СЕМИНАРЫ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ

Е. С. Тверская

МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва

Метод неопределенных коэффициентов.

Основная идея метода: Производная к-го порядка приближенно представляется формулой

$$f^{(k)}(x) \simeq \sum_{i=1}^{n} c_i f\left(x_i\right). \qquad (1)$$

Причем коэффициенты c_i, $i=\overline{1,n}$ выбираются из условия:

формула (1) должна быть точна для многочленов максимально высокой степени.

Пусть

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

Потребуем, чтобы для данного многочлена соотношение (1) обращалось в равенство

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \left(x^j\right)^{(k)}\bigg|_{x=x_0} = \sum_{i=1}^{n} c_i \left(\sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j\right)$$

Для того, чтобы данное равенство выполнялось для любого многочлена степени m необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при a_j в правой и левой частях равенства были равны.

Так как

$$\left(x^j\right)^{(k)} = j(j-1)(j-2)\dots(j-k+1)x^{j-k},$$

то получаем линейную систему уравнений

$$j(j-1)(j-2)\dots(j-k+1)x_0^{j-k} = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i^j, \quad j=\overline{0,m}, \qquad (2)$$

относительно неизвестных c_i.

Получаем $m+1$ уравнение и n неизвестных.

Тогда, для того чтобы система (2) могла иметь единственное решение необходимо, чтобы $m=n-1$ (количество уравнений было равно количеству неизвестных).

Определитель полученной системы - определитель Вандермонда, который отличен от нуля.

Следовательно, полученная система имеет единственное решение.

Вывод: Всегда можно построить формулу численного дифференцирования с n узлами точную для многочленов степени $n-1$.

Замечание. Далее, для простоты дальнейших рассуждений положим

- $x_0 = 0$.
- Узлы x_i расположены симметрично относительно точки $x_0 = 0$, т. е. $x_1 = -x_n$, $x_2 = -x_{n-1}$ и т. д.
- Если n - нечетное ($n = 2l+1$), то $x_{l+1} = x_0 = 0$.

Примеры.

Пример 1. Пусть требуется построить следующие формулы численного дифференцирования

$$f'(x) \simeq c_1 f(-h) + c_2 f(0); \quad f'(x) \simeq c_1 f(h) + c_2 f(0)$$

Данные формулы будут точны для любого многочлена первой степени, т. е.

$$k = 1, \quad n = 2, \quad m = 1.$$

Рассмотрим первое приближенное равенство.
Система (2) в данном случае примет вид

$$0 = c_1 + c_2,$$
$$1 = -c_1 h.$$

Решая ее, получаем

$$c_1 = \frac{1}{h}, \quad c_2 = -\frac{1}{h}.$$

Проводя аналогичные рассуждения для второго приближенного равенства получаем

$$c_1 = -\frac{1}{h}, \quad c_2 = \frac{1}{h}.$$

Таким образом,

$$f'(x) \simeq \frac{f(0) - f(-h)}{h}; \quad f'(x) \simeq \frac{f(h) - f(0)}{h} \tag{3}$$

Погрешность построенных приближенных формул. Представим $f(x)$ первыми 2-мя членами разложения и остаточным членом в форме Лагранжа

$$f(h) = f(0) + f'(0)h + \frac{f''(\xi_+)}{2!}h^2, \quad \xi_+ \in (0, h),$$
$$f(-h) = f(0) - f'(0)h + \frac{f''(\xi_-)}{2!}h^2, \quad \xi_- \in (-h, 0).$$

Тогда

$$\begin{aligned} r_1(f) =& f'(0) - \frac{f(0) - f(-h)}{h} = \\ &= f'(0) - \frac{1}{h}\left(f(0) - f(0) + f'(0)h - \frac{f''(\xi_-)}{2!}h^2\right) = \frac{f''(\xi_-)}{2!}h. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$|r_1(f)| \leqslant \frac{1}{2}M_2 h, \quad M_2 = \max_{x\in[-h,0]} |f''(x)|\,.$$

Аналогичные рассуждения можно провести и для второго приближенного равенства.

Таким образом, приближенные равенства имеют первый порядок точности по h.

Полученные приближенные равенства (3) носят названия **левой и правой разностной производной**.

Пример 2. Пусть требуется построить следующую формулу численного дифференцирования

$$f'(x) \simeq c_1 f(-h) + c_2 f(0) + c_3 f(h).$$

Данная формула будет точна для любого многочлена второй степени, т. е.

$$k = 1, \quad n = 3, \quad m = 2.$$

Система (2) в данном случае примет вид

$$\begin{aligned} 0 &= c_1 + c_2 + c_3, \\ 1 &= -c_1 h + c_3 h, \\ 0 &= c_1 h^2 + c_3 h^2. \end{aligned}$$

Решая ее, получаем

$$c_1 = -\frac{1}{2h}, \quad c_3 = \frac{1}{2h} \quad \text{и} \quad c_2 = 0.$$

Таким образом,

$$f'(x) \simeq \frac{f(h) - f(-h)}{2h}. \tag{4}$$

Погрешность построенной приближенной формулы. Представим $f(x)$ первыми 3-мя членами разложения и остаточным членом в форме Лагранжа

$$f(h) = f(0) + f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!}h^3, \quad \xi_+ \in (0,h),$$
$$f(-h) = f(0) - f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(\xi_-)}{3!}h^3, \quad \xi_- \in (-h,0).$$

Тогда

$$r_2(f) = f'(0) - \frac{f(-h) - f(h)}{2h} =$$
$$= f'(0) - \frac{1}{2h}\left(f(0) + f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!}h^3 - \right.$$
$$\left. - f(0) + f'(0)h - \frac{f''(0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_-)}{3!}h^3\right) = -\frac{f'''(\xi_-) + f'''(\xi_+)}{12}h^2.$$

Следовательно,

$$|r_2(f)| \leqslant \frac{1}{6}M_3h^2, \quad M_2 = \max_{x\in[-h,h]} |f'''(x)|.$$

Полученное приближенное равенство (4) носит название **центральной разностной производной**.

Пример 3. Пусть требуется построить следующую формулу численного дифференцирования

$$f''(x) \simeq c_1 f(-h) + c_2 f(0) + c_3 f(h).$$

Данная формула будет гарантировано точна для любого многочлена второй степени, т. е.

$$k = 2, \quad n = 3, \quad m = 2.$$

Система (2) в данном случае примет вид

$$\begin{aligned} 0 &= c_1 + c_2 + c_3, \\ 0 &= c_1 h - c_3 h, \\ 2 &= c_1 h^2 + c_3 h^2. \end{aligned}$$

Решая ее, получаем

$$c_1 = \frac{1}{h^2}, \quad c_3 = \frac{1}{h^2} \quad \text{и} \quad c_2 = -\frac{2}{h^2}.$$

Таким образом,

$$f''(x) \simeq \frac{f(h) - 2f(0) + f(-h)}{h^2}. \tag{5}$$

Погрешность построенной приближенной формулы. Представим $f(x)$ первыми 4-мя членами разложения и остаточным членом в форме Лагранжа

$$f(h) = f(0) + f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4, \quad \xi_+ \in (0,h),$$
$$f(-h) = f(0) - f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4, \quad \xi_- \in (-h,0).$$

Тогда

$$r_3(f) = f''(0) - \frac{f(-h) - 2f(0) + f(h)}{h^2} =$$
$$= f''(0) - \frac{1}{h^2}\left(f(0) - f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4 - 2f(0) + \right.$$
$$\left. + f(0) + f'(0)h + \frac{f''(0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(0)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4 \right) = -\frac{f^{(4)}(\xi_-) + f^{(4)}(\xi_+)}{24}h^2.$$

Следовательно,

$$|r_3(f)| \leqslant \frac{1}{12}M_4 h^2, M_4 = \max_{x\in[-h,h]} \left| f^{(4)}(x) \right|.$$

Метод Рунге-Ромберга.

При вычислении одной и той же величины формулы с большим числом узлов дают более высокий порядок точности, но они более громоздки.

Рассмотри еще один способ получения формул численного дифференцирования более высокого порядка точности.

Основная идея метода. Из примера 3 видно, что погрешность погрешность формулы (5) для четырежды дифференцируемой функции имеет вид

$$R = h^2\varphi(\xi),$$

где ξ некоторая точка вблизи узла x_0.Если $f^{(4)}(x)$ Липшиц-непрерывна, то оценку можно уточнить:

$$R = h^2\varphi(x_0) + O(h^3).$$

Общий случай. Пусть в общем случае имеется некоторая приближенная формула $\zeta(x,h)$ для вычисления величины $z(x)$ по значениям на равномерной сетке с шагом h, а остаточный член этой формулы имеет следующую структуру:

$$z(x) - \zeta(x,h) = \varphi(x)h^p + O(h^{p+1}). \tag{6}$$

Произведем расчет по той же приближенной формуле для той же точки x, но используя равномерную сетку с другим шагом sh, $s > 1$. Тогда получим значение $\zeta(x, sh)$, связанное с точным значением соотношением

$$z(x) - \zeta(x, sh) = \varphi(x)(sh)^p + O((sh)^{p+1}). \qquad (7)$$

Заметим, что $O((sh)^{p+1}) \approx O(h^{p+1})$.
Использую расчеты на разных сетках оценим величину погрешности. Для этого вычтем (6) из (7) и получим **первую формулу Рунге**:

$$R \approx \varphi(x)h^p = \frac{\zeta(x,h) - \zeta(x,sh)}{s^p - 1} + O(h^{p+1}). \qquad (8)$$

Исключим найденную погрешность (8) из формулы (6) и получим **вторую формулу Рунге**:

$$z(x) = \zeta(x,h) + \frac{\zeta(x,h) - \zeta(x,sh)}{s^p - 1} + O(h^{p+1}). \qquad (9)$$

Полученный метод оценки погрешности и повышения точности результата прост, применим в большом числе случаев и эффективен.

В общем виде, полученные методом неопределенных коэффициентов формулы можно переписать в виде:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \quad f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

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

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

или

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \tag{10}$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \tag{11}$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \tag{12}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2} = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}, \tag{13}$$

Пример 1. На лекции с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена была получена формула численного дифференцирования

$$f'(x_i) \simeq L_4'(x_i) = \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h},$$

имеющая 4-ый порядок аппроксимации.

Основной недостаток. Получение данной формулы оказалось достаточно трудоемким, так как пришлось дифференцировать многочлен 4-ой степени.

Попробуем получить ту же формулу с использование метода Рунге-Ромберга.

Для этого возьмем простейшую формулу для вычислений производной в центральной точке (12) и запишем ее выбирая сначала соседние узлы, а затем более удаленные:

$$f_1'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \quad f_2'(x_i) = \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h}.$$

Порядок точности формулы $p = 2$, коэффициент увеличения шага $s = 2$.

Поэтому уточнение методом Рунге дает формулу:

$$f'(x_i) \approx f_1'(x_i) + \frac{1}{3}\left(f_1'(x_i) - f_2'(x_i)\right) =$$
$$= \frac{1}{12h}\left(f_{i-2} - 8f_i + 8f_i - f_{i+2}\right).$$

Пример 2.

Выведем формулу высокой точности из формулы низкой точности. Возьмем простейшую формулу для вычислений производной в центральной точке (12) и запишем ее выбирая сначала соседние узлы, а затем более удаленные:

$$f_1'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \quad f_3'(x_i) = \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h}.$$

Порядок точности формулы $p = 2$, коэффициент увеличения шага $s = 3$. Поэтому уточнение методом Рунге дает формулу:

$$f'(x_i) \approx f_1'(x_i) + \frac{1}{8}\left(f_1'(x_i) - f_3'(x_i)\right) =$$
$$= \frac{1}{48h}\left(f_{i-3} - 27f_i + 27f_i - f_{i+3}\right).$$

Данную формулу можно также получить, если продифференцировать интерполяционный многочлен

$$L_4(x) = \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})(x-x_{i+3})}{(x_{i-3}-x_{i-1})(x_{i-3}-x_i)(x_{i-3}-x_{i+1})(x_{i-3}-x_{i+3})} f_{i-3} +$$

$$+ \frac{(x-x_{i-3})(x-x_i)(x-x_{i+1})(x-x_{i+3})}{(x_{i-1}-x_{i-3})(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})(x_{i-1}-x_{i+3})} f_{i-1} +$$

$$+ \frac{(x-x_{i-3})(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})(x-x_{i+3})}{(x_i-x_{i-3})(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i+3})} f_i +$$

$$+ \frac{(x-x_{i-3})(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+3})}{(x_{i+1}-x_{i-3})(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)(x_{i+1}-x_{i+3})} f_{i+1} +$$

$$+ \frac{(x-x_{i-3})(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i+3}-x_{i-3})(x_{i+3}-x_{i-1})(x_{i+3}-x_i)(x_{i+3}-x_{i+1})} f_{i+3}.$$

Пример 3. На лекции была выписана формула для вычисления $f''(x_i)$:

$$f''(x_i) \simeq L_4''(x_i) = -\frac{f_{i-2} - 16f_{i-1} + 30f_i - 16f_{i+1} + f_{i+2}}{12h^2}.$$

Из-за большой трудоемкости процесса получения данной формулы с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена ее получение было отложено на семинар.

Получим ту же формулу с использование метода Рунге-Ромберга.

Для этого используем формулу для вычисления производной в центральной точке (13) 2-го порядка аппроксимации с использованием соседних узлов, а затем более удаленных.

$$f_1''(x_i) = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}, \quad f_2''(x_i) = \frac{f_{i-2} - 2f_i + f_{i+2}}{4h^2}.$$

Порядок точности формулы $p = 2$, коэффициент увеличения шага $s = 2$. Поэтому уточнение методом Рунге дает формулу:

$$\begin{aligned} f''(x_i) \approx & f_1''(x_i) + \frac{1}{3}\left(f_1''(x_i) - f_2''(x_i)\right) = \\ & = -\frac{f_{i-2} - 16f_{i-1} + 30f_i - 16f_{i+1} + f_{i+2}}{12h^2}. \end{aligned}$$