Заметки по курсу «Вычислительная математика»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *29 марта 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
$$\alpha_j = \frac{(x_* - x_{-l})(x_* - x_{-l+1})\dots(x_* - x_{j-1})(x_* - x_{j+1})\dots(x_* - x_m)}{(x_j - x_{-l})(x_j - x_{-l+1})\dots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\dots(x_j - x_m)},$$
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
$$u^{(k)}(x_*, y_*) = \sum_i \alpha_i u(x_* + \Delta x_i,\, y_* + \Delta y_i) = \dots$$
приходим к системе для α_i (при $k = 0$):
$$\sum_{i=0}^{I} \alpha_i = 1, \quad \sum_{i=0}^{I} \Delta x_i \alpha_i = 0, \quad \sum_{i=0}^{I} \Delta y_i \alpha_i = 0, \quad \dots$$
А дальше уже снова можем подставлять $\neq 0$ часть $\boldsymbol{f}$ при той производной, которая нам нужна.

2 С2. Интерполяция

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 $u(x)$: $\{u_i\}_{i=0}^N = \{u(x_i)\}$.