Заметки по курсу «Вычислительная математика»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *4 апреля 2022 г.*

Содержание

1 С1. Численное дифференцирование и аппроксимация.

Простейший случай. Пусть задана функция в виде пар точек x_i, $u(x_i)$. Тогда, в простейшем случае, можем найти производную $u^{(1)}(x_j)$, как

$$u^{(1)}(x_j) \overset{a)}{=} \frac{u_j - u_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}$$
$$u^{(1)}(x_j) \overset{b)}{=} \frac{u_{j+1} - u_j}{x_{j+1} - x_j}$$
$$u^{(1)}(x_j) \overset{c)}{=} \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{x_{j+1} - x_{j-1}}.$$

Хочется понять с какой точностью происходит аппроксимация. Для этого вспоминаем разложение по Тейлору

$$u(x_j + \Delta x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{u^{(k)(x_j)}}{k!} \Delta x^k + O\left(\Delta x^{n+1}\right).$$

Далее будем считать, что значения даны однородна, тога $x_j - x_{j-1} = h$. Раскладывая по Тейлору, находим

$$u(x_{j-1}) = u_j - hu'_j + \frac{h^2}{2} u''_j - \frac{h^3}{6} u'''_j + O(h^4),$$

подставляя в выражение для производной, находим (для «a»)

$$\frac{1}{h}\left(u_j - u_j + hu'_j - \frac{h^2}{2}u''_j + \frac{h^3}{6}u'''_j\right) = u'_j - \frac{h}{2}u''_j + \frac{h^2}{6}u'''_j \approx u'_j + O(h).$$

Аналогично для «b» $u'(x_j) = u'_j + O(h)$.

Интересно посмотреть на «c»:

$$u'(x_j) = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} = u'_j + O(h^2),$$

что лучше предыдущего результата.

Общий случай. Пусть теперь нам нужно найти $u^{(k)}(x_*) = u_*^{(k)}$, которое может быть выражено в виде

$$u_*^{(k)} = \sum_{j=-l}^{m} \alpha_i u(x_* + \Delta x_j),$$

где $n = m + l$ – количество узлов, $x_* \in [x_j, x_{j+1}]$, $\Delta x_j = x_j - x_*$.

Снова раскладывая по Тейлору, найдём α_i:

$$u(x_* + \Delta x_j) = u_* + \Delta x_j u'_* + \ldots + \frac{\Delta x_j^n}{n!} u_*^{(n)},$$

домножая на α_j, суммируя и группируя коэффициенты при $u_*^{(k)}$

$$u^{(k)}(x_*) = u_* \sum_{j=-l}^{m} \alpha_j + u'_* \sum_{j=-l}^{m} \alpha_j \Delta x_j + \frac{u''_*}{2} \sum_{j=-l}^{m} \alpha_j \Delta x_j^2 + \ldots + \frac{u_*^{(n)}}{n!} \sum_{j=-l}^{m} \alpha_j \Delta x_j^n.$$

Пусть мы хотим аппроксимировать при $k = 0$, а значит

$$\sum_{j=-l}^{m} \alpha_j = 1, \qquad \sum_{j=-l}^{m} \Delta x_j \alpha_j = 0, \qquad \ldots \qquad \sum_{j=-l}^{m} \Delta x_j^n \alpha_j = 0.$$

Всего узлов n, соответственно n неизвестных α_j, а значит останавливаемя на аппроскимации с точностью до $\frac{u_*^{(n)}}{n!} \Delta x_j^n$.

Допустим теперь $k = k$, тогда мы бы требовали $\sum_{j=-l}^{m} \Delta x_j^k \alpha_j = 1$, а остальные суммы равны нулю. И так можем продолжать вплоть до $k = n - 1$.

Решение СЛУ. Перейдём к системе вида $A\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{f}$, где $\boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_{-l}, \alpha_{-l+1}, \ldots, \alpha_{m-1}, \alpha_m\}$, а $\boldsymbol{f} = \{1, 0, \ldots, 0\}$ для $k = 0$. Осталось найти A, которое будет вида

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \ldots & 1 \\ \Delta x_{-l} & \ldots & \delta x_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta x_{-l}^{n-1} & \ldots & \Delta x_m^{n-1} \end{pmatrix},$$

которую ещё называют матрицей Вандермонда. Её замечательная особенность в её невырожденности, а значит решение можем найти в виде $\boldsymbol{\alpha} = A^{-1}\boldsymbol{f}$.

Если $x_* = x_j$, то решение даст $\alpha_j = 1$ и $\alpha_{j\pm i} = 0$. А значит решение может быть представлено в виде

$$\alpha_j = \frac{(x_* - x_{-l})(x_* - x_{-l+1})\ldots(x_* - x_{j-1})(x_* - x_{j+1})\ldots(x_* - x_m)}{(x_j - x_{-l})(x_j - x_{-l+1})\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_m)},$$

которое вроде и является решением для $k = 0$.

Для общего вида k также можно получить рекуррентные соотношения чуть более сложного вида. Напомним, что для k производной точноть аппроксимации будет $O(\Delta x^{n-k})$.

Функция многих переменных. Для начала вспоминим, что дифференциал

$$d^k u(x_*, y_*) = (dx\, \partial_x + dy\, \partial_y)^k u(x_*, y_*) \approx (\Delta x_i\, \partial_x + \Delta y_i\, \partial_y)^k\, u(x_*,\, y_*).$$

Подставляя это в ряд Тейлора и представляя

$$u^{(k)}(x_*, y_*) = \sum_i \alpha_i u(x_* + \Delta x_i,\, y_* + \Delta y_i) = \ldots$$

приходим к системе для α_i (при $k = 0$):

$$\sum_{i=0}^{I} \alpha_i = 1, \quad \sum_{i=0}^{I} \Delta x_i \alpha_i = 0, \quad \sum_{i=0}^{I} \Delta y_i \alpha_i = 0, \quad \ldots$$

А дальше уже снова можем подставлять $\neq 0$ часть $\boldsymbol{f}$ при той производной, которая нам нужна.

2 С2. Интерполяция

Интерполяция полиномом

Постановка задачи. В 1D есть множество пар точек x_i, y_i, нужно построить непрерывную гладкую $u(x)$. Вообще можем говорить, что у нас есть сеточная проекция функции $u(x)$: $\{u_i\}_{i=0}^{N} = \{u(x_i)\}$.

Полиномы Ланранжа. Можем по $N+1$ точке провести полином степени N, например написав полином в форме Лагранжа

$$L_N(x) = \sum_{k=0}^{N} c_k(x) u_k, \qquad c_k(x) = \prod_{i=0, i\neq k}^{N} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \tag{2.1}$$

где $c_k(x_i) = \delta_{ki}$.

Полиномы Ньютона. Можем написать полином в форме Ньютона через разностный аналог формулы Тейлора:

$$U_n(x) = u(x_0) + (x - x_0)u(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)u(x_0, x_1, x_2) + \ldots \tag{2.2}$$

где ввели функцию вида

$$u(x_i, x_{i+1}) = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i}, \quad u(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \frac{u(x_{i+1}, x_{i+2}) - u(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}, \quad \ldots \tag{2.3}$$

Таким образом и формируется разностная схема, позволяющая строить интерполяционные полиномы.

Полиномы Лагранжа удобно использовать для фиксированного числа узлов. Полиномы Ньютона больше подходят для фиксированной функции с переменным числом узлов.

Ошибка интерполяции. Введем ошибку, как

$$R_N(x) = u(x) - P_N(x).$$

Предположим, что на отрезке $[a, b]$ функция $u(x)$ $N+1$ раз непрерывно дифференцируема, тогда

$$R_N(x) = \frac{u^{(N+1)(\xi)}}{(N+1)!} \prod_{j=0}^{N} (x - x_j), \qquad \xi \in [a, b].$$

Считая сетку регулярной с шагом h: $b - a = Nh$:

$$R_N(x) = \frac{h^{N+1}}{(N+1)!} \max_{\xi\in[a,b]} |u^{(N+1)}(\xi)|.$$

Вообще полезно ввести константу Лебега, порядка 2^N для полиномов, характеризующую размер осцилляций интерполяционных полиномов между узлами. Решить проблему можно выбрав оптимальную сетку, для котрой константа Лебега порядка $\ln N$. Заметим, что всё это подходит только для локальной интерполяции.

Сплайн интеполяция

Постановка задачи. В 1D есть множество пар точек x_i, y_i, нужно построить непрерывную гладкую $u(x)$. Можем на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ заменить функцию $u(x)$ некоторым многочленом $s_i(x)$.

Обычно используется полином третьей степени, для которого требуем

$$s_{i-1}(x_{i-1}) = s_i(x_{i-1}), \qquad s_i(x_i) = s_{i+1}(x_i),$$

и аналогично для s' и s''.

Степенью сплайна называется максимальная степень s_i, гладкостью – количество непрерывных производных, деффектом – разность между степенью и гладкостью.

Коэффициенты. Сплайн можем найти в виде

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2}(x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x - x_i)^3,$$

откуда сразу знаем смысл коэффициентов

$$a_i = s_i(x_i), \qquad b_i = s_i'(x_i), \qquad c_i = s_i''(x_i), \qquad d_i = s_i'''(x_i).$$

Всего у нас 4 неизвестных, 4 условия на их значения: $u_i = s_i = s_{i-1}|_{x=x_i}$, $s_i' = s_{i-1}'|_{x=x_i}$, $s_i'' = s_{i-1}''|_{x=x_i}$, откуда однозначно достаются коэффициенты:

$$\begin{cases} a_{i-1} = a_i - b_i h + \frac{c_i}{2}h^2 - \frac{d_i}{6}h^3, \\ b_{i-1} = b_i - c_i h + \frac{d_i}{2}h^2, \\ c_{i-1} = c_i - d_i h, \end{cases}$$

где первое условие для $i = 1, \ldots, N$ и остальные для $i = 2, \ldots, N$. Всего получается на $3N - 2$ условия на $3N$ неизвестных.

Есть некоторая свобода в выборе краевых условий на s' и s''. Выбор $u''(x_0) = u''(x_N) = 0$ называют естественным сплайном. Допустим также $u'''(x_0) = u'''(x_N) = 0$. Ещё бывает периодический сплайн, когда требуем равенство производных на краях.

Свойства сплайна. Если $u(x)$ – непрерывна, то последовательность кубических сплайнов $u_N(x)$ будет сходиться к $u(x)$ *равномерно*.

Многомерный случай. Для 2D функции $u(x, y)$ можем построить 2D полиномы Лагранжа

$$L_{NM}(x, y) = \sum_{n=0}^{N}\sum_{m=0}^{M} u_{nm} \prod_{i\neq n}\prod_{j\neq m} \frac{(x - x_i)(y - x_j)}{(x_n - x_i)(y_m - y_j)}.$$

Аналогично можем строить многомерные сплайны.

3 С3. Численное интегрирование

Постановка задачи. Хотим найти

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

где мы не факт, что знаем $f(x)$.

Интуитивный подход. Можем посчитать сумму Римана

$$S_N = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i.$$

Такой подход будет приводить к квадратурным формулам[1]. Формулы вида $f(\xi_i)\Delta x_i$ называют элементарными квадратурными формулами.

Полиномиальный подход. Будем пользоваться полиномами в форме Лагража, тогда

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b P(x)\,dx, \qquad P_L(x) = \sum_{k=0}^{N} c_k(x) f(x_k) = \sum_{k=0}^{N}\left(\prod_{i\neq k}\frac{x - x_i}{x_k - x_i}\right) f_k.$$

Переставляя интеграл и сумму, можем получить

$$I = \sum_{k=9}^{N} f_k \int_a^b c_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{N} w_k f_k, \qquad w_k = \int_a^b c_k(x)\,dx.$$

[1]Кубатурным в двухмерии.

Предварительный расчёт. Рассмотрим функцию

$$c_k^m(x) = \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Пусть $x \in [a, b]$, и хотим перейти к $\tilde{x} \in [-1, 1]$, тогда

$$x = \frac{a+b}{2} + \tilde{x}\frac{b-a}{2} = \alpha_0 + \alpha_1 \tilde{x}.$$

Тогда

$$c_k^m(\tilde{x}) = \ldots = \prod_{i \neq k} \frac{\tilde{x} - \tilde{x}_i}{\tilde{x}_k - \tilde{x}_i},$$

таким образом все $c_k^m(\tilde{x}) \to w_k^m(m)$ не зависят от выбора интервала и могут быть вычислены заранее.

Например для линейного случая $m = 1$ приходим к разбиению на трапеции

$$I \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \Delta x_i, \qquad \Leftrightarrow \qquad w^1 = \frac{1}{2}.$$

Для $m = 2$ можем аналогично найти

$$I \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})}{6} \Delta x_i, \qquad \Leftrightarrow \qquad w_k^2 = \frac{1}{6}, \frac{2}{3},$$

Ошибка интегрирования. Раскладывая всё по Фурье можем найти оценки для ошибки. Введем $E[f]$:

$$E[f] = \left| \int_{x_{i-1}}^{x_i} R_N(x)\, dx \right| = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\max_\xi f^{(N+1)(\xi)}}{(N+1)!} (x_i - x_{i-1})^{N+1}\, dx.$$

В частности

$$\begin{aligned}
&m = 0,\ \text{средняя точка}, && E[f] = \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\xi),\\
&m = 1,\ \text{ф-ла трапеции}, && E[f] = \frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi),\\
&m = 2,\ \text{ф-ла Симпсона}, && E[f] = \frac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi),\\
&m = 3, && E[f] = \frac{1}{6480}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi).
\end{aligned}$$

Нули Лежандра. Располагая точки в нулях полиномов Лежандра повышаем степень до $2m + 1$:

$$q_0(x) = 1, \qquad q_1(x) = x, \qquad q_2(x) = \frac{1}{3}(3x^2 - 1), \ldots$$

которые ортогональны в смысле $L_2[-1, 1]$ нормы.

Оценка точности. Реально оценить точность можем по формуле

$$p = \log_2 \left(\frac{I_{4h} - I_{2h}}{I_{2h} - I_h} \right),$$

где $I^* = I_h + Ch^p$.

4 С4. Дискретное преобразование Фурье