, 1]} |P_n(x)| \geq \max_{x \in [-1, 1]} |\bar{T}_n(x)| = 2^{1-n}$.

Доказательство. Из (9.1) следует, что $T_n(x) = 2^{1-n} \cdot x^n + \dots$, $n > 0$. Следовательно, $\bar{T}_n(x) = x^n + \dots$

Далее проведем доказательство от противного. Пусть $\exists P_n(x)$, такой что $\max_{x \in [-1, 1]} |P_n(x)| < 2^{1-n}$. Очевидно, что $\bar{T}_n(x) - P_n(x) = Q_{n-1}(x)$. В силу принятого допущения

$$\text{sign}(\bar{T}_n(X_m^{(n)}) - P_n(X_m^{(n)})) = \text{sign}((-1)^m \cdot 2^{1-n} - P_n(X_m^{(n)})) = (-1)^m.$$

Таким образом, между точками $X_m^{(n)}$ и $X_{m+1}^{(n)}$ ($m = \overline{0, n-1}$) многочлен

$Q_{n-1}(x)$ меняет знак, а значит, имеет корень. Всего получаем n корней. Таким образом, приходим к противоречию. Лемма доказана.

Свойство ортогональности многочленов Чебышева.

$$\tilde{T}_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{T}_n(x) = T_n(x), \quad n = 1, 2, \dots \text{ при } x \in [-1, 1] -$$

ортонормированная система с весом $\frac{2}{\pi\sqrt{1-x^2}}$:

$$\int_{-1}^1 \frac{2}{\pi\sqrt{1-x^2}} \cdot \tilde{T}_n(x) \cdot \tilde{T}_m(x) dx = \delta_{m,n} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases}$$

Доказательство. Воспользуемся тригонометрическим представлением (9.3). Тогда $\theta = \arccos x$, $d\theta = \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ и

$$\frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\tilde{T}_n(x) \cdot \tilde{T}_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi (\cos((n+m)\theta) + \cos((n-m)\theta)) d\theta = \delta_{m,n}.$$

Свойство доказано.

Пример 9.5. Использование экстремального свойства полиномов Чебышева для выбора оптимальных узлов интерполирования. Оценка погрешности интерполяции:

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1} |\omega_{n+1}(x)|}{(n+1)!}. \quad (9.5)$$

Задача. Найти такие $x_k \in [a, b]$, $k = \overline{0, n}$, чтобы минимизировать величину $\max_{x \in [a, b]} |\omega_{n+1}(x)|$.

Решение. Эту задачу можно решить с помощью многочлена Чебышева:

$$T_{n+1}(x) = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}} \cdot \cos\left((n+1) \arccos \frac{2x - (b+a)}{b-a}\right).$$

Причем в качестве узлов интерполирования надо взять корни этого многочлена, то есть точки

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot \cos \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}, \quad k = \overline{0, n},$$

при этом

$$\max_{x \in [a, b]} |\omega_{n+1}(x)| = \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}},$$

и оценка (9.5) примет вид:

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}(b-a)^{n+1}}{(n+1)!2^{2n+1}}.$$

9.5. Приложение. Тригонометрическая интерполяция. Дискретное преобразование Фурье

Пусть $f(x)$ – периодическая функция с периодом 1. Для нее ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} a_q e^{2\pi i q x} = \sum_{q=-\infty}^{\infty} a_q (\cos(2\pi q x) + i \cdot \sin(2\pi q x)),$$

причем $\sum_{q=-\infty}^{\infty} |a_q| < \infty$ и $a_q = \int_0^1 f(\tau) e^{-2\pi i q \tau} d\tau$.

Рассмотрим сетку $x_l = \frac{l}{N}$, $l = \overline{0, N}$. Если $q_2 - q_1 = kN$, k – целое, то

$$q_2 x_l - q_1 x_l = kN x_l = k \cdot l.$$

Следовательно,

$$e^{2\pi i q_1 x_l} = e^{2\pi i q_2 x_l}, \quad l = \overline{0, N}.$$

Тогда

$$f_l = f(x_l) = \sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x_l}, \quad (9.6)$$

где $A_q = \sum_{s=-\infty}^{\infty} a_{q+sN}$.

Введем скалярное произведение $(f, g) = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f_l \cdot \overline{g_l}$. Функции

$g_q(x_l) = e^{2\pi i q x_l}$ образуют ортонормированную систему относительно этого произведения:

$$\begin{aligned}
(g_q, g_j) &= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} e^{2\pi i \frac{q-j}{N} l} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} \left(e^{2\pi i \frac{q-j}{N}} \right)^l = \\
&= \frac{1}{N} \cdot \frac{e^{2\pi i(q-j)} - 1}{e^{2\pi i \frac{q-j}{N}} - 1} = \frac{1}{N} \cdot \frac{\cos(2\pi(q-j)) + i \cdot \sin(2\pi(q-j)) - 1}{e^{2\pi i \frac{q-j}{N}} - 1} = 0, \quad q \neq j
\end{aligned}$$

$$(g_q, g_q) = 1, \quad 0 \leq q, j < N.$$

Умножим выражение (9.6) скалярно на g_j :

$$\begin{aligned}
(f, g_j) &= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f_l \cdot \bar{g}_j(x_l) = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} g_j(x_l) \cdot \left(\sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x_l} \right) = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} e^{-2\pi i j x_l} \cdot \left(\sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x_l} \right) = \frac{1}{N} \sum_{q=0}^{N-1} A_q \sum_{l=0}^{N-1} e^{2\pi i(q-j)x_l} = A_q.
\end{aligned}$$

Способ аппроксимации функции $f(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} A_j e^{2\pi i j x}$ – *тригонометрическая интерполяция*. Соотношение (9.6) – *конечный* или *дискретный ряд Фурье*, а коэффициенты A_q – *дискретные коэффициенты Фурье*. Затраты на вычисление этих коэффициентов составляют $O(N^2)$ арифметических операций. Существуют алгоритмы быстрого преобразования Фурье БПФ, затраты в которых $O(N \cdot \log_2 N)$.

9.6. Вопросы и задания к лекции

1.

1. Что такое наилучшие приближения в линейном нормированном пространстве? В гильбертовом пространстве?
2. Что такое *наилучшее равномерное приближение*?
3. Опишите использование экстремального свойства полиномов Чебышева на примере оптимального выбора узлов интерполирования.
4. В чем суть *тригонометрической интерполяции*?
5. Для функции, заданной таблично $\{(x, f(x))\}_{i=1,2,3} = \{(0,1), (1,3), (2,5)\}$, найдите методом среднеквадратичного приближения аппроксимирующий полином вида $P_0(x) = c$.
6. Найдите многочлен наилучшего равномерного приближения первого порядка для функции $f(x) = x^2 - 4$ на отрезке $[0,1]$.

9.7. Лабораторная работа № 5 на тему «Интерполирование. Среднеквадратичное приближение»

Задача. Найти приближение заданной функции $f(x)$ по нижеуказанным формулам на отрезке $x \in [1,2]$.

Указания по выполнению задачи:

1) Построить таблицу $\{x_i, f(x_i)\}_{i=\overline{0,n}}$, $f'(x_0), f'(x_1),$

$$x_i = a + i * h, \quad i = \overline{0,n}, \quad h = (b - a) / n, \quad n = 5.$$

По полученной таблице произвести интерполяцию с помощью

- формулы Ньютона;
- кубического сплайна дефекта 1.

Провести оценку погрешности приближения функции $f(x)$ в узлах

$$x_{i+1/2}^* = a + (i + 1/2)h, \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Сравнить оценку погрешности с реальной погрешностью.

Для кубического сплайна определить погрешность приближения $f'(x)$ сплайном в узлах разностной сетки и сравнить ее с теоретической оценкой.

2) Выполнить среднеквадратичное приближение заданной функции на заданном отрезке с помощью полинома второго порядка:

- дискретный вариант (по таблице из п.1);
- непрерывный (интегральный) вариант.

Провести оценку погрешности.

Построить график приближаемой и приближающих функций.

3) Методом обратного интерполирования, используя интерполяционную формулу Ньютона, найти корень уравнения

$$f(x) = c, \quad \text{где} \quad c = \frac{1}{2} \left(\min_{x \in [1,2]} (f(x)) + \max_{x \in [1,2]} (f(x)) \right).$$

Лекция 10. Численное дифференцирование и интегрирование

10.1. Формулы численного дифференцирования

Пусть известно, что в некоторой точке x у функции $f(x)$ существует производная k -того порядка $f^{(k)}(x)$, которую точно вычислить не удается или слишком сложно. В этом случае для приближенного нахождения производных функции используются формулы численного дифференцирования. Рассмотрим основные подходы к их построению.

10.1.1. Дифференцирование интерполяционных полиномов

Задача численного дифференцирования состоит в приближенном вычислении производных функции $f(x)$ по заданным в конечном числе точек значениям этой функции. Самый распространенный способ построения формул численного дифференцирования состоит в том, что по значениям функции $f(x)$ в некоторых узлах x_0, x_1, \dots, x_n строят интерполяционный полином $P_n(x)$, а затем его дифференцируют.

Пусть дано $\{x_i, f(x_i)\}_{i=\overline{0,n}}$, где $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, то можно построить интерполяционный многочлен $P_n(x)$ и положить, что:

$$f^{(k)}(x_*) \approx P_n^{(k)}(x_*), \quad x_* \in [x_0, x_n], \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Например, при $n = 2$:

$$P_2(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0, x_1, x_2)$$

и

$$P'_2(x_*) = f(x_0, x_1) + (2x_* - x_0 - x_1) \cdot f(x_0, x_1, x_2).$$

Если $x_* = x_1$, то

$$P'_2(x_1) = \frac{x_2 - x_1}{x_2 - x_0} \cdot f(x_0, x_1) + \frac{x_1 - x_0}{x_2 - x_0} \cdot f(x_1, x_2).$$

В случае равномерной сетки $x_j = x_0 + jh, j = \overline{0,2}$:

$$P'_2(x_1) = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h}.$$

10.1.2. Метод неопределенных коэффициентов

Метод неопределенных коэффициентов относится к методам построения формул численного дифференцирования в узлах разностной сетки без использования конечных разностей. Согласно данному методу производная k -го порядка вычисляется приближенно по формуле

$$f^{(k)}(x_*) \approx \sum_{i=0}^n c_i f(x_i) \quad , \quad (10.1)$$

где коэффициенты c_i выбираются из условий, обеспечивающих точность этой формулы для многочлена максимальной степени. Возьмем

$$f(x) = \sum_{j=0}^m a_j x^j$$

и потребуем, чтобы для такого многочлена соотношение (10.1) обратилось в равенство

$$\sum_{j=0}^m a_j (x^j)^{(k)} \Big|_{x=x_*} = \sum_{i=0}^n c_i \left(\sum_{j=0}^m a_j x_i^j \right) = \sum_{j=0}^m a_j \left(\sum_{i=0}^n c_i x_i^j \right). \quad (10.2)$$

Чтобы это равенство (10.2) выполнялось для любого многочлена степени m , необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при a_j в левой и правой частях были равны. Поскольку

$$(x^j)^{(k)} = j(j-1) \dots (j-k+1)x^{j-k},$$

то мы получаем СЛАУ:

$$\sum_{i=0}^n c_i x_i^j = j(j-1) \dots (j-k+1) x_*^{j-k}, \quad j = \overline{0, m}, \quad (10.3)$$

относительно неизвестных c_i .

Если $m = n$, то определитель системы (10.3) является определителем Вандермонда и отличен от нуля. Следовательно, в этом случае система уравнений (10.3) всегда имеет решение, и причем единственное. Таким образом, всегда можно построить формулу численного дифференцирования с $(n+1)$ узлами, точную для многочленов степени n .

При $m = n$ и определенном расположении узлов иногда оказывается, что равенство (10.3) выполнено и при $j = n+1$.

Как правило, это будет в случае, когда узлы расположены симметрично относительно точки x_* . Построим формулу численного дифференцирования:

$$f'(x_1) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2), \quad x_i = x_0 + jh, \quad j = \overline{0, 2}, \quad (10.4)$$

точную для многочлена второй степени.

Перепишем (10.4) в виде

$$f'(0) \approx c_0 f(-h) + c_1 f(0) + c_2 f(h).$$

Тогда система уравнений (10.3) примет вид:

$$\begin{cases} c_0 + c_1 + c_2 = 0 \\ -hc_0 + hc_2 = 1 \\ (-h)^2 c_0 + h^2 c_2 = 0 \end{cases}$$

и, решая ее, получаем $c_0 = -1/(2h)$, $c_1 = 0$, $c_2 = 1/(2h)$.

Таким образом,

$$f'(0) \approx (f(h) - f(-h))/(2h). \quad (10.5)$$

Построим приближенную формулу вычисления второй производной, используя те же узлы:

$$f''(0) \approx \frac{c_0 f(-h) + c_1 f(0) + c_2 f(h)}{h^2}.$$

Из условий точности формулы для $1, x, x^2$ получаем систему уравнений

$$\begin{cases} c_0 + c_1 + c_2 = 0, \\ -c_0 + c_2 = 0, \\ c_0 + c_2 = 2. \end{cases}$$

$$\Rightarrow c_0 = c_2 = 1, c_1 = -2$$

Отсюда

$$f''(0) \approx (f(h) - 2f(0) + f(-h))/h^2. \quad (10.6)$$

Построенная формула оказывается точной для многочлена третьей степени. Если подставить в левую и правую части формулы (10.6) функцию $f(x) = x^3$, то получим нулевое тождество.

Оценим погрешность построенной выше формулы (10.4):

$$f(\pm h) = f(0) \pm hf'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) \pm \frac{h^3}{6} f'''(\xi_{\pm}).$$

Погрешности:

$$R_k(f) = f^{(k)}(x_*) - \sum_{i=0}^n c_i f(x_i).$$

Имеем:

$$\begin{aligned} R_1(f) &= f'(0) - (f(h) - f(-h))/(2h) = \\ &= f'(0) - (f'(0) + \frac{h^2}{6} \frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2}) = -\frac{h^2}{6} \alpha, \\ \alpha &= \frac{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)}{2}. \end{aligned}$$

Значение α лежит между $f'''(\xi_+)$ и $f'''(\xi_-)$. Поэтому по теореме Роля найдется точка $\xi \in [\xi_-, \xi_+]$ такая, что $\alpha = f'''(\xi)$. Таким образом, в итоге имеем

$$R_1(f) = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

Проведем аналогичный анализ для формулы (10.6). В этом случае оставим четыре члена разложения:

$$f(\pm h) = f(0) \pm hf'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) \pm \frac{h^3}{6} f'''(0) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}(\xi_{\pm})$$

и получим

$$R_2(f) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi).$$

Итак, мы видим, что формулы (10.4) и (10.6) имеют одинаковый порядок точности (второй).

Замечание. Для численного дифференцирования можно использовать и сплайны, например кубические. При этом формулы, полученные способами, описанными в п.10.1.1 и 10.1.2, иногда называют «явными» операторами численного дифференцирования, поскольку они позволяют по значению функции в узлах разностной сетки (исходной таблице) сразу вычислить необходимое значение производной. В случае же использования кубических сплайнов, сначала надо построить сплайн, решив для этого СЛАУ, и только потом выполнять дифференцирование. Поэтому операторы численного дифференцирования, основанные на кубических сплайнах, называют «неявными».

10.1.3. Вычислительная погрешность формул численного дифференцирования

Так же, как и при интерполяции, при численном дифференцировании неустранимая погрешность растет, когда расстояние между узлами уменьшается. Рассмотрим вычисление величины $f'(x_0)$ по формуле

$$f'(x_0) \approx (f(x_1) - f(x_0))/h. \quad (10.7)$$

Нетрудно показать, что остаточный член этой формулы равен

$$r_1 = -hf''(\xi)/2, \quad \xi \in [x_0, x_1].$$

Пусть $|f''(\xi)| \leq M_2$, тогда $|r_1| \leq M_2h/2$.

Если значения функции $f(x_i)$ известны с некоторыми погрешностями ε_i , $|\varepsilon_i| \leq E$, то погрешность величины $f'(x_0)$ будет содержать дополнительное слагаемое:

$$f'(x_0) \approx \frac{(f(x_1) + \varepsilon_1) - (f(x_0) + \varepsilon_0)}{h}. \quad (10.8)$$

$$r_2 = -(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)/h, \quad |r_2| \leq 2E/h.$$

Получаем

$$|r| \leq |r_1| + |r_2| \leq g(h) = M_2h/2 + 2E/h. \quad (10.9)$$

Очевидно,

$$g(h \rightarrow 0) \rightarrow \infty \text{ (см. рис.10.1).}$$

Из

$$g'(h) = M_2/2 - 2E/h^2 = 0$$

определим точку экстремума h_0 :

$$h_0 = 2\sqrt{E/M_2}, \quad g(h_0) = 2\sqrt{M_2E}.$$

Таким образом, погрешность результата не может быть лучше, чем величина порядка \sqrt{E} .

Даже если погрешность исходных данных отсутствует, погрешность округления на конечной разрядной сетке всегда есть: $E \leq \text{const} \cdot 2^{-t}$, где t – число двоичных разрядов мантиссы. Таким образом, мы можем получить $f'(x_0)$ в лучшем случае с половиной верных разрядов.

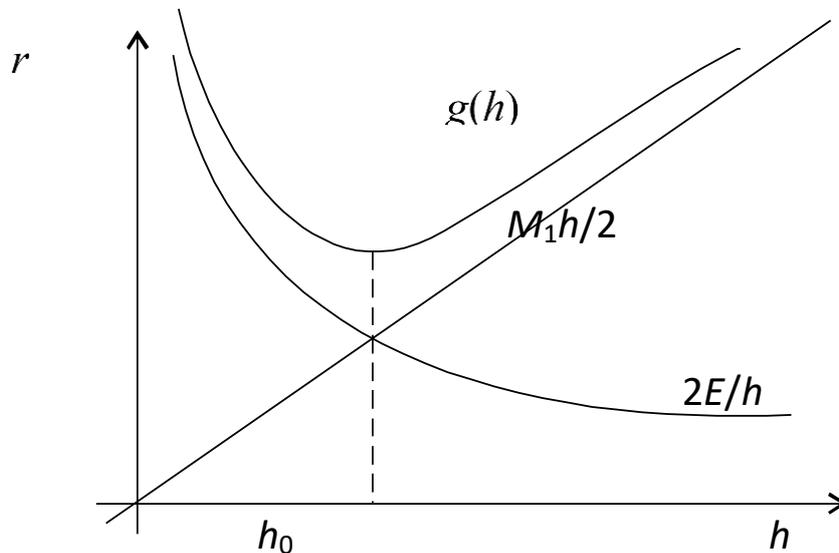


Рис. 10.1. Определение оптимального шага h_0 по погрешности

В случае применения формул более высокого порядка точности положение несколько улучшается. Если использовать формулу с остаточным членом порядка $O(h^m)$, то вместо оценки (10.9) будем иметь

$$|r| \leq g_m(h) = A_1 h^m + A_2 E/h. \quad (10.10)$$

В этом случае минимум правой части достигается при h порядка $(E)^{1/(m+1)}$, при этом сама правая часть имеет порядок $(E)^{m/(m+1)}$.

Конечно, следует иметь в виду, что величины A_1 и A_2 могут расти с ростом m , и поэтому увеличение порядка точности формул численного дифференцирования разумно лишь в определенных пределах. То есть, существует задача поиска оптимального шага по погрешности (рис. 10.1).

10.2. Численное интегрирование

Во многих случаях при нахождении интеграла функции первообразную $F(x)$ невозможно выразить через элементарные функции. Кроме того, функция $f(x)$ может быть задана не в виде аналитической формулы, а в виде таблицы ее значений на фиксированном конечном множестве точек. В этих случаях для вычисления интеграла применяют методы численного интегрирования.

Задача численного интегрирования состоит в нахождении приближенного значения определенного интеграла с помощью некоторой формулы через известные значения подынтегральной функции $f(x)$ (или через значения ее производных) в заданных точках.

Методы вычисления одномерных интегралов называются *квадратурными*, многомерных интегралов – *кубатурными*.

Рассмотрим сначала методы вычисления одномерных интегралов. Будем искать значение определенного интеграла функции по квадратурной формуле

$$I = \int_a^b p(x) f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad (10.11)$$

где $p(x)$ – весовая функция,

n – порядок квадратурной формулы,

x_i – узлы квадратурной формулы,

A_i – коэффициенты квадратурной формулы.

10.2.1. Формулы Ньютона–Котеса

Данные методы основаны на представлении функции полиномами различных степеней. К данному классу методов относятся методы прямоугольников, трапеций, Симпсона и т.п. Рассмотрим случай $p(x) \equiv 1$.

Аппроксимируем функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом:

$$f(x) = P_n(x) + R_n(f; x).$$

Тогда интеграл

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b P_n(x) dx + \int_a^b R_n(f; x) dx.$$

Если воспользоваться интерполяционной формулой Лагранжа, получим

$$\begin{aligned}
S_n &= \int_a^b P_n(x) dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) dx = \\
&= \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i),
\end{aligned}$$

где

$$A_i = \int_a^b \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) dx, \quad i = \overline{0, n}.$$

При этом погрешность интерполирования:

$$\mathfrak{R}_n(f) = \int_a^b R_n(f; x) dx = \frac{f^{(n+1)}(\xi)^b}{(n+1)!} \int_a^b \omega_{n+1}(x) dx.$$

Рассмотрим частные случаи формулы Ньютона–Котеса.

1) Формула «левых» прямоугольников при $n = 0$, $x_0 = a$:

$$\begin{aligned}
A_0 &= \int_a^b dx = b - a, \quad S_0 = (b - a)f(a), \\
\mathfrak{R}_0 &= \frac{f'(\xi)^b}{1!} \int_a^b (x - a) dx = f'(\xi) \frac{(x - a)^2}{2} \Big|_a^b = f'(\xi) \frac{(b - a)^2}{2}.
\end{aligned}$$

2) Формула «правых» прямоугольников при $n = 0$, $x_0 = b$:

$$\begin{aligned}
A_0 &= \int_a^b dx = b - a, \quad S_0 = (b - a)f(b), \\
\mathfrak{R}_0 &= \frac{f'(\xi)^b}{1!} \int_a^b (x - b) dx = f'(\xi) \frac{(x - b)^2}{2} \Big|_a^b = -f'(\xi) \frac{(b - a)^2}{2}.
\end{aligned}$$

3) Формула трапеций при $n = 1$, $x_0 = a$, $x_1 = b$:

$$A_0 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a} dx = \frac{(x-a)^2}{2(b-a)} \Big|_a^b = \frac{b-a}{2},$$

$$A_1 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b} dx = \int_a^b \frac{b-x}{b-a} dx = \frac{(b-x)^2}{2(b-a)} \Big|_a^b = \frac{b-a}{2},$$

$$S_1 = (b-a) \frac{f(a)+f(b)}{2},$$

$$\mathfrak{R}_1(f) = \frac{f''(\xi)}{2!} \int_a^b (x-a)(x-b) dx = -\frac{f''(\xi)}{12} (b-a)^3.$$

4) Формула Симпсона при $n=2$, $x_0=a$, $x_1=\frac{a+b}{2}$, $x_2=b$:

$$A_0 = A_2 = \frac{b-a}{6}, \quad A_1 = \frac{2}{3}(b-a),$$

$$S_2 = \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right),$$

$$\mathfrak{R}_2 = -\frac{f^{(4)}}{2880} (b-a)^5.$$

Геометрический смысл интегрирования по формулам трапеций и Симпсона изображен на рис. 10.2.

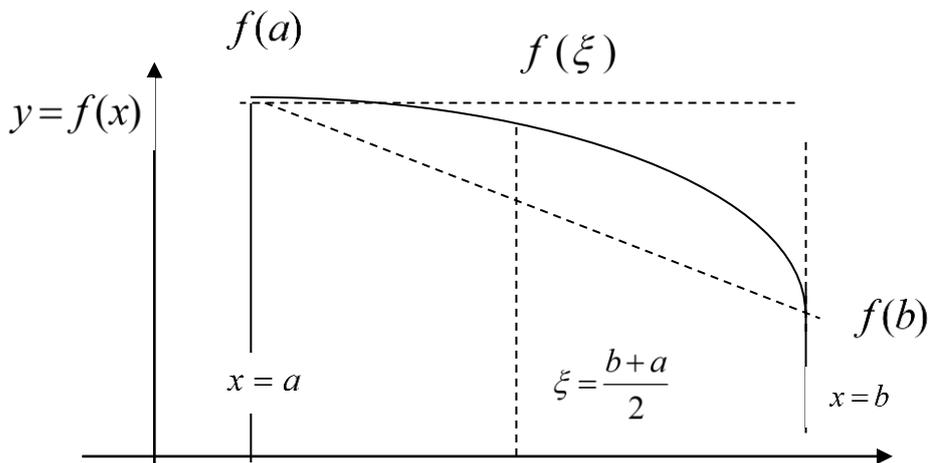


Рис. 10.2. Интегрирование функции по формуле Симпсона

Аналогично численному дифференцированию для построения квадратурных формул можно воспользоваться методом неопределенных коэффициентов или *алгебраическим методом*. Будем искать коэффициенты квадратурной формулы из условий, что она дает точное значение интеграла; точность этой формулы для многочлена максимально высокой степени.

Обозначим

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx,$$

тогда

$$I(x^k) = \frac{x^{k+1}}{k+1} \Big|_{-1}^1 = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1}, \quad k = \overline{0, n}.$$

Пусть

$$I(x^k) = \sum_{i=0}^n A_i x_i^k = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1}, \quad k = \overline{0, n}.$$

Таким образом получили СЛАУ относительно неизвестных коэффициентов квадратурной формулы.

Пример 10.1. Пусть $n=2$, $x_0=-1$, $x_1=0$, $x_2=1$.

Имеем СЛАУ:

$$k=0: \quad A_0 + A_1 + A_2 = 2 \Rightarrow A_1 = \frac{4}{3},$$

$$k=1: \quad -A_0 + A_2 = 0 \Rightarrow A_2 = A_0,$$

$$k=2: \quad A_0 + A_2 = \frac{2}{3} \Rightarrow A_0 = \frac{1}{3}.$$

Тогда

$$I(f) \approx \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1)).$$

В общем случае эту формулу можно обобщить на любой произвольный отрезок $[a, b]$:

$$x \in [-1, 1] \rightarrow x' \in [a, b]; \quad x' = \frac{1}{2}(a(1-x) + b(1+x)) \rightarrow dx' = \frac{b-a}{2} dx$$

$$x'_0 = x'(-1) = a, \quad x'_1 = x'(0) = \frac{a+b}{2}, \quad x'(1) = b.$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{2}{b-a} \int_a^b f(x') dx' = \frac{2}{b-a} I'(f) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow I'(f) = \frac{b-a}{2} I(f) \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right).$$

Таким образом мы снова получили формулу Сипсона.

10.2.2. Квадратурные формулы Гаусса

Квадратурные формулы Гаусса отличаются от формул Ньютона–Котеса тем, что здесь подлежат определению не только коэффициенты квадратурной

формулы, но и узлы интегрирования. Как было рассмотрено выше, интеграл по любому конечному промежутку можно свести к интегралу $[-1,1]$. Пусть

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

где $x \in [-1,1]$, $\{x_i, A_i\}_{i=0,n}$ – неизвестные. Тогда, используя алгебраический подход, получаем уравнения для определения параметров квадратурных

формул:
$$I(x^k) = \sum_{i=0}^n A_i x_i^k = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1}, \quad k = \overline{0, n}.$$

Рассмотрим частные случаи:

1) $n = 0, \quad A_0, x_0 = ?$

$$k = 0: \quad A_0 = 2$$

$$k = 1: \quad A_0 x_0 = 0 \Rightarrow x_0 = 0$$

$$S_0 = 2 \cdot f(0) \quad - \quad \text{формула средних прямоугольников}$$

2) $n = 1, \quad A_0, A_1, x_0, x_1 = ?$

$$k = 0: \quad A_0 + A_1 = 2$$

$$k = 1: \quad A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \Rightarrow A_1 x_1 = -A_0 x_0 \Rightarrow A_1 = A_0 = 1$$

$$k = 2: \quad A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow (A_0 + A_1) x_0^2 = 2 x_0^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$k = 3: \quad A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \Rightarrow A_0 x_0^3 - A_0 x_0 x_1^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow x_0^2 = x_1^2 \Rightarrow x_0 = -x_1$$

3) $n = 2: A_0, A_1, A_2, x_0, x_1, x_2 = ?$

Действуя аналогичным образом, можно получить, что

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}, \quad A_0 = A_2 = \frac{5}{9}, \quad A_1 = \frac{8}{9}$$

Имеются некоторые свойства узлов. При n – четном:

$$x_k = -x_{n-k}, \quad k = \overline{0, \frac{n}{2} - 1}, \quad x_{\frac{n}{2}} = 0,$$

при n – нечетном:

$$x_k = -x_{n-k}, \quad k = \overline{0, \frac{n-1}{2}}.$$

Для оценки погрешности квадратурных формул Гаусса справедлива формула

$$\mathfrak{R}_n(f) = f^{(2n+2)}(\xi) \frac{2^{2n+3} \cdot ((n+1)!)^4}{(2(n+1)!)^3 (2n+3)}.$$

Частные случаи:

$$\mathfrak{R}_0(f) = f''(\xi) \frac{2^3}{24} = f''(\xi) \frac{(b-a)^3}{24},$$

$$\mathfrak{R}_1(f) = f^{(4)}(\xi) \frac{2^5 \cdot 2^4}{4^3 \cdot 5} = f^{(4)}(\xi) \frac{(b-a)^5 \cdot 2^4}{4^3 \cdot 5},$$

$$\mathfrak{R}_2(f) = f^{(6)}(\xi) \frac{2^7 \cdot 6^4}{12^3 \cdot 7} = f^{(6)}(\xi) \frac{(b-a)^7 \cdot 6^4}{12^3 \cdot 7}.$$

10.2.3. Интегралы от быстро осциллирующих функций и нерегулярные (несобственные) интегралы

Задачи, сводящиеся к интегрированию быстро осциллирующих функций, возникают во многих приложениях. Последние годы появляются новые оригинальные методы. Здесь рассмотрим классический метод интегрирования квадратурными формулами.

Пусть требуется вычислить интеграл:

$$\int_a^b f(x) \sin(\omega x) dx \quad \text{или} \quad \int_a^b f(x) \cos(\omega x) dx,$$

в квадратурной формуле (10.11) возьмем в качестве весовой функции $p(x) = \sin(\omega x)$ или $p(x) = \cos(\omega x)$.

Квадратурные формулы, рассмотренные ранее, значительно теряют в данном случае свою точность. Метод построения квадратурных формул для интегралов от быстро осциллирующих функций состоит в том, что функция $f(x)$ аппроксимируется алгебраическим полиномом $P_n(x)$ некоторой степени n , а получающиеся после этого функции $C_i f(x_i)$ интегрируются аналитически:

$$\int_a^b f(x) \sin(\omega x) dx \approx \sum_{i=0}^n C_i f(x_i).$$

Еще один способ: разбить весь интервал (a, b) на большое число частей и аппроксимировать функцию $f(x)$ в каждом малом интервале своим полиномом.

Часто приходится решать задачи вычисления несобственных интегралов – интегралов с бесконечными пределами или с конечными пределами, но подынтегральной функцией, обращающейся в бесконечность на отрезке интегрирования. Причем несобственный интеграл с бесконечными пределами можно преобразовать в несобственный интеграл или даже собственный с

конечными пределами (достаточно сделать замену переменного под знаком интеграла или взять интеграл в конечных достаточно больших пределах так, что значение отбрасываемой части интеграла было значительно меньше, чем заданная точность вычисления интеграла).

Пусть требуется вычислить интеграл

$$\int_a^b f(x)dx, \quad f(x) \xrightarrow{x \rightarrow a} \infty.$$

Функцию $f(x)$ представим в виде

$$f(x) = p(x)g(x),$$

где $p(x) > 0$ на интервале интегрирования – весовая функция, $g(x)$ – ограниченная функция на интервале интегрирования, имеющая достаточное количество непрерывных производных. За приближенное значение интеграла берется результат применения квадратурной формулы численного интегрирования к функции $g(x)$.

Пример 10.2.

$$f(x) = \frac{g(x)}{\sqrt{x-a}}, \quad g(x) \xrightarrow{x \rightarrow a} c, \quad c - const,$$

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{x-a}},$$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p(x)g(x)dx \approx \sum_{i=0}^n C_i g(x_i).$$

Построение квадратурных формул:

$$\int_a^b p(x) \cdot 1 \cdot dx = \sum_{i=0}^n C_i$$

$$\int_a^b p(x) \cdot x dx = \sum_{i=0}^n C_i x_i$$

...

$$\int_a^b p(x) \cdot x^n dx = \sum_{i=0}^n C_i x_i^n$$

Все интегралы в левой части данных уравнений берутся аналитически.

10.2.4. Повышение точности интегрирования за счет разбиения отрезка на равные части (составные квадратурные формулы)

Погрешность квадратурной формулы оценивается через погрешность, с которой функция может быть приближена многочленами. Поэтому может показаться естественным добиваться увеличения точности за счет повышения степени многочленов, для которых эта квадратура точна. Однако такой путь

содержит свои «подводные камни» [1] (см. лекцию 7). Оказывается более выгодным разбить исходный отрезок на равные части и в каждой части применять ту или иную квадратурную формулу.

Пусть требуется вычислить интеграл

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx.$$

Для него составная квадратурная формула трапеций:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} \frac{x_{j+1} - x_j}{2} (f(x_j) + f(x_{j+1})).$$

При $x_j = a + j \cdot h$, $h = \frac{b-a}{N}$:

$$S_1(f) = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{N-1} (f(x_j) + f(x_{j+1})) = h \left(\frac{1}{2} (f(x_0) + f(x_N)) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right),$$

$$|\mathfrak{R}_1(f; [x_j, x_{j+1}])| \leq \frac{h^3}{12} M_2,$$

$$|\mathfrak{R}_1(f; [a, b])| \leq \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h^3}{12} M_2 = \frac{h^3}{12} M_2 N = \frac{h^2}{12} (b-a) M_2.$$

Составная формула Симпсона:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} \frac{x_{j+1} - x_j}{6} \left(f(x_j) + 4f\left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right) + f(x_{j+1}) \right).$$

При $x_j = a + j \cdot h$, $h = \frac{b-a}{N}$, N – четное:

$$S_2(f) = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) + f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4) + \dots$$

$$\dots + f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)) =$$

$$= \frac{h}{3} \left((f(x_0) + f(x_N)) + 4 \sum_{k=1}^{N/2} f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{N/2-1} f(x_{2k}) \right)$$

$$|\mathfrak{R}_2(f; [a, b])| \leq \frac{h^4 (b-a)}{2880} M_4$$

Если подынтегральную функцию аппроксимировать кубическим сплайном, то получим:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} S_{3,1}(f; x)dx =$$

$$= \sum_{j=0}^{N-1} \left(f(x_j) \int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi_0(\tau)dx + f(x_{j+1}) \int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi_0(1-\tau)dx + h_j m_j \int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi_1(\tau)dx - h_j m_{j+1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi_1(1-\tau)dx \right).$$

Нетрудно показать, что полученная квадратурная формула имеет четвертый порядок точности, как и формула Симпсона.

В случае равномерной сетки и $m_0 = f'(x_0)$, $m_N = f'(x_N)$ эта составная квадратурная формула принимает вид

$$S_3(f) = h \left(\frac{1}{2}(f(x_0) + f(x_N)) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right) + \frac{h^2}{12}(f'(x_0) - f'(x_N)).$$

То есть, в этом случае, мы получаем небольшую модификацию составной формулы трапеций, в которую добавляется только пара дополнительных слагаемых. Но при этом порядок аппроксимации увеличивается со второго до четвертого. Аналогично можно построить составные квадратурные формулы Гаусса.

Замечание. *Вычислительные* затраты по составным квадратурным формулам определяются количеством вычисленных значений подынтегральной функции (обращений к функции/процедуре, в которой реализована подынтегральная функция). При программной реализации численного алгоритма это необходимо учитывать.

10.2.5. Оценка погрешности результата интегрирования методом Рунге

Общая идея оценки погрешности результата численного интегрирования методом Рунге состоит в следующем. Интеграл вычисляется по выбранной квадратурной формуле при числе шагов, равном n , а затем при числе шагов, равном $2n$. Погрешность вычисления значения интеграла при числе шагов, равном $2n$, определяется по формуле Рунге:

$$\Delta_{2n} = \Theta |I_{2n} - I_n|,$$

где Θ принимает разные значения для различных методов. Процесс вычислений интеграла заканчивается, когда для очередного значения n будет выполнено условие $\Delta_{2n} < \varepsilon$, где ε – заданная точность.

Оценка погрешности методом Рунге для составных квадратурных формул:

$$I(f) - S(f; h_1) = C_1 h_1^k,$$

$$I(f) - S(f; h_2) = C_2 h_2^k = C_1 h_2^k + C h_2^{k+1},$$

$$S(f; h_2) - S(f; h_1) = C_1(h_1^k - h_2^k) + Ch^{k+1},$$

$$C_1 \approx \frac{S(f; h_2) - S(f; h_1)}{h_1^k - h_2^k},$$

$$I(f) \approx S(f; h_1) + C_1 h_1^k \approx S(f; h_2) + C_1 h_2^k.$$

Пусть

$$h_1 = h, \quad h_2 = \alpha h, \quad \alpha = 1/2,$$

$$C_1 \approx \frac{S(f; \alpha h) - S(f; h)}{h^k(1 - \alpha^k)},$$

тогда оценка погрешности

$$C_1(\alpha h)^k = \frac{\alpha^k}{1 - \alpha^k} (S(f; \alpha h) - S(f; h)).$$

Получение эмпирической оценки порядка аппроксимации:

$$I(f) - S(f; h) = Ch^k$$

$$I(f) - S(f; \alpha h) = C\alpha^k h^k$$

$$I(f) - S(f; \alpha^2 h) = C\alpha^{2k} h^k$$

$$S(f; \alpha h) - S(f; h) = Ch^k(1 - \alpha^k)$$

$$S(f; \alpha^2 h) - S(f; h) = Ch^k(1 - \alpha^{2k}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{S(f; \alpha^2 h) - S(f; h)}{S(f; \alpha h) - S(f; h)} = \frac{1 - \alpha^{2k}}{1 - \alpha^k} = \frac{(1 - \alpha^k)(1 + \alpha^k)}{(1 - \alpha^k)} = 1 + \alpha^k \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k = \frac{1}{\ln(\alpha)} \ln \left(\frac{S(f; \alpha^2 h) - S(f; h)}{S(f; \alpha h) - S(f; h)} - 1 \right).$$

10.2.6. Устойчивость численного интегрирования

Если даже при небольших погрешностях аппроксимации или вычислений при выбранном шаге интегрирования накопленная погрешность растёт от шага к шагу, то метод является неустойчивым, а получаемые результаты вычислений практически бесполезны.

Ниже приведено условие устойчивости для составной квадратурной формулы трапеций. Пусть $\tilde{f}(x_j) = f(x_j) + \varepsilon_j$,

тогда

$$\begin{aligned}
S_1(\tilde{f}; h) &= \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{N-1} (\tilde{f}(x_j) + \tilde{f}(x_{j+1})) = h \left(\frac{1}{2} (\tilde{f}(x_0) + \tilde{f}(x_N)) + \sum_{j=1}^{N-1} \tilde{f}(x_j) \right) = \\
&= h \left(\frac{1}{2} (f(x_0) + f(x_N)) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \right) + h \left(\frac{1}{2} (\varepsilon_0 + \varepsilon_N) + \sum_{j=1}^{N-1} \varepsilon_j \right) = \\
&= S_1(f; h) + R(\varepsilon; h).
\end{aligned}$$

Если $|\varepsilon_j| < E$, то $|R(\varepsilon)| < hNE = (b-a)E$.

То есть при увеличении числа разбиений накопленная погрешность не возрастает и метод является устойчивым.

10.3. Вычисление многомерных интегралов

10.3.1. Кубатурные формулы

При вычислении двойных интегралов используются так называемые «кубатурные формулы». Для построения кубатурной формулы берется сетка (равномерная или неравномерная) точек, покрывающая область интегрирования, и строится формула. Пусть требуется вычислить интеграл:

$$I = \int_a^b dx \int_c^d f(x, y) dy = \int_a^b F(x) dx, \quad F(x) = \int_c^d f(x, y) dy.$$

Тогда:

$$\begin{aligned}
\int_a^b F(x) dx &\approx \sum_{i=0}^n A_i F(x_i), \quad F(x_i) = \int_c^d f(x_i, y) dy \approx \sum_{j=0}^m B_j f(x_i, y_j) \Rightarrow \\
\Rightarrow I &\approx \sum_{i=0}^n A_i \sum_{j=0}^m B_j f(x_i, y_j) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m A_i B_j f(x_i, y_j) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m a_{ij} f(x_i, y_j)
\end{aligned}$$

$$a_{ij} = A_i B_j, \quad i = \overline{0, n}, \quad j = \overline{0, m}.$$

Затраты при вычислении по кубатурным формулам порядка $O(n \cdot m)$. Для составных кубатурных формул затраты – $O(N_1 \cdot N_2)$.

10.3.2. Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний)

Обратимся к вычислению интегралов кратности m . Подходы, основанные на разбиении интервалов интегрирования на n подынтервалов, требуют объема вычислений порядка n^m . Поэтому при больших значениях m и n применяют методы статистических испытаний (Монте-Карло). Суть методов состоит в том, что для область интегрирования S «погружается» в n -мерный параллелепипед и подвергается «бомбардировке» n случайными, равномерно распределенными в нем точками. Рассмотрим этот метод подробнее.

Пусть функция $y = f(x_1, x_2, \dots, x_m) = f(\vec{x})$ непрерывна в некоторой ограниченной замкнутой области S и требуется вычислить интеграл:

$$I(f) = \iiint_S \dots \int f(x_1, x_2, \dots, x_m) dx_1 dx_2 \dots dx_m. \quad (10.12)$$

Пусть область S расположена в m -мерном параллелепипеде $a_i \leq x_i \leq b_i$, $i = 1, 2, \dots, m$. Рассмотрим сначала случай со знакоопределенной функцией

$$f(\vec{x}) \geq 0, \quad \vec{x} \in S.$$

Тогда числовое значение интеграла (10.12) можно рассматривать как величину объема (гипер-) тела V в $m+1$ -мерном пространстве, элементами которого являются векторы $(x_1, x_2, \dots, x_m, y)^T$. В этом случае интеграл (10.12) можно переписать в виде

$$I(f) = \int \int \dots \int_V dx_1 dx_2 \dots dx_m dy,$$

где область V определяется условиями:

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T \in S, \quad 0 \leq y \leq f(\vec{x}) \leq b_{m+1}.$$

Например, для одномерного интеграла

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b dx \int_0^{f(x)} ds$$

речь пойдет о вычислении площади фигуры, ограниченной снизу осью x , сверху функцией $f(x)$, слева и справа границами интегрирования (см. рис.10.3):

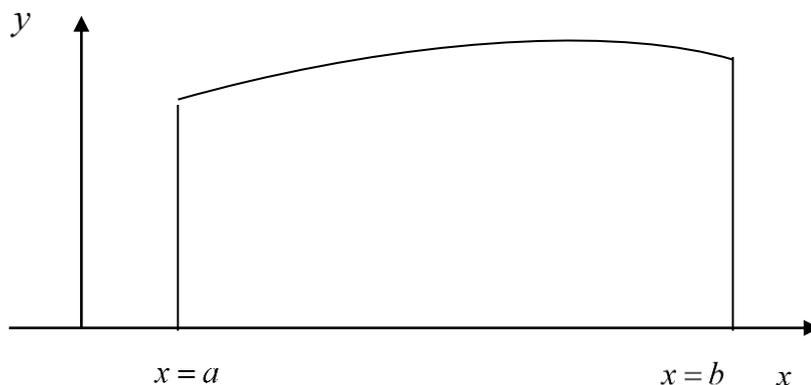


Рис. 10.3. Геометрический смысл одномерного интеграла от функции $f(x)$

Выберем последовательности случайных чисел, равномерно распределенных на отрезках:

$$\begin{aligned} & \xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \dots, \xi_N^{(1)}; \quad [a_1, b_1], \\ & \xi_1^{(2)}, \xi_2^{(2)}, \dots, \xi_N^{(2)}; \quad [a_2, b_2], \\ & \dots, \\ & \xi_1^{(m)}, \xi_2^{(m)}, \dots, \xi_N^{(m)}; \quad [a_m, b_m], \xi_1^{(m+1)}, \xi_2^{(m+1)}, \dots, \xi_N^{(m+1)}; \quad [a_{m+1}, b_{m+1}]. \end{aligned}$$

Тогда точки $M_j = (\xi_j^{(1)}, \xi_j^{(2)}, \dots, \xi_j^{(m+1)}); \quad j = 1, \dots, N$ можно рассматривать как случайные. Проведем испытания и определим количество точек, принадлежащих и не принадлежащих области V :

$$\begin{aligned} M_j & \in V, \quad j = 1, \dots, n; \\ M_j & \notin V, \quad j = n + 1, \dots, N; \end{aligned}$$

Тогда значение интеграла (10.12) может быть определено как

$$I(f) \approx \frac{n}{N} \prod_{i=1, m} (b_i - a_i).$$

Теперь рассмотрим случай, когда функция $f(\vec{x})$, $\vec{x} \in S$ знакопеременная.

Пусть

$$a_{m+1} \leq f(\vec{x}) \leq b_{m+1}, \quad \vec{x} \in S.$$

Тогда

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - a_{m+1} \geq 0.$$

Очевидно, что:

$$b_{m+1} - a_{m+1} = \tilde{b}_{m+1},$$

и

$$\tilde{V} = \{x \in S, \quad 0 \leq y \leq \tilde{b}_{m+1}\}.$$

В этом случае значение интеграла (10.12) можно вычислить следующим образом:

$$\begin{aligned} I(f) &= \iint_S \dots \int f(x_1, x_2, \dots, x_m) dx_1 dx_2 \dots dx_m = \\ &= \iint_S \dots \int \tilde{f}(x) dx_1 dx_2 \dots dx_m + a_{m+1} \iint_S \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_m = \\ &= \int \int \dots \int \tilde{V} dx_1 dx_2 \dots dx_m dy + a_{m+1} \iint_S \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_m. \end{aligned}$$

Оценка погрешности производится на основании теоремы Бернулли, при использовании неравенства Чебышева:

$$I(f) \approx \frac{n}{N} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \right) \prod_{i=1,m} (b_i - a_i).$$

10.4. Вопросы и задания к лекции

1. Назовите основные подходы для построения операторов численного дифференцирования.
2. В чем суть метода неопределённых коэффициентов при построении операторов численного дифференцирования?
3. Назовите основные квадратурные формулы, применимые при численном интегрировании.
4. В чем отличие (с точки зрения построения) квадратурных формул Гаусса от квадратурных формул Ньютона–Котеса?
5. Как можно построить таблицу значений первообразной функции неопределенного интеграла?
6. Как численно вычислить многомерный интеграл?
7. С помощью датчика случайных чисел получены точки со значениями координат (x, y) : $(0.11, 0.02)$, $(0.32, 0.09)$, $(0.95, 0.7)$, $(0.21, 0.04)$, $(0.83, 0.55)$, $(0.6, 0.25)$. Используя эти точки, вычислите интеграл $\int_0^1 (x^2 - 3x) dx$ методом Монте-Карло.
8. Вычислите значение интеграла $\int_0^1 \int_0^1 (x^2 + y^2 + 8xy) dx dy$ по формуле средних прямоугольников.

10.5. Лабораторная работа № 6 на тему «Численное интегрирование»

Задача. Вычислите интеграл

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

Указания по выполнению задачи. Используя обобщенные квадратурные формулы и метод Рунге с точностью (относительной погрешностью) $\varepsilon = 10^{-8}$ вычислить интеграл с помощью обобщенных формул

- трапеций;
- трапеций (модифицированной с помощью сплайна);
- Симпсона;
- Гаусса (трехточечной).

Оценить порядок аппроксимации квадратурной формулы с помощью метода Рунге. Итоговый результат (значение интеграла) выдавать с максимально допустимой точностью.

Провести оценку эффективности рассмотренных формул по точности и вычислительным затратам, учитывая общее число обращений к подынтегральной функции.

Вычисления произвести на отрезке $[1, 2]$ для функций, использованных в лабораторной работе № 5.

Лекция 11. Численные методы решения задачи Коши для ОДУ

Моделирование многих практических задач приводит к решению дифференциальных уравнений в обыкновенных и в частных производных. В настоящем разделе рассмотрим методы численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}y'(x) &= f(x, y), \\y(x_0) &= y_0, \\y(x) &= ? \quad x \in [x_0, x_n]\end{aligned}\tag{11.1}$$

То есть требуется получить интегральную кривую $y = y(x)$, проходящую через заданную точку $M(x_0, y_0)$. Существование и единственность решения задачи следует из теоремы Коши [8]. Приведем ее без доказательства.

Теорема существования и единственности решения задачи Коши. Если правая часть $f(x, y)$ уравнения (11.1) и её частная производная $f'_y(x, y)$ определены и непрерывны в некоторой области изменения переменных x и y , то для всякой внутренней точки (x_0, y_0) этой области данное уравнение имеет единственное решение, принимающее заданное значение $y = y_0$ при $x = x_0$.

Методы решения задачи Коши для ОДУ делятся на точные, приближенные и численные. Точные методы изучаются в курсах дифференциальных уравнений. При использовании приближенных методов решение задачи Коши для ОДУ определяется как предел некоторой последовательности функций. К приближенным методам относятся: разложения решения в обобщенный степенной ряд, метод Чаплыгина, метод Пикара, Канторовича и др. [3].

С появлением ЭВМ численные методы стали одним из основных способов решения практических задач для ОДУ. Они не дают общего решения задачи Коши и предназначены для вычисления приближенных значений частных решений задач на заранее выбранной сетке аргумента x . Решение получается в виде таблицы. Существуют две группы численных методов решения задачи Коши: многошаговые и одношаговые. Рассмотрим некоторые из них подробнее.

11.1. Решение задачи Коши для ОДУ с помощью формулы Тейлора

Один из самых простых методов решения задачи Коши основан на использовании формулы Тейлора. Пусть на отрезке $[a, b]$ требуется найти решение задачи Коши (11.1) при заданных начальных условиях $y(a) = y_0$. Решение рассматриваемой задачи Коши ищется в виде разложения в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned}
y'(x) &= f(x, y) \Rightarrow \\
\Rightarrow y''(x) &= f_x(x, y) + f_y(x, y)y'(x) \Rightarrow \\
\Rightarrow y'''(x) &= f_{xx}(x, y) + 2f_{xy}(x, y)y'(x) + f_{yy}(x, y)y'^2(x) + \\
&+ f_y(x, y)y''(x), \dots
\end{aligned}$$

В итоге получаем:

$$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} y''(x_0) + \frac{(x - x_0)^3}{3!} y'''(x_0) + \dots$$

Алгоритм реализации:

Для каждого $x_k = k \cdot h$, $k = 0, 1, 2, \dots$ считаем:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hy'(x_k) + \frac{h^2}{2!} y''(x_k) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_k) + \dots$$

В итоге получаем решение в виде:

$$y(x) = y(x_k) + (x - x_k)y'(x_k) + \frac{(x - x_k)^2}{2!} y''(x_k) + \frac{(x - x_k)^3}{3!} y'''(x_k) + \dots, \quad x \in [x_k, x_{k+1}]$$

Пример 11.1. Решить задачу

Коши для ОДУ при заданных $y'(x) = x + y^2(x)$,
начальных условиях: $y(0) = 1$.

Решение:

$$f(x, y) = x + y^2,$$

$$f_x(x, y) = 1, \quad f_y(x, y) = 2y,$$

$$f_{xx}(x, y) = 0, \quad f_{xy}(x, y) = 0, \quad f_{yy} = 2.$$

Подставляем в начальные условия:

$$y'(0) = 0 + 1^2 = 1,$$

$$y''(0) = 1 + 2y(0)y'(0) = 3,$$

$$y'''(0) = 0 + 0 + 2y'^2(0) + 2y(0)y''(0) = 8,$$

В итоге получаем решение в виде:

$$y(x) = 1 + x \cdot y'(0) + \frac{x^2}{2} y''(0) + \frac{x^3}{6} y'''(0) + \dots = 1 + x + \frac{3}{2} x^2 + \frac{4}{3} x^3 + \dots$$

11.2. Методы Рунге–Кутты

11.2.1. Метод Эйлера

Метод Эйлера сводится к нахождению таблицы значений решения $y(x)$ задачи Коши для x из $[x_0, X]$. Будем искать решение в узлах сетки:

$$x_j = x_0 + j \cdot h, \quad h = \frac{X - x_0}{N}.$$

Задаче (11.1) эквивалентна следующая задача:

$$y(x_1) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_1} f(x, y(x)) dx. \quad (11.2)$$

Воспользуемся формулой «левых прямоугольников»:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x, y(x)) dx = (x_1 - x_0) f(x_0, y_0) + C_0 h^2 = h \cdot f(x_0, y_0) + C_0 h^2.$$

Аналогично:

$$\begin{aligned} y(x_{j+1}) &= y(x_j) + h \cdot f(x_j, y(x_j)) + C_j h^2 = \\ &= (y(x_{j-1}) + h \cdot f(x_{j-1}, y(x_{j-1})) + C_{j-1} h^2) + \\ &+ h \cdot f(x_j, y(x_j)) + C_j h^2 = \\ &= y_0 + h \sum_{k=0}^j f(x_k, y(x_k)) + h^2 \sum_{k=0}^j C_k. \end{aligned}$$

Пусть

$$|C_j| \leq C \Rightarrow \left| h^2 \sum_{k=0}^j C_k \right| \leq Ch^2(j+1) = Ch \frac{j+1}{N} (X - x_0) = C(X - x_0) \frac{j+1}{N} h = O(h).$$

Получаем решение в виде:

$$y_{j+1} = y_j + h \cdot f(x_j, y_j), \quad j = \overline{0, N-1}. \quad (11.3)$$

или

$$\frac{y_{j+1} - y_j}{h} = f(x_j, y_j), \quad \text{но} \quad \frac{y_{j+1} - y_j}{h} = y'(x_j) + O(h).$$

Таким образом, метод Эйлера *аппроксимирует* исходную задачу с точностью $O(h)$. Если воспользоваться формулой «правых» прямоугольников, получим неявный метод Эйлера:

$$y_{j+1} = y_j + hf(x_{j+1}, y_{j+1})$$

Пример 11.2. Решить задачу Коши для ОДУ при заданных начальных условиях.

$$\begin{aligned} y'(x) &= -M \cdot y(x), \quad M > 0, \quad x \in [0, 1] \\ y(0) &= 1. \end{aligned}$$

Точное решение:

$$y(x) = e^{-M \cdot x}, \\ 0 < y(x) \leq 1, \quad x \in [0, 1].$$

Явный метод Эйлера:

$$y_{j+1} = y_j - h \cdot M \cdot y_j = (1 - hM)y_j, \quad j = \overline{0, N-1}$$

или

$$y_{j+1} = q^j y_0, \quad q = 1 - hM.$$

Очевидно, чтобы решение оставалось положительным на все промежутке интегрирования, должно выполняться условие $0 < q < 1$, откуда:

$$h < \frac{1}{M}.$$

Утверждение. Оценки аппроксимации справедливы при $h < h_0$, где значение h_0 зависит от решаемой задачи.

Неявный метод Эйлера:

$$y_{j+1} = y_j - hM \cdot y_{j+1} \Rightarrow (1 + hM)y_{j+1} = y_j \Rightarrow \\ y_{j+1} = \frac{y_j}{1 + hM} \Rightarrow y_j = q^j y_0, \quad q = \frac{1}{1 + hM}.$$

Очевидно, $0 < q < 1$ при любых значениях h .

Явный метод Эйлера *условно устойчивый*, неявный – *абсолютно устойчивый*.

11.2.2. Методы типа «предиктор-корректор»

Суть схемы численного решения «предиктор-корректор» состоит в том, что на первом шаге одним методом находится грубое приближение требуемого решения, а на втором шаге другим методом полученное приближение уточняется. Причем, коррекцию можно проводить не один раз, а до получения заданной точности. Рассмотрим одну из возможных таких схем.

Для решения задачи Коши воспользуемся квадратурной формулой трапеций (*неявная формула Адамса* второго порядка точности):

$$y(x_{j+1}) = y(x_j) + \frac{h}{2} (f(x_j, y(x_j)) + f(x_{j+1}, y(x_{j+1}))) + O(h^3).$$

По явному методу Эйлера определи «грубое» приближение:

$$y^*(x_{j+1}) = y(x_j) + h \cdot f(x_j, y(x_j)) + O(h^2),$$

НО

$$\begin{aligned} f(x_{j+1}, y(x_{j+1})) &= f(x_{j+1}, y^*(x_{j+1})) + (y(x_{j+1}) - y^*(x_{j+1}))f_y(x_{j+1}, y(\theta \cdot x_{j+1})) = \\ &= f(x_{j+1}, y^*(x_{j+1})) + O(h^2). \end{aligned}$$

Таким образом мы получили метод «предиктор-корректор» с аппроксимацией $O(h^2)$:

$$\begin{cases} y_{j+1}^* = y_j + hf(x_j, y_j), \\ y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}(f(x_j, y_j) + f(x_{j+1}, y_{j+1}^*)), \quad j = \overline{0, N-1}. \end{cases}$$

Если воспользоваться формулой средних прямоугольников, аналогично получим метод с аппроксимацией $O(h^2)$:

$$\begin{cases} y_{j+1/2}^* = y_j + \frac{h}{2}f(x_j, y_j), \\ y_{j+1} = y_j + h \cdot f(x_{j+1/2}, y_{j+1/2}^*), \quad j = \overline{0, N-1}. \end{cases}$$

Пример 11.3. Решить задачу Коши для ОДУ при заданных начальных условиях.

$$\begin{aligned} y'(x) &= -M \cdot y(x), \quad M > 0, \quad x \in [0, 1] \\ y(0) &= 1. \end{aligned}$$

Решение:

1) Воспользуемся схемой предиктор-корректор, основанной на методе трапеций:

$$\begin{aligned} y_{j+1}^* &= y_j - hM \cdot y_j = (1 - hM)y_j, \\ y_{j+1} &= y_j + \frac{h}{2}(-My_j - M(1 - hM)y_j) = \left(1 - \frac{h}{2}M(1 + (1 - hM))\right)y_j = q \cdot y_j, \\ q &= 1 - \frac{h}{2}M(2 - hM) = 1 - hM + \frac{1}{2}h^2M^2 = \left(1 - \frac{h}{2}M\right)^2 + \frac{h^2}{4}M > 0. \end{aligned}$$

Из условия $q < 1$, следует:

$$1 - hM + \frac{1}{2}h^2M^2 < 1 \Rightarrow h < \frac{2}{M}.$$

2) Воспользуемся схемой предиктор-корректор, основанной на методе средних прямоугольников:

$$\begin{aligned} y_{j+1/2}^* &= y_j - \frac{h}{2}M \cdot y_j = \left(1 - \frac{h}{2}M\right)y_j, \\ y_{j+1} &= y_j - hM \cdot y_{j+1/2}^* = y_j - hM \left(1 - \frac{h}{2}M\right)y_j = \left(1 - hM \left(1 - \frac{h}{2}M\right)\right)y_j = q \cdot y_j, \end{aligned}$$

$$q = 1 - hM \left(1 - \frac{h}{2} M \right) = 1 - hM + \frac{1}{2} h^2 M^2.$$

Получен результат, аналогичный предыдущему.

Пример 11.4. Уравнения Лотке–Вольterra («хищник-жертва»):

$$\frac{dx(t)}{dt} = \alpha_1 x(t) - \beta_1 x(t)y(t), \quad \alpha_1, \beta_1 > 0,$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\alpha_2 y(t) + k\beta_1 x(t)y(t), \quad \alpha_2 > 0, 0 < k \leq 1.$$

Условию равновесия $\frac{dx(t)}{dt} = \frac{dy(t)}{dt} = 0$ соответствует особая точка типа «центр», для которой:

$$x_* = \frac{\alpha_2}{k\beta_1}, \quad y_* = \frac{\alpha_1}{\beta_1}.$$

В этом случае в фазовой плоскости (x, y) решение имеет вид замкнутой кривой, расположенной вокруг особой точки.

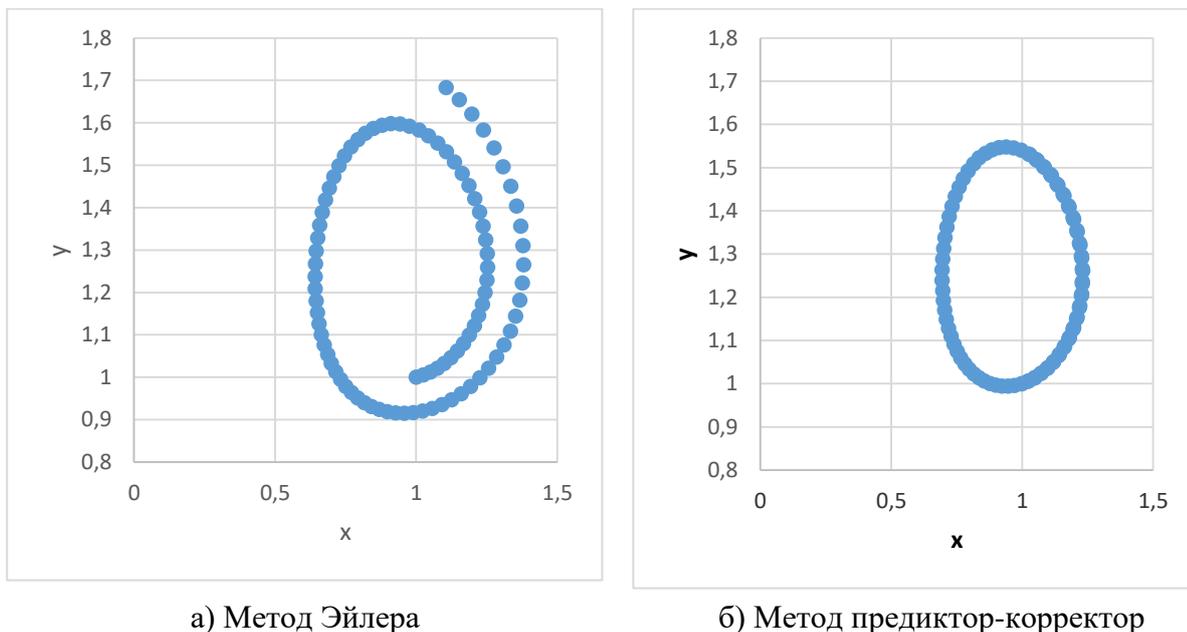


Рис.11.1 Метод Эйлера (а), метод предиктор-корректор (б)

На рис. 11.1, а-б представлены результаты численного решения этой задачи при $\alpha_1 = 0.5$, $\alpha_2 = 0.3$, $\beta_1 = 0.4$, $k = 0.8$, $x(0) = y(0) = 1$ методами Эйлера и предиктор-корректор с шагом $h = 0.25$. Откуда видно, что метод Эйлера дает «качественно» неправильное решение, которое не улучшается даже с уменьшением шага интегрирования, что связано, в первую очередь, со значительной погрешностью метода.

11.2.3. Общая формулировка методов Рунге–Кутты

Явный m -этапный метод Рунге–Кутта состоит в следующем. Пусть существует решение $y_n = y(x_n)$. Задаются числовые параметры:

$$\alpha_2, \dots, \alpha_m; \quad p_1, \dots, p_m; \quad \beta_{i,j}, \quad 0 < j < i \leq m. \quad (11.3)$$

Последовательно вычисляются функции:

$$k_1(h) = h \cdot f(x, y),$$

$$k_2(h) = h \cdot f(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} k_1(h)),$$

...

$$k_m(h) = h \cdot f(x + \alpha_m h, y + \beta_{m,1} k_1(h) + \beta_{m,2} k_2(h) + \dots + \beta_{m,m-1} k_{m-1}(h)).$$

Далее находится:

$$y(x+h) \approx z(h) = y(x) + \sum_{i=1}^m p_i k_i(h).$$

Обозначим $\varphi(h) = y(x+h) - z(h)$. Если $f(x, y)$ – достаточно гладкая, то $\varphi(h)$ и $k_i(h)$, $i = 1, 2, \dots, m$ – гладкие функции параметра h . Будем выбирать параметры (11.3) из условий:

$$\varphi'(0) = \varphi''(0) = \dots = \varphi^{(s)}(0) = 0.$$

По определению

$$\varphi(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 h f(x, y) - \dots - p_m h f(x + \alpha_m h, y + \beta_{m,1} k_1(h) + \dots + \beta_{m,m-1} k_{m-1}(h)),$$

следовательно $\varphi(0) = 0$.

Таким образом,

$$\varphi(h) = \sum_{i=0}^m \frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!} h^i + \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta \cdot h)}{(s+1)!} h^{s+1} = \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta \cdot h)}{(s+1)!} h^{s+1}, \quad 0 < \theta < 1.$$

Величина $\varphi(h)$ называется погрешностью метода на шаге h , а s – порядком погрешности метода.

11.2.4. Частные случаи методов Рунге–Кутты

1. При $m = 1$ имеем:

$$z(h) = y(x) + p_1 k_1(h) = y(x) + p_1 h \cdot f(x, y),$$

$$z'(h) = p_1 f(x, y),$$

$$\varphi'(h) = y'(x+h) - z'(h) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \varphi'(0) = y'(x) - p_1 f(x, y) = f(x, y)(1 - p_1) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow p_1 = 1.$$

$$\varphi''(h) = y''(x+h),$$

$y(x+h) \approx y(x) + h \cdot f(x, y)$ – метод Эйлера

$$\varphi(h) = \frac{y''(x + \theta h)h^2}{2}.$$

2. При $m = 2$ имеем:

$$k_1(h) = h \cdot f(x, y),$$

$$k_2(h) = h \cdot f(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} k_1(h)),$$

$$z(h) = y(x) + p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h),$$

$$z'(h) = p_1 f(x, y) + p_2 f(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(x, y)) + \\ + p_2 h [\alpha_2 f_x(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(x, y)) + \beta_{2,1} f_y(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(x, y)) f(x, y)],$$

$$z''(h) = 2p_2 [\alpha_2 f_x(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(x, y)) + \\ + \beta_{2,1} f_y(x + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(x, y)) f(x, y)] + O(h).$$

$$\varphi'(0) = y'(x) - z'(0) = f(x, y) - p_1 f(x, y) - p_2 f(x, y) = 0 \Rightarrow p_1 + p_2 = 1$$

$$\varphi''(0) = y''(x) - z''(0) = f_x(x, y) + f_y(x, y) y'(x) - 2p_2 (\alpha_2 f_x(x, y) + \beta_{2,1} f_y(x, y) f(x, y)) = 0 \\ \Rightarrow \\ 1 - 2p_2 \alpha_2 = 0, \quad 1 - 2p_2 \beta_{2,1} = 0.$$

Пусть $p_2 = 1/2$, тогда $p_1 = 1/2$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_{2,1} = 1$:

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{h}{2} (f(x, y) + f(x+h, y + hf(x, y))).$$

Пусть $p_2 = 1$, тогда $p_1 = 0$, $\alpha_2 = 1/2$, $\beta_{2,1} = 1/2$:

$$y(x+h) \approx y(x) + hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(x, y)\right).$$

Получили уже знакомые нам методы типа предиктор-корректор.

3. В случае $m = 2$ и $s = 3$ – решения не существует.

4. В случае $m = s = 3$ имеем:

$$k_1(h) = hf(x, y), \quad k_2(h) = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{1}{2} k_1(h)\right),$$

$$k_3(h) = hf(x+h, y - k_1(h) + 2k_2(h)),$$

$$y(x+h) \approx y(x) + \frac{1}{6} (k_1(h) + 4k_2(h) + k_3(h)).$$

5. В случае $m = 3$ и $s = 4$ – решения не существует.

6. В случае $m = s = 4$ наиболее употребима схема:

$$\begin{aligned}k_1(h) &= hf(x, y), \quad k_2(h) = hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{1}{2}k_1(h)\right), \\k_3(h) &= hf\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{1}{2}k_2(h)\right), \quad k_4(h) = hf(x + h, y + k_3(h)), \\y(x + h) &\approx y(x) + \frac{1}{6}(k_1(h) + 2k_2(h) + 2k_3(h) + k_4(h)).\end{aligned}$$

11.2.5. Автоматический контроль точности (идея метода Рунге) и автоматического выбора шага

Алгоритм

Вычисляем:

$$\begin{aligned}y_{j+1} &= y_j + \sum_{i=1}^m p_i k_i(h, y_j), \\y_{j+1/2} &= y_j + \sum_{i=1}^m p_i k_i\left(\frac{h}{2}, y_j\right), \\y_{j+1}^* &= y_{j+1/2} + \sum_{i=1}^m p_i k_i\left(\frac{h}{2}, y_{j+1/2}\right).\end{aligned}$$

Если $\left|y_{j+1} - y_{j+1}^*\right| < \varepsilon$, точность достигнута. Если $\left|y_{j+1} - \bar{y}_{j+1}\right| > \varepsilon$ уменьшаем h два раза и повторяем расчет от точки (x_j, y_j) .

11.3. Многошаговые методы

11.3.1. Общая схема многошаговых методов

Многошаговые методы решения задачи Коши для ОДУ сводятся к нахождению приближенного значения функции y_{n+k} в точке x_{n+k} через значения решения в предшествующих k точках (k -шаговые методы).

Пусть имеется задача Коши при заданных начальных условиях (11.1). Численным решением данной задачи будет являться:

$$y_{n+k} = F(f, x_{n+k}, \dots, x_n, y_{n+k}, \dots, y_n).$$

Так как использование многошаговых методов на неравномерных сетках крайне сложно, по умолчанию предполагается использование равномерной сетки. Среди многошаговых методов наиболее распространены в использовании конечно-разностные методы (или схемы). Метод Адамса – самый популярный конечно-разностный многошаговый метод численного

интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Рассмотрим его подробнее.

11.3.2. Метод Адамса (1855 г.)

Идея метода Адамса заключается в использовании интерполяционной формулы Ньютона:

$$f(x) = f_k + (x - x_k)f(x_{k-1}, x_k) + (x - x_k)(x - x_{k-1})f(x_{k-2}, x_{k-1}, x_k) + \dots \quad (11.4)$$

Пусть

$$f_k = f(x_k, y_k), \quad y_k = y(x_k), \quad x_k = x_0 + k \cdot h.$$

Решаем уравнение $y'(x) = f(x, y)$, тогда:

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y) dx.$$

Проинтегрируем выражение (11.4) и получим:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx = \left(x \cdot f_k + \frac{(x - x_k)^2}{2} f(x_{k-1}, x_k) + \left(\frac{x^3}{3} - (x_k + x_{k+1}) \frac{x^2}{2} + x_k x_{k+1} x \right) f(x_{k-2}, x_{k-1}, x_k) + \dots \right) \Bigg|_{x_k}^{x_{k+1}}$$

1) Метод первого порядка (метод Эйлера):

$$y_{k+1} = y_k + h \cdot f_k.$$

2) Метод второго порядка:

$$y_{k+1} = y_k + h \cdot f_k + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{f_k - f_{k-1}}{h} = y_k + \frac{1}{2} h \cdot (3f_k - f_{k-1}).$$

3) Метод третьего порядка:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{12} h \cdot (23f_k - 16f_{k-1} + 5f_{k-2}).$$

Замечание. Все рассмотренные выше численные методы естественным образом обобщаются на многомерный случай (систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка).

Задача:

$$\begin{aligned} \vec{y}'(x) &= \vec{f}(x, \vec{y}), \\ \vec{y}(x_0) &= \vec{y}_0. \end{aligned}$$

где

$$\vec{y}(x) = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ \dots \\ y_n(x) \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(x, \vec{y}) = \begin{pmatrix} f_1(x, \vec{y}(x)) \\ \dots \\ f_n(x, \vec{y}(x)) \end{pmatrix}.$$

Пример (метод Эйлера):

$$\vec{y}_{k+1} = \vec{y}_k + h \cdot \vec{f}(x_k, \vec{y}_k).$$

11.4. Вопросы и задания к лекции

1. В чем суть методов численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений? В чем различие одношаговых и многошаговых методов?
2. Каким образом используется формула Тейлора для решения задачи Коши?
3. Опишите методы Рунге–Кутты.
4. Какова общая схема многошаговых методов решения задачи Коши?
5. В чем суть метода Адамса?
6. Чему равно значение y_1 , если задача Коши $y'(x) = x + y^2(x)$, $y(0) = 1$ решается численно с шагом $h = 0.1$
 - а) методом Эйлера,
 - б) методом предиктор-корректор?

Лекция 12. Численное решение краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и интегральных уравнений

Кроме задачи Коши, для ОДУ формулируются и другие виды задач, в частности с дополнительными краевыми условиями в нескольких точках. Для решения таких задач существуют специальные методы.

Численные методы решения краевых задач можно условно разделить на три группы. К первой группе обычно относят такие методы, когда решение краевой задачи сводится к решению нескольких задач Коши. Ко второй группе методов решения краевых задач относят метод конечных разностей. При этом дифференциальные операторы заменяются разностными (чаще всего, на равномерной сетке), и задача сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. В третьей – искомое решение приближается представлением в некотором базисе, при этом относительно коэффициентов представления возникает система уравнений, чаще всего линейных, требующая численного решения.

Рассмотрим методы решения краевой задачи вида:

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x)), \quad (12.1)$$

$$y(0) = A, \quad y(l) = B. \quad (12.2)$$

12.1. Метод стрельб

Баллистический метод или метод стрельб (пристрелки) применяется для решения краевых задач с краевыми условиями, поставленными на концах промежутка, на котором ищется решение задачи. Метод стрельб основан на том, чтобы свести решение краевой задачи к задаче Коши, для решения которой существуют надежные численные методы. Существует несколько разновидностей баллистического подхода. Здесь будет рассмотрено решение краевой задачи к сведению решения системы двух дифференциальных уравнений первого порядка.

Преобразуем уравнение (12.1) в систему ОДУ первого порядка:

$$\begin{cases} y'(x) = z(x), \\ z'(x) = f(x, y(x), z(x)), \end{cases} \quad (12.3)$$

для решения представленной системы необходимы два начальных условия. Первое начальное условие для системы уравнений (12.3) задано в постановке уравнения (12.1–12.2). Второе условие должно быть задано для функции $z(x)$ в координате $x = 0$. То есть:

$$y(0) = A, \quad z(0) = ? \quad (12.4)$$

Таким образом, задача (12.3–12.4) есть задача Коши для системы двух дифференциальных уравнений первого порядка. Решением данной задачи

называется пара непрерывных и дифференцируемых на отрезке $[0, l]$ функций $y(x)$ и $z(x)$, удовлетворяющих уравнениям (12.3) и краевым условиям (12.4). Предполагается, что точное решение краевой задачи существует и единственно. Требуется найти приближенное решение этой задачи с погрешностью, не превышающей заданного положительного числа.

Идея решения заключается в следующем: пусть $z(0) = \alpha_k$ и построим последовательность α_k таким образом, чтобы $\lim_{k \rightarrow \infty} y(l; \alpha_k) \rightarrow B$. При выборе нового очередного α_k анализируется, как при $z(0) = \alpha_k$ меняется значение $y(l)$. По результатам анализа определяется новая величина параметра α_k , например методом половинного деления на отрезке $[\alpha_{k-1}, \alpha_k]$ (таким образом, чтобы выполнялись условия $y(l; \alpha_{k-1}) > B$, $y(l; \alpha_k) < B$) и повторяется расчет. При этом на каждом шаге приходится решать задачу (12.3)–(12.4) для определения значения $y(l; \alpha_k)$ до тех пор, пока не выполнится условие $|y(l; \alpha_k) - B| < \varepsilon$, где ε – заданная точность решения задачи.

Рассмотрим линейный случай краевой задачи (12.1)–(12.2):

$$y''(x) + a(x)y'(x) - b(x)y(x) = f(x), \quad b(x) \geq 0, \quad (12.5)$$

$$y(0) = A, \quad y(1) = B. \quad (12.6)$$

Преобразуем задачу (12.5)–(12.6) к виду (12.3)–(12.4):

$$\begin{cases} y'(x) = z(x), \\ z'(x) = -a(x)z(x) + b(x)y(x) + f(x), \\ y(0) = A, \quad z(0) = \alpha. \end{cases} \quad (12.7)$$

Зададим α_0, α_1 и, решая задачу (12.3), вычислим:

$$B_0 = y(1; \alpha_0), \quad B_1 = y(1; \alpha_1).$$

Будем искать решение задачи (12.5)–(12.6) в виде:

$$y(x) = C_0 y(x; \alpha_0) + C_1 y(x; \alpha_1).$$

Для определения значения коэффициентов C_0 и C_1 воспользуемся краевыми условиями (12.6), откуда получим:

$$y(0) = C_0 y(0; \alpha_0) + C_1 y(0; \alpha_1) = C_0 A + C_1 A = A,$$

$$y(1) = C_0 y(1; \alpha_0) + C_1 y(1; \alpha_1) = C_0 B_0 + C_1 B_1 = B.$$

Решив эту СЛАУ, получим:

$$C_0 = \frac{B - B_1}{B_0 - B_1}, \quad C_1 = 1 - C_0.$$

12.2. Конечно-разностная схема

Наиболее употребляемым численным методом решения краевых задач для дифференциальных уравнений является метод конечных разностей. Суть метода заключается в том, что область непрерывного изменения аргумента (например, отрезок) заменяется дискретным множеством точек, называемых *узлами*. Узлы образуют разностную сетку. Исходная функция от непрерывного аргумента приближенно заменяется функцией от дискретного аргумента на заданной сетке. Такая функция называется *сеточной*. Исходное дифференциальное уравнение заменяется разностным уравнением относительно сеточной функции. Для входящих в уравнение производных используются соответствующие конечно-разностные соотношения. Решением дифференциального уравнения являются значения сеточной функции в узлах сетки. Рассмотрим применение данного метода для краевой задачи (12.1)–(12.2) для $l = 1$.

Построим на отрезке $[0, 1]$ разностную сетку:
 $x_j = j \cdot h, j = 0, \dots, N, h = \frac{1}{N}$ и заменим производные их конечно-разностными аппроксимациями:

$$y''(x_j) = \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + O(h^2),$$

$$y'(x_j) = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + O(h^2).$$

Тогда решение задачи (12.1)–(12.2) сводится к решению системы нелинейных уравнений вида:

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} = f\left(x_j, y_j, \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h}\right), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (12.8)$$

$$y_0 = A, \quad y_N = B.$$

Систему (12.8) можно решать итерационными методами и, в частности, воспользоваться методом прогонки:

$$y_{j+1}^{(k+1)} - 2y_j^{(k+1)} + y_{j-1}^{(k+1)} = h^2 f\left(x_j, y_j^{(k)}, \frac{y_{j+1}^{(k)} - y_{j-1}^{(k)}}{2h}\right), \quad j = 1, \dots, N-1,$$

$$y_0^{(k+1)} = A, \quad y_N^{(k)} = B.$$

В этом случае нулевое приближение можно выбрать в виде линейной функции:

$$y_j^{(0)} = A(1 - x_j) + Bx_j, \quad j = 0, \dots, N.$$

Основная проблема – в общем случае может отсутствовать сходимость.

Рассмотрим линейный случай краевой задачи. Рассмотрим задачу (12.5)–(12.6). Заменяем в уравнении (12.5) производные их конечно-разностными аналогами:

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + a(x_j) \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} - b(x_j)y_j = f(x_j), \quad j = 1, \dots, N-1,$$

$$y_0 = A, \quad y_N = B.$$

Таким образом, мы получили СЛАУ с трехдиагональной матрицей. Учитывая свойства используемых конечно-разностных операторов, данная конечно-разностная схема имеет второй порядок аппроксимации. Приведем эту систему к виду удобному для применения алгоритма прогонки:

$$\left(1 - \frac{a(x_j)h}{2}\right)y_{j-1} - (2 + b(x_j)h^2)y_j + \left(1 + \frac{a(x_j)h}{2}\right)y_{j+1} = h^2 f(x_j), \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Сформулируем достаточное условие устойчивости прогонки, условие диагонального преобладания:

$$2 + b(x_j)h^2 \geq \left|1 - \frac{a(x_j)h}{2}\right| + \left|1 + \frac{a(x_j)h}{2}\right|, \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Откуда нетрудно получить условие устойчивости прогонки для полученной СЛАУ:

$$h \leq \frac{2}{\max |a(x_j)|}, \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Это ограничение можно снять, если использовать для аппроксимации первой производной не симметричные, а направленные разности:

$$y'(x_j) = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + O(h) = \frac{y_j - y_{j-1}}{h} + O(h).$$

Необходимо согласовывать «направленность» разности со знаком значения функции $a(x_j)$. Если это сделать указанным ниже способом, то получим СЛАУ с безусловным диагональным преобладанием:

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + \frac{a(x_j) + |a(x_j)|}{2} \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + \frac{a(x_j) - |a(x_j)|}{2} \frac{y_j - y_{j-1}}{h} - b(x_j)y_j = f(x_j), \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Нетрудно показать, что в этом случае условие диагонального преобладания выполняется при любом значении h , но порядок аппроксимации разностной схемы понизится до первого.

12.3. Метод конечных элементов

Метод конечных элементов пользуется огромной популярностью у исследователей для решения самых разных задач механики, техники, математической физики и других наук. Авторы отмечают близость конечно-разностных методов и методов конечных элементов. Однако существует характерное отличие между ними. В конечно-разностных методах аппроксимируются исходные уравнения и граничные условия, а в методе конечных элементов аппроксимируется само решение.

Рассмотрим решение краевой задачи (12.5)–(12.6) методом конечных элементов для частного случая:

$$y''(x) - y(x) = 0,$$

$$y(0) = 1, \quad y(1) = e.$$

Вместо этой задачи можно рассмотреть эквивалентную ей задачу о минимизации функционала вида:

$$J(y) = \int_0^1 (y^2(x) + y'^2(x)) dx.$$

Известно, что минимум функционала обеспечивает функция, которая является решением уравнений Эйлера:

$$J(y) = \int_0^1 F(x, y, y') dx, \quad -\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) + \frac{\partial F}{\partial y} = 0.$$

В нашем случае

$$F(x, y, y') = y^2 + y'^2,$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 2y, \quad \frac{\partial F}{\partial y'} = 2y',$$

$$-\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) + \frac{\partial F}{\partial y} = -2y'' + 2y = 0.$$

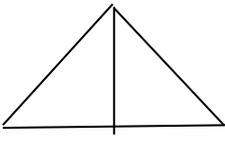
Вариационная постановка снижает требования к гладкости искомой функции, здесь уже не требуется дифференцируемости первой производной от искомой функции. Достаточно ее интегрируемости с квадратом:

$$y'(x) \in L_2[0,1].$$

Будем искать решение поставленной вариационной задачи в виде:

$$y(x) \cong \sum_j C_j \varphi_j(x).$$

Разобьем отрезок интегрирования разностной сеткой $x_j = jh$, $j = 0, \dots, N$, $h=1/N$. В качестве базиса возьмем финитные функции вида (базисные сплайны первого порядка):

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} \equiv 0, & x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \\ \tau, & \tau = (x - x_{j-1})/h, \quad x \in [x_{j-1}, x_j] \\ 1 - \tau, & \tau = (x - x_j)/h, \quad x \in [x_j, x_{j+1}] \end{cases}$$


Тогда

$$y(x) \cong y_j(1 - \tau) + y_{j+1}\tau = y_j + (y_{j+1} - y_j)\tau, \quad x \in [x_j, x_{j+1}]$$

$$y'(x) \cong \frac{y_{j+1} - y_j}{h},$$

$$\begin{aligned} \int_{x_j}^{x_{j+1}} (y^2(x) + y'^2(x)) dx &= h \int_0^1 \left((y_j + (y_{j+1} - y_j)\tau)^2 + \left(\frac{y_{j+1} - y_j}{h} \right)^2 \right) d\tau = \\ &= \frac{h}{3} (y_j^2 + y_j y_{j+1} + y_{j+1}^2) + \frac{(y_{j+1} - y_j)^2}{h}. \end{aligned}$$

Аналогично

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} (y^2(x) + y'^2(x)) dx = \frac{h}{3} (y_{j-1}^2 + y_{j-1} y_j + y_j^2) + \frac{(y_j - y_{j-1})^2}{h}.$$

Для нахождения экстремума приравняем к нулю производную:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} (y^2(x) + y'^2(x)) dx \right) = \frac{h}{3} (y_{j-1} + 2y_j) + \frac{2(y_j - y_{j-1})}{h} + \\ &+ \frac{h}{3} (2y_j + y_{j+1}) - \frac{2(y_{j+1} - y_j)}{h} = \frac{h}{3} (y_{j-1} + 4y_j + y_{j+1}) - \\ &- 2 \frac{y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}}{h}. \end{aligned}$$

Поделив это уравнение на $2h$, окончательно получим:

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} - \frac{1}{6} (y_{j-1} + 4y_j + y_{j+1}) = 0.$$

Отметим, что конечно-разностная схема рассматриваемого частного случая имеет вид:

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} - y_j = 0.$$

12.4. Интегральные уравнения

Интегральные уравнения – функциональные уравнения, которые содержат интегральное преобразование над искомой функцией. Применение интегральных уравнений позволяет получить эффективные математические описания многих прикладных задач физики, механики, теории управления и других наук. В некоторых случаях интегральные уравнения используют для понижения размерности задач, решения краевых задач. Также с помощью интегральных уравнений возможно получение устойчивых вычислительных процедур.

Общая формулировка интегрального уравнения имеет вид:

$$\int_a^b K(x,t,u(t))dt = F(x,u(x)),$$

$u(x)$ – неизвестная функция, $K(x,t,u(t))$ – ядро.

Например, задачу Коши

$$u'(x) = K(x,u(x)), \quad u(a) = u_0,$$

можно переписать в виде

$$u(x) = u_0 + \int_a^b \hat{K}(x,u(t))dt,$$

где

$$\hat{K}(x,u(x)) = \begin{cases} K(x,u(t)), & t \leq x, \\ 0, & t > x. \end{cases}$$

Рассмотрим методы решения интегральных уравнений на примере уравнения Фредгольма второго рода. Практические приложения интегральных уравнений Фредгольма второго рода весьма разнообразны (см., напр., [6, 2]): граничные задачи теории потенциала, граничные задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений, граничные задачи теории упругости и т.д.

Линейное уравнение Фредгольма II рода имеет вид:

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x,t)u(t)dt, \quad (12.8)$$

где

$$\int_a^b dx \int_a^b |K(x,t)|^2 dt < \infty,$$

$u(x)$ – неизвестная функция,

$K(x,t)$ – ядро интегрального уравнения,

$f(x)$ – свободный член (правая часть) интегрального уравнения,

λ – параметр интегрального уравнения.

На вопросы существования решения уравнения (12.8) отвечает классическая теория Фредгольма [6]. Она применима, в частности, для непрерывных в прямоугольнике $[a, b] \times [a, b]$ ядер. Будем считать, что $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, а решение уравнения будем искать в классе непрерывных на $[a, b]$ функций. Если однородное уравнение ($f(x) \equiv 0$) имеет только тривиальное решение, то значение параметра λ называется *правильным* или *регулярным*. Тогда у неоднородного уравнения при любой правой части $f(x)$ существует единственное решение. Далее будем считать это условие выполненным.

Рассмотрим два метода решения уравнения Фредгольма второго рода: метод вырожденного ядра и метод квадратур.

Метод вырожденного ядра заключается в том, что ядро интегрального уравнения заменяется на вырожденное. Ядро называется вырожденным, если его можно представить в виде:

$$K(x, t) = \sum_{j=1}^m \varphi_j(x) \psi_j(t).$$

Тогда уравнение (12.8) принимает вид:

$$u(x) = f(x) + \lambda \sum_{j=1}^m \varphi_j(x) \int_a^b \psi_j(t) u(t) dt. \quad (12.9)$$

Очевидно, что:

$$\int_a^b \psi_j(t) u(t) dt = C_j.$$

Умножим уравнение (12.9) на $\psi_k(x)$ и проинтегрируем по отрезку $[a, b]$, получим СЛАУ вида:

$$\int_a^b \psi_k(x) u(x) dx = C_k = \int_a^b \psi_k(x) f(x) dx + \lambda \sum_{j=1}^m C_j \int_a^b \psi_k(x) \varphi_j(x) dx. \quad (12.10)$$

Обозначим

$$A = (\alpha_{kj})_{\substack{k=1, \dots, m \\ j=1, \dots, m}}, \quad \vec{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T, \quad \vec{C} = (C_1, \dots, C_m)^T,$$

$$\alpha_{k,j} = \int_a^b \psi_k(x) \varphi_j(x) dx, \quad \beta_k = \int_a^b \psi_k(x) f(x) dx.$$

Тогда СЛАУ (12.10) примет вид:

$$(E - \lambda A)\vec{C} = \vec{\beta}.$$

Если $\det(E - \lambda A) = \vec{0}$, то λ – собственные значения ядра и возникает задача на собственные значения и собственные функции, в противном случае задача имеет единственное решение.

Пример 12.1.

$$u(x) = x + \int_{-1}^1 xtu(t)dt = x \left(1 + \int_{-1}^1 tu(t)dt \right),$$

Обозначим

$$C_1 = \int_{-1}^1 tu(t)dt.$$

Тогда $u(x) = (1 + C_1)x$. Подставим в предыдущий интеграл, получим:

$$C_1 = \int_{-1}^1 t(1 + C_1)t dt = (1 + C_1) \frac{t^3}{3} \Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}(1 + C_1)$$

Откуда $C_1 = 2$ и $u(x) = 3x$.

Метод квадратур заключается в построении для интегрального уравнения (12.8) квадратурной формулы вида:

$$\int_a^b K(x, t)u(t)dt = \sum_{k=0}^n A_k K(x, t_k)u(t_k) + R.$$

Тогда уравнение (12.8) примет вид:

$$u(x) = f(x) + \lambda \sum_{k=0}^n A_k K(x, t_k)u(t_k) + \lambda R.$$

Обозначим $u_k = u(x_k)$, $f_k = f(x_k)$, $\alpha_{ik} = A_k \cdot K(x_i, t_k)$.

Тогда, записав уравнение в точках x_i , получаем СЛАУ:

$$u_i - \lambda \sum_{k=0}^n \alpha_{ik} u_k = f_k, \quad i = 0, \dots, n,$$

решив которую найдем неизвестные u_k . После чего приближенное решение примет вид:

$$u(x) \approx f(x) + \lambda \sum_{k=0}^n A_k K(x, t_k)u_k.$$

Пример 12.2.

$$u(x) = x + \int_{-1}^1 xtu(t)dt = x \left(1 + \int_{-1}^1 tu(t)dt \right).$$

Для вычисления интеграла воспользуемся формулой Симпсона, обозначив $u_0 = u(-1)$, $u_1 = u(0)$, $u_2 = u(1)$:

$$\int_{-1}^1 tu(t)dt \approx \frac{2}{6}((-1) \cdot u_0 + 4 \cdot 0 \cdot u_1 + 1 \cdot u_2) = \frac{1}{3}(u_2 - u_0).$$

и

$$u(x) = x + \frac{x}{3}(u_2 - u_0).$$

Тогда

$$u_0 = u(-1) = -1 - \frac{1}{3}(u_2 - u_0),$$

$$u_2 = u(1) = 1 + \frac{1}{3}(u_2 - u_0).$$

Откуда $u_2 - u_0 = 6$, $u(x) = 3x$.

В этом случае погрешность формулы Симпсона нулевая и мы получили точное решение.

12.5. Вопросы и задания к лекции

1. В чем суть метода стрельбы?
2. Опишите метод конечных разностей для решения дифференциальных уравнений.
3. В чем суть метода конечных элементов?
4. Опишите методы решения интегральных уравнений на примере уравнения Фредгольма второго рода.
5. Решите интегральное уравнение Фредгольма II рода

$$u(x) = 1 + 4 \int_0^1 (2x + t)u(t)dt \quad \text{методом квадратур при использовании}$$

формулы трапеций с шагом равным длине отрезка интегрирования.

7. Решите краевую задачу $y''(x) - 8y(x) = 0$; $y(0) = 0$, $y(1) = 1$ конечно-разностным методом, где $\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} - 4y_j = 0$, $j = 1, \dots, N-1$; $h = \frac{1}{N}$.

Чему равно y_1 при $N = 2$?

Лекция 13. Метод конечных разностей для решения уравнений в частных производных

Известно, что дифференциальные уравнения в частных производных содержат более одной независимой переменной. Такими переменными могут быть, например, одновременно пространственные координаты и время (динамические задачи) или только пространственные координаты (статические задачи). В уравнениях производные от функций по любой из независимых переменных являются частными. Также такие уравнения могут содержать смешанные производные.

Уравнение в частных производных может быть представлено в виде:

$$F(x, y, \dots; u, u_x, u_y, \dots; u_{xx}, u_{yy}, u_{xy}, \dots) = 0,$$

где x, y, \dots – независимые переменные;

u – функция;

u_x, u_y, \dots – частные производные первого порядка;

u_{xx}, u_{yy}, u_{xy} – частные и смешанные производные второго порядка и т.д.

Предполагается, что все входящие в уравнение функции по умолчанию являются непрерывными и имеют непрерывные производные соответствующих порядков.

Любое дифференциальное уравнение в частных производных имеет бесконечное множество решений. На практике интерес представляют решения, удовлетворяющие дополнительным условиям. Различают начальные и граничные условия.

Среди численных методов решения уравнений с частными производными наиболее распространенным является метод конечных разностей. Суть метода заключается в том, что сначала область, на которой ищется решение, заменяется дискретным множеством точек (разностной сеткой). Как правило, используются регулярные сетки, шаг которых либо постоянен, либо меняется по несложному закону. Различают граничные и внутренние узлы. Узлы, находящиеся рядом, называют *соседними*. Кроме того, само уравнение и начальные и (или) граничные условия заменяются разностными аналогами.

Важный и наиболее изученный класс уравнений в частных производных – уравнения математической физики. Рассмотрим метод конечных разностей для решения уравнений в частных производных эллиптического, параболического и гиперболического типов.

Линейное уравнение в частных производных второго порядка в общем виде можно записать так:

$$L(u) = A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + G(x, y)u(x, y) = F(x, y).$$

Можно вместо второй пространственной переменной поставить переменную времени t .

Если функция $F(x, y) = 0$, то уравнение называется *однородным*, иначе – *неоднородным*.

Если $B^2 - 4AC < 0$, то данное уравнение относится к классу эллиптических уравнений, если $B^2 - 4AC > 0$, то это гиперболическое уравнение, если $B^2 - 4AC = 0$, то уравнение является параболическим. В случае, когда $B^2 - 4AC$ не имеет постоянного знака, это уравнение смешанного типа. Приведем некоторые классические уравнения.

13.1. Уравнения эллиптического типа

Классическими примерами уравнений в частных производных эллиптического типа являются уравнения Лапласа и Пуассона. Уравнение Лапласа является частным случаем уравнения Гельмгольца. Неоднородное уравнение Лапласа – уравнение Пуассона. К уравнению Лапласа приводят прикладные задачи физики и механики, в которых физическая величина является функцией только пространственных координат точки.

Уравнение Лапласа имеет вид:

$$\Delta u(\vec{x}) = \sum_{k=1}^m \frac{\partial^2 u(\vec{x})}{\partial x_k^2} = 0, \quad \vec{x} = (x_1, \dots, x_m). \quad (13.1)$$

Уравнение Пуассона имеет вид:

$$\Delta u(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m \frac{\partial^2 u(\vec{x})}{\partial x_j^2} = -f(\vec{x}), \quad (13.1')$$

где $f = F/k$ – плотность тепловых источников,
 $k = \text{const} > 0$ – коэффициент теплопроводности.

Для неоднородной среды имеем:

$$\text{div}(k \text{grad}(u)) = \sum_{j=1}^m \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k(\vec{x}) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = -F(\vec{x}), \quad (13.1'')$$

при наличии источников, стоков тепла пропорциональных температуре, имеем:

$$\text{div}(k \text{grad}(u)) - q(\vec{x})u = -F(\vec{x}), \quad (13.1''')$$

$q(\vec{x}) > 0$ – сток тепла, $q(\vec{x}) < 0$ – источник тепла

13.1.1. Краевые задачи для уравнений эллиптического типа

Пусть G – конечная область m -мерного пространства с границей Γ , требуется найти непрерывное в области $G + \Gamma$ решение уравнения (13.1) (или (13.1'), или (13.1''), или (13.1''')), удовлетворяющее на Γ одному из граничных условий при $\vec{x} \in \Gamma$:

а) $u(\vec{x}) = \mu_1(\vec{x})$ – первая краевая задача.

б) $k(\vec{x}) \frac{\partial u(\vec{x})}{\partial n} = \mu_2(\vec{x})$ – вторая краевая задача,

в) $k(\vec{x}) \frac{\partial u(\vec{x})}{\partial n} + \sigma(\vec{x})(u(\vec{x}) - \mu_3(\vec{x})) = 0$ – третья краевая задача.

Здесь $\frac{\partial}{\partial n}$ – производная по внешней нормали к Γ , а $\mu_1(\vec{x}), \mu_2(\vec{x}), \mu_3(\vec{x}), \sigma(\vec{x})$ – заданные функции, причем $\sigma(\vec{x}) \geq 0$. Вторая задача (задача Неймана) разрешима при выполнении условия:

$$\int_{\Gamma} \mu_2(\vec{x}) ds + \int_G F(\vec{x}) d\vec{x} = 0.$$

13.2. Уравнение параболического типа

Классическим примером уравнения параболического типа является уравнение теплопроводности (диффузии), которое имеет следующий вид:

$$c(t, \vec{x}) \frac{\partial u(t, \vec{x})}{\partial t} = \text{div}(k \text{ grad}(u(t, \vec{x}))) - q(\vec{x})u(t, \vec{x}) + F(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in G, t > 0, \quad (13.2)$$

где $c(t, \vec{x}) > 0$ – теплоемкость в единице объема.

При $t = 0$ задаются начальные условия

$$u(0, \vec{x}) = \varphi_0(\vec{x}), \quad \vec{x} \in G,$$

а границе G задаются краевые условия – соответствующие функции, зависящие от времени.

В зависимости от вида начальных и краевых условий, здесь также различают первую, вторую и третью начально-краевые задачи. На практике часто ставятся начально-краевые задачи теплопроводности со смешанными краевыми условиями, когда на границах задаются граничные условия различных родов.

13.3. Уравнение гиперболического типа

Уравнения с частными производными второго порядка гиперболического типа наиболее часто встречаются в физических задачах, связанных с

процессами колебаний. Классическим примером является волновое уравнение, имеющее вид:

$$\rho(t, \vec{x}) \frac{\partial u^2(t, \vec{x})}{\partial t^2} = \operatorname{div}(k \operatorname{grad}(u(t, \vec{x}))) + F(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in G, t > 0, \quad (13.3)$$

где $\rho(t, \vec{x}) > 0$.

При $t = 0$ задаются начальные условия:

$$u(0, \vec{x}) = \varphi_0(\vec{x}), \quad \frac{\partial u(0, \vec{x})}{\partial t} = \varphi_1(\vec{x}), \quad \vec{x} \in G.$$

Граничные условия также бывают первого, второго и третьего рода. В зависимости от условий рассматривают первую, вторую и третью краевые задачи. Кроме того, часто имеет место смешанная задача.

13.4. Конечно-разностные схемы для решения уравнения теплопроводности

Рассмотрим использование явной и неявной конечно-разностных схем для модельной одномерной задачи для уравнения теплопроводности следующего вида:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2} + f(t, x), \quad x \in (0, 1), \quad t \in (0, T] \quad (13.4)$$

$$\begin{aligned} u(t, 0) = A, \quad u(t, 1) = B, \\ u(0, x) = \varphi(x). \end{aligned} \quad (13.5)$$

Построим равномерную разностную сетку:

$$\begin{aligned} x_j = j \cdot h, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad h = 1/N; \\ t_n = n \cdot \tau, \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Значения разностного решения в узлах сетки будем обозначать $u_j^{(n)}$.

13.4.1. Явная конечно-разностная схема

Заменяем задачу (13.4)–(13.5) ее конечно-разностным аналогом:

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \chi \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2} + f(t_n, x_j), \\ j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (13.6)$$

$$u_0^{(n)} = A, \quad u_N^{(n)} = B, \quad (13.7)$$

$$u_j^{(0)} = \varphi(x_j), \quad j = 0, \dots, N. \quad (13.8)$$

Полученные уравнения называются *явной разностной схемой*, так как решение на новом временном шаге реализуется явно в виде расчета по формулам

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \tau \cdot \chi \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2} + \tau \cdot f(t_n, x_j), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, \dots \quad (13.9)$$

$$u_0^{(n+1)} = A, \quad u_N^{(n+1)} = B,$$

Аппроксимационные свойства разностных уравнений (13.9) определим с помощью разложений в ряд Тейлора:

$$u(t_{n+1}, x_j) = u(t_n + \tau, x_j) = u(t_n, x_j) + \tau \frac{\partial u(t_n, x_j)}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 u(t_n, x_j)}{\partial t^2} + \dots + O(\tau^3) \quad (13.10)$$

$$u(t_n, x_{j\pm 1}) = u(t_n, x_j \pm h) = u(t_n, x_j) \pm h \frac{\partial u(t_n, x_j)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u(t_n, x_j)}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u(t_n, x_j)}{\partial x^3} + O(h^4) \quad (13.11)$$

Отсюда нетрудно получить:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \frac{\partial u(t_n, x_j)}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 u(t_n, x_j)}{\partial t^2} + O(\tau^2) = \frac{\partial u(t_n, x_j)}{\partial t} + O(\tau), \quad (13.12)$$

$$\frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2} = \frac{\partial^2 u(t_n, x_j)}{\partial x^2} + O(h^2). \quad (13.13)$$

Таким образом, разностная схема (13.6) аппроксимирует исходное уравнение с первым порядком по времени и со вторым по пространству $O(\tau, h^2)$.

13.4.2. Неявная конечно-разностная схема

Наряду с явной схемой (13.6) рассмотрим неявную:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \chi \frac{u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)}}{h^2} + f(t_{n+1}, x_j), \quad (13.14)$$

$$j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, \dots$$

В этом случае, для того чтобы найти разностное решение на временном слое номера $(n+1)$ требуется решить СЛАУ с трехдиагональной матрицей, имеющей диагональное преобладание:

$$-d \cdot u_{j+1}^{(n+1)} + (1 + 2d)u_j^{(n+1)} - d \cdot u_{j-1}^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \tau \cdot f(t_{n+1}, x_j), \quad (13.15)$$

$$d = \frac{\tau \chi}{h^2}, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, \dots$$

Используя разложения (13.10)–(13.11), нетрудно показать, что разностная схема (13.14) также имеет аппроксимацию $O(\tau, h^2)$.

13.4.3. Двухслойная неявная схема с весами (схема Кранка–Николсона)

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = s \left(\chi \frac{u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)}}{h^2} + f(t_{n+1}, x_j) \right) + (1-s) \left(\chi \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2} + f(t_n, x_j) \right), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad n = 0, 1, \dots \quad (13.16)$$

Используя разложения типа (13.10)–(13.11) у точки $t_{n+1/2}$ можно показать, что разностная схема (13.14) при $s = 1/2$ имеет аппроксимацию $O(\tau^2, h^2)$. В этом случае для получения разностного решения также придется воспользоваться алгоритмом прогонки.

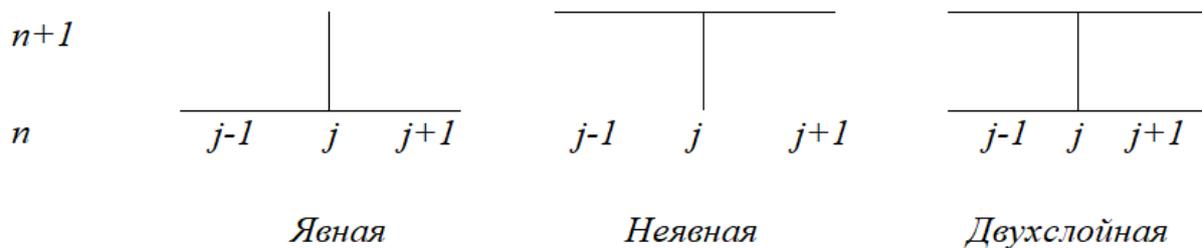


Рис. 13.1. Разностный шаблон

Особенности рассмотренных разностных схем можно проиллюстрировать с помощью разностного шаблона (см. рис.13.1).

13.4.4. Устойчивость решения

Для получения разностного решения недостаточно аппроксимировать исходную задачу, требуется еще и обеспечить устойчивость вычислительного алгоритма. Исследовать устойчивость явной схемы будем на модельном однородном уравнении:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \chi \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2}. \quad (13.17)$$

Алгебраический метод. Преобразуем разностное уравнение (13.17) к виду

$$\begin{aligned} u_j^{(n+1)} &= u_j^{(n)} + d(u_{j-1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j+1}^{(n)}) = \\ &= a_0 u_j^{(n)} + a_1 u_{j-1}^{(n)} + a_2 u_{j+1}^{(n)}, \end{aligned} \quad (13.17')$$

$$a_0 = 1 - 2d, \quad a_1 = d, \quad a_2 = d, \quad \text{где } d = \frac{\tau\chi}{h^2} > 0.$$

Тогда условие устойчивости: $a_k \geq 0$, $k = 0, 1, 2$. Из условия $a_0 \geq 0$ получаем:

$$\tau \leq \frac{h^2}{2\chi}. \quad (13.18)$$

Метод тестов. Рассмотрим тестовую задачу:

$$u_j^{(0)} = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ 1, & j = k. \end{cases}$$

Используя разностную схему (13.17') вычислим $u_j^{(1)}$. Очевидно:

$$\begin{aligned} u_j^{(1)} &= 0, \quad j \neq k-1, k, k+1, \\ u_{k-1}^{(1)} &= d, \quad u_k^{(1)} = 1 - 2d, \quad u_{k+1}^{(1)} = d. \end{aligned}$$

Из физических соображений следует $u_k^{(1)} > u_{k\pm 1}^{(1)}$, откуда получаем ограничение $1 - 2d > d$ и $d < 1/3$. Тогда условие (13.18) примет вид:

$$\tau \leq \frac{h^2}{3\chi}. \quad (13.18')$$

Устойчивость к возмущениям специального вида – спектральный признак Фурье–Неймана.

Будем рассматривать возмущения вида:

$$u_j^{(n)} = \lambda^n e^{i\alpha j} = \lambda^n (\cos(\alpha j) + i \cdot \sin(\alpha j)), \quad (13.19)$$

$$\alpha \in [0, 2\pi].$$

В случае устойчивости возмущения не должны возрастать со временем, отсюда следует условие:

$$|\lambda| \leq 1 \text{ или } -1 \leq \lambda \leq 1.$$

Подставим возмущения вида (13.19) в явную разностную (13.17), записанную в форме (13.17'), получим:

$$\begin{aligned}\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} &= \lambda^n e^{i\alpha j} + d(\lambda^n e^{i\alpha(j-1)} - 2\lambda^n e^{i\alpha j} + \lambda^n e^{i\alpha(j+1)}) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 + d(e^{-i\alpha} - 2 + e^{i\alpha})) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 + d(\cos(\alpha) - i \cdot \sin(\alpha) - 2 + \cos(\alpha) + i \cdot \sin(\alpha))) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 - 2d(1 - \cos(\alpha))).\end{aligned}$$

Поделив полученное равенство на $\lambda^n e^{i\alpha j}$, получим:

$$\lambda = 1 - 2d(1 - \cos(\alpha)).$$

Поскольку $0 \leq 1 - \cos(\alpha) \leq 2$, правая часть неравенства из условия устойчивости выполняется автоматически, а из неравенства $-1 \leq 1 - 2d(1 - \cos(\alpha))$ мы окончательно получаем:

$$d \leq \frac{1}{2} \Rightarrow \tau \leq \frac{h^2}{2\chi},$$

что соответствует условию (13.18).

Таким образом, все критерии показали нам, что явная схема является **условно устойчивой**.

Аналогично исследуем у стойчивость неявной схемы:

$$\begin{aligned}\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} &= \lambda^n e^{i\alpha j} + d(\lambda^{n+1} e^{i\alpha(j-1)} - 2\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} + \lambda^{n+1} e^{i\alpha(j+1)}) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 + \lambda d(e^{-i\alpha} - 2 + e^{i\alpha})) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 + \lambda d(\cos(\alpha) - i \cdot \sin(\alpha) - 2 + \cos(\alpha) + i \cdot \sin(\alpha))) = \\ &= \lambda^n e^{i\alpha j} (1 - 2\lambda d(1 - \cos(\alpha))).\end{aligned}$$

Откуда получаем:

$$\lambda = \frac{1}{1 + 2d(1 - \cos(\alpha))}.$$

Очевидно, в этом случае условие $|\lambda| \leq 1$ выполняется при любом значении параметра α , значит неявная схема является **абсолютно устойчивой**.

Таким же образом, для двухслойной схемы с весами (13.16) можно показать, что она является абсолютно устойчивой при $\frac{1}{2} \leq s \leq 1$.

Основная теорема теории разностных схем (А. А. Самарский, 1919–2008 гг.). Если конечно-разностная схема аппроксимирует исходную задачу и устойчива, то разностное решение сходится к точному со скоростью, соответствующей порядку аппроксимации.

13.4.5. Консервативные разностные схемы

Рассмотрим одномерное уравнение теплопроводности с переменными коэффициентами:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \right) - q(x)u(t, x) + f(t, x). \quad (13.20)$$

В этом случае не имеет смысла и с точки зрения вычислений просто неправильно «раскрывать» дифференциальный оператор и переписывать уравнение (13.20) в виде

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \frac{dk(x)}{dx} \frac{du(t, x)}{\partial x} + k(x) \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2} - q(x)u(t, x) + f(t, x).$$

Для разностной аппроксимации уравнения (13.20) воспользуемся *интегро-интерполяционным методом (методом контрольного объема)* и проинтегрируем это уравнение по переменной x по отрезку

$$\left[x_j - \frac{h}{2}, x_j + \frac{h}{2} \right] = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]:$$

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} dx = k(x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \Big|_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} - \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (q(x)u(t, x) - f(t, x)) dx. \quad (13.21)$$

Нетрудно показать, что в середине отрезков дискретизации:

$$\frac{u(t, x_j) - u(t, x_{j-1})}{h} = \frac{\partial u(t, x_{j-1/2})}{\partial x} + O(h^2),$$

$$\frac{u(t, x_{j+1}) - u(t, x_j)}{h} = \frac{\partial u(t, x_{j+1/2})}{\partial x} + O(h^2).$$

Подставим эти аппроксимации в выражение (13.21), где также заменим интегралы по формуле средних прямоугольников:

$$h \frac{\partial u(t, x_j)}{\partial t} = k(x_{j+1/2}) \frac{u(t, x_{j+1}) - u(t, x_j)}{h} - k(x_{j-1/2}) \frac{u(t, x_j) - u(t, x_{j-1})}{h} - hq(x_j)u(t, x_j) + hf(t, x_j), \quad j = 1, N-1. \quad (13.22)$$

Поделив эти выражения на h и используя соответствующую аппроксимацию по времени, получим явную

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \frac{1}{h} \left(k_{j+1/2} \frac{u_{j+1}^{(n)} - u_j^{(n)}}{h} - k_{j-1/2} \frac{u_j^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{h} \right) - q_j u_j^{(n)} + f(t_n, x_j),$$

$$j = \overline{1, N-1}.$$

или неявную схему

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \frac{1}{h} \left(k_{j+1/2} \frac{u_{j+1}^{(n)} - u_j^{(n)}}{h} - k_{j-1/2} \frac{u_j^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{h} \right) - q_j u_j^{(n+1)} + f(t_{n+1}, x_j),$$

$$j = \overline{1, N-1}.$$

имеющие порядок аппроксимации $O(\tau, h^2)$. При этом явная схема условно устойчива:

$$\tau \leq \frac{h^2}{2k_M}, \quad k_M = \max_{j=1, \dots, N-1} k(x_{j+1/2}),$$

а неявная – абсолютно устойчива.

13.5. Многомерный случай

13.5.1. Первая краевая задача для двумерного случая

В качестве примера рассмотрим первую краевую задачу для двумерного случая:

$$\frac{\partial u(t, x, y)}{\partial t} = \chi \left(\frac{\partial^2 u(t, x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(t, x, y)}{\partial y^2} \right) + f(t, x, y),$$

$$x \in [0, 1], \quad y \in [0, H], \tag{13.24}$$

$$u(t, 0, y) = A_0(t, y), \quad u(t, 1, y) = A_1(t, y),$$

$$u(t, x, 0) = B_0(t, x), \quad u(t, x, H) = B_1(t, x).$$

Рассмотрим прямоугольную равномерную разностную сетку с точками

$$(x_j, y_l), \quad x_j = j \cdot h_x, \quad h_x = \frac{1}{N_x}, \quad y_l = l \cdot h_y, \quad h_y = \frac{H}{N_y}.$$

Значения искомого решения в узлах разностной сетки будем обозначать как $u_{j,l}^{(n)} = u(t_n, x_j, y_l)$.

Тогда явная разностная схема имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,l}^{(n+1)} - u_{j,l}^{(n)}}{\tau} &= \chi \left(\frac{u_{j+1,l}^{(n)} - 2u_{j,l}^{(n)} + u_{j-1,l}^{(n)}}{h_x^2} + \frac{u_{j,l+1}^{(n)} - 2u_{j,l}^{(n)} + u_{j,l-1}^{(n)}}{h_y^2} \right) + \\ &+ f(t_n, x_j, y_l), \quad j=1, \dots, N_x - 1, \quad l=1, \dots, N_y - 1, \\ u_{0,l}^{(n)} &= A_0(t_n, y_l), \quad u_{N_x,l}^{(n)} = A_1(t_n, y_l), \quad l=0, \dots, N_y, \\ u_{j,0}^{(n)} &= B_0(t_n, x_j), \quad u_{j,N_y}^{(n)} = B_1(t_n, x_j), \quad j=0, \dots, N_x. \end{aligned} \quad (13.25)$$

В этом случае аппроксимация схемы

$$O(\tau, h_x^2, h_y^2),$$

а условие устойчивости

$$\tau \leq \frac{h_x h_y}{4\chi}.$$

Использование неявной схемы затруднено сложностями решения, возникающими при этом СЛАУ. Однако, применение идеи «расщепления по пространственным координатам» позволяет весьма эффективно решить эту задачу, сведя к последовательности решения одномерных задач. Один из вариантов такого «расщепления» – метод продольно-поперечной прогонки (ППП):

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,l}^{(n+1/2)} - u_{j,l}^{(n)}}{\tau} &= \chi \left(\frac{u_{j+1,l}^{(n+1/2)} - 2u_{j,l}^{(n+1/2)} + u_{j-1,l}^{(n+1/2)}}{h_x^2} + \frac{u_{j,l+1}^{(n)} - 2u_{j,l}^{(n)} + u_{j,l-1}^{(n)}}{h_y^2} \right) + \\ &+ f(t_{n+1/2}, x_j, y_l), \quad j=1, \dots, N_x - 1, \quad l=1, \dots, N_y - 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{0,l}^{(n+1/2)} &= A_0(t_{n+1/2}, y_l), \quad u_{N_x,l}^{(n+1/2)} = A_1(t_{n+1/2}, y_l), \quad l=0, \dots, N_y, \\ u_{j,0}^{(n)} &= B_0(t_n, x_j), \quad u_{j,N_y}^{(n)} = B_1(t_n, x_j), \quad j=0, \dots, N_x; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,l}^{(n+1)} - u_{j,l}^{(n+1/2)}}{\tau} &= \chi \left(\frac{u_{j+1,l}^{(n+1/2)} - 2u_{j,l}^{(n+1/2)} + u_{j-1,l}^{(n+1/2)}}{h_x^2} + \frac{u_{j,l+1}^{(n+1)} - 2u_{j,l}^{(n+1)} + u_{j,l-1}^{(n+1)}}{h_y^2} \right) + \\ &+ f(t_{n+1}, x_j, y_l), \quad j=1, \dots, N_x - 1, \quad l=1, \dots, N_y - 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{0,l}^{(n+1)} &= A_0(t_{n+1}, y_l), \quad u_{N_x,l}^{(n+1)} = A_1(t_{n+1}, y_l), \quad l=0, \dots, N_y, \\ u_{j,0}^{(n+1/2)} &= B_0(t_{n+1/2}, x_j), \quad u_{j,N_y}^{(n+1/2)} = B_1(t_{n+1/2}, x_j), \quad j=0, \dots, N_x. \end{aligned}$$

В этой схеме на первом этапе задача решается методом прогонки «вдоль» переменной x , а на втором – y . Можно показать, что данная схема абсолютно устойчива и имеет аппроксимацию $O(\tau^2, h_x^2, h_y^2)$.

13.5.2. Уравнения эллиптического типа

Разностное решение уравнений эллиптического типа (уравнения Пуассона) рассмотрим в двумерном случае и квадратной области. Пусть дана первая краевая задача:

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y), \quad x \in (0,1), y \in (0,1),$$

$$u(x,0) = A_0(x), u(x,1) = A_1(x),$$

$$u(0, y) = B_0(y), u(1, y) = B_1(y).$$

Построим в расчетной области разностную сетку с квадратной ячейкой $N_x = N_y = N$, $h_x = h_y = h = 1/N$ и воспользуемся аппроксимацией вторых производных симметричными разностями:

$$\frac{u_{j+1,l} - 2u_{j,l} + u_{j-1,l}}{h^2} + \frac{u_{j,l+1} - 2u_{j,l} + u_{j,l-1}}{h^2} = f(x_j, y_l), \quad (13.26)$$

$$j, l = 1, \dots, N-1,$$

$$u_{j,0} = A_0(x_j), \quad u_{j,N} = A_1(x_j), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (13.27)$$

$$u_{0,l} = B_0(y_l), \quad u_{N,j} = B_1(y_l), \quad l = 1, \dots, N-1.$$

Получилась СЛАУ с $(N+1)^2$ неизвестными, имеющая сильно разреженную матрицу. Решение её прямым методом типа LU -разложения весьма затратное и требует $O(N^6)$ операций. Учитывая специфическую структуру матрицы, разработаны специальные прямые методы, позволяющие решать эту задачу более эффективно. К ним можно отнести, например, быстрое преобразование Фурье (БПФ) и метод циклической редукции дающие затраты $O(N^2 \log_2 N)$. К сожалению, эти методы применимы только в областях канонической формы (квадрат, прямоугольник). В областях произвольной формы чаще всего используются *итерационные методы*. Рассмотрим некоторые из них.

Методы Либмана, Зейделя и ПВР. В разностном уравнении (13.26) выразим значения в центральной точке разностного шаблона через остальные и

воспользуемся методом простой итерации (в данном случае это метод Либмана):

$$u_{j,l}^{(k+1)} = \frac{1}{4} \left(u_{j+1,l}^{(k)} + u_{j-1,l}^{(k)} + u_{j,l+1}^{(k)} + u_{j,l-1}^{(k)} - h^2 f(x_j, y_l) \right),$$

$$j, l = 1, \dots, N - 1.$$

Также можно воспользоваться методом Зейделя, который при обходе расчетной области «слева–направо» и «снизу–вверх» примет вид:

$$u_{j,l}^{(k+1)} = \frac{1}{4} \left(u_{j+1,l}^{(k)} + u_{j-1,l}^{(k+1)} + u_{j,l+1}^{(k)} + u_{j,l-1}^{(k+1)} - h^2 f(x_j, y_l) \right),$$

$$j, l = 1, \dots, N - 1.$$

Скорость сходимости этих методов $O\left(\frac{1}{h^2}\right) = O(N^2)$, тогда, учитывая, что число расчетных точек N^2 , получаем затраты $O(N^4)$ операций.

Метод ПВР имеет вид:

$$u_{j,l}^{(k+1)} = (1 - \omega) u_{j,l}^{(k)} + \omega \cdot u_{j,l, \text{Зейдель}}^{(k+1)}, \quad j, l = 1, \dots, N - 1.$$

Его применение дает возможность увеличить скорость сходимости до величины $O\left(\frac{1}{h}\right) = O(N)$. Таким образом, затраты составят $O(N^3)$ операций.

При этом вычисление оптимального значения параметра ω для случая прямоугольной сетки происходит по известным формулам.

Метод установления. В тех случаях, когда граничные условия для параболических уравнений не зависят от времени, решение этих уравнений стремится к стационарному, не зависящему от времени, и тогда параболические уравнения переходят в эллиптические:

$$\Delta u - f = \frac{\partial u}{\partial t} \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta u - f = 0,$$

для решения которых можно воспользоваться методами, рассмотренными нами ранее, для уравнений параболического типа.

Так, в рассмотренном нами случае, явная разностная схема при значении шага по времени $\tau = \frac{h^2}{4}$ переходит в метод Либмана. При этом преимущество здесь получают именно абсолютно устойчивые неявные схемы, позволяющие считать с произвольным шагом по времени.

13.6. Уравнение переноса

Рассмотрим простейший одномерный вариант уравнения гиперболического типа, называемый *уравнением акустики*:

$$\frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2}. \quad (13.28)$$

Данное уравнение описывает распространение звуковых волн в однородной среде, здесь c – скорость звука. Введем в рассмотрение вспомогательную функцию $w(t, x)$, и запишем систему уравнений первого порядка вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} &= c \frac{\partial w(t, x)}{\partial x}, \\ \frac{\partial w(t, x)}{\partial t} &= c \frac{\partial u(t, x)}{\partial x}. \end{aligned}$$

Нетрудно показать, что в случае достаточно гладкой функции $w(t, x)$ эта система эквивалентна уравнению (13.28). Для этого продифференцируем первое из этих уравнений по времени:

$$\frac{\partial u^2(t, x)}{\partial t^2} = c \frac{\partial w^2(t, x)}{\partial t \partial x} = c \frac{\partial w^2(t, x)}{\partial x \partial t} = c \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial w(t, x)}{\partial t} \right) = c \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \right) = c^2 \frac{\partial u^2(t, x)}{\partial x^2}.$$

Исходя из этих соображений, при рассмотрении соответствующих разностных схем очень часто в качестве модели используют так называемое *уравнение переноса*, для которого поставим начально-краевую задачу:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + a(x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} &= 0, \quad a(x) > 0, \quad x > 0, t > 0; \\ u(0, x) &= \varphi(x), \quad u(t, 0) = \mu(t). \end{aligned} \quad (13.29)$$

Соответствующая явная схема, использующая симметричные разности для аппроксимации пространственной производной, имеет вид:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} + a(x_j) \frac{u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{2h} = 0.$$

Нетрудно показать, что данная схема имеет аппроксимацию $O(\tau, h^2)$.

Исследуем устойчивость этой схемы в случае $a(x) = \text{const}$, $c = \frac{\tau \cdot a}{h}$.

Перепишем ее в виде

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} - \frac{c}{2} (u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}) = u_j^{(n)} - \frac{c}{2} u_{j+1}^{(n)} + \frac{c}{2} u_{j-1}^{(n)}$$

и воспользуемся алгебраическим методом определения устойчивости. Очевидно, что соответствующее условие не выполняется ни при каком значении параметра c (называемым числом Куранта). Значит, эта разностная схема *абсолютно неустойчива*.

В свою очередь схема с направленными разностями, имеющая аппроксимацию $O(\tau, h)$,

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} + a(x_j) \frac{u_j^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{h} = 0$$

или

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} - c(u_j^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}) = (1-c)u_j^{(n)} + c \cdot u_{j-1}^{(n)}$$

условно устойчива при $c \leq 1$, $\tau \leq \frac{h}{a}$.

Для неявной схемы с симметричными разностями с аппроксимацией $O(\tau, h^2)$:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} + a(x_j) \frac{u_{j+1}^{(n+1)} - u_{j-1}^{(n+1)}}{2h} = 0$$

условие устойчивости определим с помощью спектрального метода Фурье–Неймана. Подставив стандартное возмущение специального вида и выполнив необходимые преобразования, получим:

$$\lambda^{n+1} e^{i\alpha j} = \lambda^n e^{i\alpha j} - \frac{c}{2} \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) = \lambda^n e^{i\alpha j} - c \lambda^{n+1} e^{i\alpha j} \cdot i \sin(\alpha)$$

Откуда:

$$\lambda = \frac{1}{1 + ic \sin(\alpha)} = \frac{1 - ic \sin(\alpha)}{1 + c^2 \sin^2(\alpha)} = \frac{1}{1 + c^2 \sin^2(\alpha)} - i \frac{c \sin(\alpha)}{1 + c^2 \sin^2(\alpha)}$$

и

$$|\lambda|^2 = \frac{1 + c^2 \sin^2(\alpha)}{(1 + c^2 \sin^2(\alpha))^2} = \frac{1}{1 + c^2 \sin^2(\alpha)} \leq 1.$$

Таким образом, данная схема *абсолютно устойчива*.

Но если мы приведем разностное уравнение к виду, удобному для применения метода прогонки:

$$-\frac{\tau \cdot a(x_j)}{2h} u_{j-1}^{(n+1)} + u_j^{(n+1)} + \frac{\tau \cdot a(x_j)}{2h} u_{j+1}^{(n+1)} = u_j^{(n)},$$

то нетрудно убедиться, что условие устойчивости прогонки (диагональное преобладание) имеет вид $c \leq 1$.

13.7. Вопросы и задания к лекции

1. В чем суть метода конечных разностей для решения уравнений в частных производных?
2. Опишите конечно-разностную схему для решения уравнения параболического типа на примере уравнения теплопроводности.
3. В чем смысл основной теоремы теории разностных схем?
4. Опишите методы решения уравнений эллиптического типа для двумерного случая.
5. Выведите условие устойчивости конечно-разностной схемы

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t} + c \cdot \frac{u_j^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{2h} = 0$$

для уравнения переноса $\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad c > 0.$

13.8. Лабораторная работа № 7 на тему «Численное решение краевых задач для ОДУ. Численное решение уравнения теплопроводности»

Задача 1. Дана краевая задача вида:

$$Y''(x) + A(x)Y'(x) - B(x)Y(x) + C(x) \cdot \sin(Y(x)) = F(x), \quad B(x) \geq 0, \quad (13.8.1)$$

$$Y(0) = 1, \quad Y(1) = 2. \quad (13.8.2)$$

Решите задачу (13.8.1)–(13.8.2) методом стрельб, используя метод Рунге-Кутты 4-го порядка точности с автоматическим выбором шага ($\varepsilon_1 = 10^{-5}$), обеспечив выполнение граничного условия при $x = 1$ с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$.

Указания по выполнению задачи 1. При отладке необходимо использовать метод пробных функций, задавая правую часть уравнения (13.8.1) в виде

$$F(x) = Y_{np}''(x) + A(x)Y_{np}'(x) - B(x)Y_{np}(x) + C(x) \sin(Y_{np}(x)),$$

где

$Y_{np}(x) = 1 + x + 10 \cdot \ln(\text{Variant} + 1) \cdot x^3 \cdot (1 - x)^3$, *Variant* – номер варианта задания.

Начинать вычисления с шага $h = 0.1$; на каждой итерации выдавать ее номер, полученное значение $Y(1)$ и максимальную погрешность численного решения. После завершения расчетов выдать полученный результат в виде таблицы (x , численное решение, точное решение, погрешность). Кроме того, выдать максимальную по модулю погрешность.

Задача 2. Для уравнения теплопроводности дана начально-краевая задача:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2} + f(t, x), \quad x \in (0, 1), \quad t \in (0, 1] \quad (13.8.3)$$

$$\begin{aligned} u(t, 0) &= 0, \quad u(t, 1) = 1, \\ u(0, x) &= x. \end{aligned} \quad (13.8.4)$$

Значение коэффициента теплопроводности:

- a) $\chi = 0.1$
- b) $\chi = 0.2$

Решите задачу (13.8.3)–(13.8.4) методом конечных разностей на равномерной разностной сетке $x_j = jh$, $h = 1/N$, используя при этом явную разностную схему:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \chi \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{h^2} + f(t_n, x_j), \quad j = 1, \dots, N-1;$$

и неявную разностную схему:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\tau} = \chi \frac{u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)}}{h^2} + f(t_n, x_j), \quad j = 1, \dots, N-1;$$

для реализации которой необходимо воспользоваться алгоритмом прогонки.

Указания по выполнению задачи 2. Функцию $f(t, x)$ необходимо выбирать таким образом, чтобы точным решением задачи (13.8.3)–(13.8.4) явилась функция:

$$u(t, x) = x + 0.1 \cdot t \cdot \sin(\pi x) \cdot \text{Variant}.$$

Провести расчеты на трех сетках при $N = 8, 16, 32$, использовать шаг по времени

$$\tau = \frac{h^2}{4\chi} \text{ для явной схемы и } \tau = h \text{ для неявной.}$$

В процессе вычислений для каждого момента времени выдавать значение

$$\delta_n = \max_{j=0, \dots, N} |u(t_n, x_j) - u_j^{(n)}|.$$

В конечный момент времени t_m , $m = 1/\tau$ выдавать значения u_j^m , $j = 0, \dots, N$ и максимальное значение из погрешностей δ_n , $n = 1, \dots, m$. Провести анализ результатов, полученных для различных значений шага по пространству.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы: 6-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 636 с.: ил.
2. *Верлань А. Ф., Сизиков В. С.* Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев.: Наукова думка, 1986. 544 с.
3. *Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З.* Численные методы анализа. М.: Наука, 1967. 368 с.
4. *Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л.* Методы сплайн-функций. М.: Изд-во «Наука». Главная редакция физико-математической литературы, 1980. – 352 с.
5. *Калашиников А. Л.* Методы приближённого решения интегральных уравнений второго рода: учеб.-метод. пособие. Н. Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. 52 с.
6. *Михлин С. Г.* Лекции по линейным интегральным уравнениям. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959. 232 с.
7. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Численные методы: учеб. пособие для вузов. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989. 432 с.
8. *Тихонов А. Н., Васильева А. Б., Свешников А. Г.* Дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1985.
9. *Трубников С. В.* Численные методы: учеб.-метод. пособие. Брянск: БГТУ, 2008. 81с.
10. *Тынкевич М. А., Пимонов А. Г.* Введение в численный анализ: учеб. пособие. Кемерово: КузГТУ, 2017. 176 с.

Учебное издание

Русаков Сергей Владимирович
Бузмакова Мария Михайловна

Численные методы.
Курс лекций: часть 2

Учебное пособие

Редактор *Е. В. Шумилова*
Корректор *Е. В. Пирожкова*
Компьютерная вёрстка: *М. М. Бузмакова*

Подписано в печать 17.1.2020. Формат 60×84/16.
Усл. печ. л. 6,51. Тираж 100 экз. Заказ ____

Издательский центр
Пермского государственного
национального исследовательского университета.
614990 г. Пермь, ул. Букирева, 15

Отпечатано на ризографе
ООО Учебный центр «ИНФОРМАТИКА»
614990 г. Пермь, ул. Букирева, 15