УДК 519.6

В.И. Киреев, О.В. Киреева

О ПОДОБИИ ОПЕРАТОРОВ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ, ИНТЕГРИРОВАНИЯ И СПЛАЙНОВ ЧЕТНОЙ И НЕЧЕТНОЙ СТЕПЕНЕЙ (часть 1)

Сформулирован принцип подобия применительно к теории локальной и глобальной аппроксимации производных и интегралов, а также к численным схемам решения дифференциальных уравнений. Приведены формулы подобных сплайнов нечетной (3-й, 5-й) и четной(2-й, 4-й) степеней.

Ключевые слова: принцип подобия, локальная и глобальная аппроксимация производных и интегралов, подобные численные схемы, подобные сплайны нечетной и четной степеней.

1. Исходные положения

В различных областях промышленного производства, в частности при изготовлении сложных изделий из природного камня, при исследовании месторождений, в САПР современных технологических систем, в компьютерном моделировании элементов конструкций различных систем и т.д. широко используются методы численного анализа – методы аппроксимации поверхностей, методы численного дифференцирования и интегрирования, методы сплайн-функций и другие.

В классических учебниках по численным методам [1, 2, 3, 4] и других книгах аппроксимационные операторы численного дифференцирования и интегрирования получаются на основе разложения функций в ряд Тейлора или использования интерполяционных многочленов. Эти операторы имеют локальный (и одновременно явный) характер и выражаются, как правило, через линейную комбинацию значений сеточной функций $y_i = f_i = f(x_i)$, $(i = 0,1,...,n)$ в узлах заданной сетки x_i, представляющей собой разбиение отрезка $[a,b]$. Например, на четырехточечном шаблоне $(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ аппроксимационный явный (или локальный) оператор для первой производной f'_{i-2} в левой крайней точке x_{i-2} шаблона записывается так $[3]$:

$$\hat{f}'_{i-2} = \frac{1}{6h}(-2f_{i-2} - 3f_{i-1} + 6f_i - f_{i+1}) .$$

Функциональную зависимость для явного дифференциального оператора в произвольной точке некоторого шаблона $(x_{i-m_1},\ldots, x_{i+m_2})$ применительно к функции одной переменной можно выразить такой общей формулой: $\hat{f}^{(k)}_{i\pm s} = \hat{f}^{(k)}_{i\pm s}(f_{i-m_1},\ldots,f_i,\ldots f_{i+m_2})$. Здесь число $m_2 + m_1 + 1$ равно количеству точек, составляющих аппроксимационный шаблон $(x_{i-m_1},\ldots, x_{i+m_2})$, на котором записывается формула аппроксимации производной k-го порядка, $m_1 \le |s| \le m_2$, нижние индексы $i \pm s$ в обозначении оператора указывают номера узлов, для которых записан оператор. Такая классическая форма записи локальных операторов с помощью линейных комбинаций значений исходных функций, использующаяся как для аппроксимации производных, так и интегралов, содержит некоторое ограничение. Это ограничение накладывается на вид базовых функций, по которым строятся классические операторы. В качестве базовых функций в этих операторах принимаются, как правило, сеточные значения $y_i = f_i = f(x_i)$, $(i = 0, 1, \ldots, n)$. В работах автора характер базовых функций расширен, т.к. аппроксимация производных производится как по значениям функций, так и по величинам интегралов. Это общепринятое в численном анализе ограничение сужает область применимости его аппарата при проведении исследований. Так, например, традиционными методами нельзя аппроксимировать функцию или производную в некотором узле сетки через априори известные значения определенных интегралов I_i^{i+1} или через значения интегралов, вычисленных по отрезкам, составляющим шаблон. Отсутствует также систематическое изложение локальных формул для аппроксимации интегралов через значения функций и производных, связи приращений аппроксимируемой функции $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$ на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ с производными в узлах, составляющих этот отрезок. Отсутствуют методы глобального вычисления определенных интегралов по всем отрезкам $[x_i, x_{i+1}]$ области разбиения из системы алгебраических уравнений относительно интегралов и др. Здесь и ниже символ I_i^{i+1} обозначает определенный интеграл $I_i^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$, относящийся к произвольному отрезку $[x_i, x_{i+1}]$ области разбиения отрезка [a, b].

Поэтому в работах автора характер базовых функций расширен, так как в качестве базовых принимаются как непосредственно сеточные функции $y_i = f_i = f(x_i)$, $(i = 0, 1, \ldots, n)$, так и их приращения, а также определенные интегралы I_i^{i+1}, соответствующие отрезкам, составляющих шаблон [5, 6, 7].

Указанное расширение понятия базовых функций свидетельствует о том, что и традиционные операторы численного дифференцирования предпочтительно записывать не через f_i, а через их приращения $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$.

Сама функция f_i также может быть восполнена с помощью интегралов. Замечено также, что в теории приближений имеет место подобие одних операторов или формул другим операторам и формулам.

Действительно, оператор, записанный, например, для аппроксимации первой производной, может быть путем его простой модификации распространен также и для аппроксимации самой функции f_i, а оператор для аппроксимации второй производной может быть модифицирован для аппроксимации первой производной. Впервые наиболее общая форма аппроксимационных операторов систематически рассмотрена в книге [7]. В ней же кратко затронут вопрос о подобии формул для аппроксимации производных по значениям сеточной функции и самих функций, аппроксимированных по значениям определенных интегралов.

В данной работе проблема подобия в теории аппроксимации производных, интегралов, разностных схем решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и основных формул для глобальных дифференциальных и интегрально-дифференциальных сплайнов и вытекающих из них соотношений рассматривается более широко и методически обоснованно. Например, системы линейных алгебраических уравнений относительно производных соответственно второго или первого порядка, получающихся для неопределенных параметров в алгоритме построения кубических дифференциальных сплайнов, путем записи подобных формул можно распространить на системы уравнений относительно производных соответственно первого или нулевого порядка, т.е. самих функций. Аналогичную процедуру можно применить и для соотношений, на основе которых записываются алгебраические системы, получающиеся при выводе параболических многочленов интегрально-дифференциального типа, предложенных автором в работах [5-7], а также для разностных схем.

Алгоритмы определения производных $f_i'' = f''(x_i)$, $f_i' = f'(x_i)$ (или непосредственно функций f_i) во всех узлах наперед заданной сетки из систем линейных алгебраических уравнений, записанных относительно неопределенных параметров в узлах, а также уравнения (формулы), на которых основаны эти алгоритмы, называются здесь *неявными*. Метод их определения называется *глобальным.* Аналогичные неявные формулы получены также автором и для определенных интегралов по отрезкам $[x_i, x_{i+1}]$ области разбиения.

Кроме того, автором обнаружено, что и сами формулы алгебраических многочленов-звеньев для кубических дифференциальных сплайнов и дифференциальных сплайнов пятой степени могут быть также преобразованы к соответствующим формулам звеньев для параболических интегрально-дифференциальных сплайнов и интегрально-дифференциальных сплайнов четвертой степени. Принцип обобщения одних явных и неявных формул для аппроксимации или одних формул для звеньев-многочленов и вытекающих из них соотношений связи определенных и неопределенных параметров на другие явные формулы или неявные формулы для аппроксимации или на другие формулы для звеньев сплайнов здесь называется *принципом подобия*. Этот принцип учитывается в некоторых случаях в главах 4 и 5 книги [7]. Все формулы и соотношения, удовлетворяющие принципу подобия и получаемые с помощью простейших преобразований, здесь будут называться *подобными*. Кроме того, на основе данного принципа квадратурные формулы, используемые для аппроксимации интегралов, обобщаются на схемы решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Таким образом, излагаемый здесь принцип подобия является обобщающим, т.к. он устанавливает соответствие формул теории приближений (в том числе и формул дифференциальных и интегрально-дифференциальных сплайнов) и формул для численных методов решения ОДУ. Кроме того, установлено, что этот принцип позволяет также обобщить теоремы Коши и Лагранжа о средних значениях и увязать их с физическими и квадратурной формулами.

Необходимым условием для записи всех формул или операторов, подчиняющихся указанному принципу подобия, является выражение их не через линейные комбинации первообразных, значений функций или их производных, являющихся базовыми функциями, а через соответствующие *комбинации приращений* этих базовых функций. В этом случае определенный интеграл I_i^{i+1} на отрезке $[x_i, x_i]$ следует рассматривать как приращение первообразных функций $I_i^{i+1} = F_{i+1} - F_i$ (формула Ньютона-Лейбница). Тогда интегралу I_i^{i+1}, входящему, например, в одно подобное выражение, в других подобных выражениях будут соответствовать приращения функций или производных различных порядков на этом же отрезке $[x_i, x_i]$, которые записываются по формулам вида $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$, $\Delta f_i^{(p)} = f_{i+1}^{(P)} - f_i^{(P)}$, соответствующим формуле Ньютона-Лейбница. Здесь верхний индекс p (в скобках) указывает на порядок производных от функции $f(x)$ или от ее приращения в соответствующем узле, а нижние индексы относятся к узлам сеточной функции $f(x_i)$ или к ее приращениям. Кроме того, в большинстве учебников по вычислительной математике не приведены в систематическом изложении формулы для аппроксимации производных и интегралов на нерегулярных сетках (шаблонах), заданных с неравномерным шагом. Поэтому данный пробел в некоторой степени восполняется в учебном пособии [7] и некоторые из приведенных в нем операторов используются и апробируются в данной работе.

Ниже приводятся только несколько типов подобных явных и неявных формул, являющихся основой для составления алгебраических систем, из которых могут быть вычислены значения интегралов по всем отрезкам разбиения, а также функции и (или) производные в узлах заданной сетки. Одни из указанных явных формул, составляющих некоторую группу подобия, начинаются с оператора, аппроксимирующего непосредственно функцию f_i по значениям интегралов. Такой первый оператор, по которому далее записываются последующие операторы, аппроксимирующие производные, здесь будет называться *базовым* для всей группы подобных формул. Другие группы начинаются с иных базовых операторов. Например, базовым оператором может быть выбран оператор, аппроксимирующий, производную $f_i^{/}$ также по значениям интегралов I_{i-1}^{i}, I_i^{i+1} на двух соседних отрезках, примыкающих к узлу x_i.

Подчеркнем, что вид каждой из подобных формул, например для численного дифференцирования, входящей в определенную фиксированную группу подобия, изменяется в соответствии с изменением порядка производной: для операторов $\hat{f}_i, \hat{f}'_i, \hat{f}''_i$ в правой части используются соответственно разности $\Delta F_i = F_{i+1} - F_i = I_i^{i+1}, \Delta F_{i-1} = F_i - F_{i-1} = I_{i-1}^{i}$ (для первого оператора), $\Delta f_i, \Delta f_{i-1}$ (для второго оператора), $\Delta f_i'$, $\Delta f_{i-1}'$ (для третьего оператора) и т.д. Такая же закономерность сохраняется и в других группах подобных формул. Отметим, что коэффициенты, входящие в правые части операторов и зависящие от шагов сетки, при переходе от одной подобной формулы группы к другой подобной формуле этой группы не изменяются. При этом изменяется только порядок производной в остаточном слагаемом, определяющий порядок аппроксимации производной (или функции, или соответствующих приращений) относительно шага сеточной функции, а порядок аппроксимации не изменяется. Перейдем теперь непосредственно к рассмотрению нескольких групп подобных локальных операторов (формул).

2. Подобие на основе локальных дифференциальных операторов

При формировании подобных локальных (явных) операторов вначале выбирается некоторый *базовый* оператор, по которому затем формируются последующие операторы, являющиеся подобными базовому. В качестве базовых операторов могут быть выбраны как дифференциальные операторы для аппроксимации функций или производных по приращениям первообразных (т.е. по значениям интегралов $\Delta F_i = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i)dx$) или по приращениям функций ($\Delta f_i, \Delta f_{i-1}, \ldots$), так и локальные операторы для аппроксимации интегралов по линейной комбинации значений функций f_i на некотором аппроксимационном шаблоне. (Здесь и далее по тексту $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$). Затем при получении подобных операторов базовый оператор видоизменяется в соответствии с принципом подобия. При этом обобщенный порядок производных в левой и правой частях базового оператора постепенно либо повышается, либо (при возможности) понижается. Здесь принимается, что порядок производной p для первообразной функции $F(x)$ (определенного интеграла) равен $p=-1$, для самой функции $y=f(x)$ значение $p=0$, для первой производной значение $p=1$ и так далее. При записи подобных операторов в дальнейшем будем ограничиваться только двумя или (иногда) тремя подобными формулами. Заметим, что излагаемый здесь в обобщенном виде принцип подобия явных дифференциальных операторов в практике применения численных методов без труда используется путем введения новых обозначений. Например, для вычисления первой производной справедлива формула

$$\hat{f}'_i = \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1}) .$$

Тогда вторая производная может быть вычислена по этой же формуле, если вместо значений функций в правой части взять их соответствующие производные, т.е. ввести новые обозначения. Однако так формально произвести новые обозначения в общем случае нельзя, если в качестве базовых функций используются не только функции $f(x_i)$ или ее производные некоторого порядка, но и определенные интегралы. Именно такие базовые функции применительно к формулам численного дифференцирования и используются в данной работе. Кроме того, данный принцип распространяется не только для явных формул численного дифференцирования, но для локальных формул численного интегрирования, неявных формул и формул, получающихся при выводе дифференциальных и интегрально-дифференциальных сплайнов.

Вернемся к рассмотрению подобия явных операторов.

Первая группа приведенных ниже подобных формул базируется на операторах, аппроксимирующих функцию $\hat{f}'_i$ в узлах x_{i-1}, x_i, x_{i+1} на нерегулярном шаблоне по значениям приращений функции Δf_{i-1}, Δf_i на двух прилежащих к узлу x_i отрезках. Понижая порядок производных в соответствующих приращениях и в самом операторе, получаем новые подобные операторы для аппроксимации самой функции по значениям двух определенных интегралов I_{i-1}^{i}, I_i^{i+1}. Соотношения для данной группы операторов, расположенных в порядке возрастания производных для операторов ($p=0$, $p=1$), имеют следующий вид:

$$\hat{f}_{i-1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left((2+\delta_{i+1})\, I_{i-1}^{i} - \frac{1}{\delta_{i+1}}\, I_i^{i+1}\right), \tag{2.1}$$

$$\hat{f}_{i,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1}{\delta_{i+1}} I_i^{i+1} + \delta_{i+1} I_{i-1}^{i}\right)\left(\frac{h_i^2}{6}\delta_{i+1} M_{2,i}\right), \tag{2.2}$$

$$\hat{f}_{i+1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1+2\delta_{i+1}}{\delta_{i+1}}\, I_i^{i+1} - \delta_{i+1}\, I_{i-1}^{i}\right) \tag{2.3}$$

$$\hat{f}'_{i-1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left((2+\delta_{i+1})\, \Delta f_{i-1} - \frac{1}{\delta_{i+1}}\, \Delta f_i\right) \tag{2.4}$$

$$\hat{f}'_{i,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1}{\delta_{i+1}} \Delta f_i + \delta_{i+1}\, \Delta f_{i-1}\right)\left(\frac{h_i^2}{6}\delta_{i+1} M_{3,i}\right) \tag{2.5}$$

$$\hat{f}'_{i+1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1+2\delta_{i+1}}{\delta_{i+1}}\, \Delta f_i - \delta_{i+1}\, \Delta f_{i-1}\right) \tag{2.6}$$

В приведенных выше формулах операторы (2.4)-(2.6), аппроксимирующие производные функции в точках x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, являются базовыми, а операторы (2.1)-(2.3) этой группы, подобные указанным базовым операторам, являются следствиями. Аналогично могут быть сформированы последующие операторы для производных второго порядка, третьего и т.д. с использованием новых обозначений. Так, дифференциальный оператор второго порядка, аппроксимирующий вторую производную в центральной точке шаблона имеет следующий вид:

$$\hat{f}_{i,v}^{\prime\prime} = \frac{1}{H_i^{i+1}} \left(\frac{1}{\delta_{i+1}} \Delta f_i^{\prime} + \delta_{i+1} \Delta f_{i-1}^{\prime} \right) \left(\frac{h_i^2}{6} \delta_{i+1} M_{4,i} \right)$$

В приведенных выше формулах параметр H_i^{i+1} представляет собой сумму шагов на двух соседних отрезках сетки, т.е. $H_i^{i+1} = h_i + h_{i+1}$, а символ δ_{i+1} - параметр нерегулярности шаблона, являющийся отношением двух соседних шагов сетки, на которой задана функция $y_i = f(x_i)$, т.е. $\delta_{i+1} = \dfrac{h_{i+1}}{h_i}$. Нижний второй индекс v в обозначении операторов указывает на тип шаблона, построенного на переменном шаге. В скобках справа от формул здесь и ниже для некоторых операторов приведены оценки их точности (порядок их аппроксимации относительно шага).

Здесь $M_{k,i} = \max \left| f^{(k)}(x) \right|, k = 2,3,4.$ Видно, что порядок точности операторов относительно шага по мере повышения порядка производной не изменяется (здесь он равен двум), а изменяется только константа $M_{k,i}$ в оценке точности. Порядок производной для этой константы также при этом повышается.

На регулярной сетке $(\delta_{i+1} = 1)$ операторы (2.1)-(2.6) преобразуются к более простому виду:

$$\hat{f}_{i-1} = \frac{1}{H_i^{i+1}} \left(3I_{i-1}^{i} - I_i^{i+1} \right) \tag{2.7}$$

$$\hat{f}_i = \frac{1}{2h} \left(I_i^{i+1} + I_{i-1}^{i} \right) \quad \left(\frac{h^2}{6} M_{2,i} \right) \tag{2.8}$$

$$\hat{f}_{i+1} = \frac{1}{2h} \left(3I_i^{i+1} - I_{i-1}^{i} \right) \tag{2.9}$$

$$\hat{f}_{i-1}^{\prime} = \frac{1}{2h} \left(3\, \Delta f_{i-1} - \Delta f_i \right) \tag{2.10}$$

$$\hat{f}_i^{\prime} = \frac{1}{2h} \left(\Delta f_i + \Delta f_{i-1} \right) \quad \left(\frac{h^2}{6} M_{3,i} \right) \tag{2.11}$$

$$\hat{f}_{i+1}^{\prime} = \frac{1}{2h} \left(3\, \Delta f_i - \Delta f_{i-1} \right) \tag{2.12}$$

Дальнейшее обобщение оператора (11) приводит к соотношению для второй производной:

$$\hat{f}_i^{\prime\prime} = \frac{1}{2h} \left(\Delta f_i^{\prime} + \Delta f_{i-1}^{\prime} \right) \left(\frac{h^2}{6} M_{4,i} \right).$$

Операторы (2.10)–(2.12) для аппроксимации первых производных, представленные в общепринятом виде (не через линейные комбинации приращений функции, а через линейные комбинации самих функций $f_k, k = i-1, i, i+1$), записываются так:

$\hat{f}'_{i-1} = \frac{1}{2h}\left(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right)$, $\hat{f}'_i = \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1})$, $\hat{f}'_{i+1} = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1})$ Подчеркнем, что формулы (2.1), (2.2) , (2.3), пока имеющие ограниченное применение в вычислительной практике, позволяют вычислять значения функций по значениям интегралов на нерегулярном шаблоне, которые могут быть рассчитаны, например, при решении некоторых дифференциальных задач с помощью разностных методов интегрального типа. Такие методы построены автором на основе аппроксимации производной по значениям интегралов (см., например, формулу (2.15)).

Кроме того, эти формулы могут быть использованы для сглаживания сеточных функций, заданных (или вычисленных) с некоторой достаточно большой погрешностью или функций, имеющих разрыв первого рода.

Из рассмотрения соответствующих формул каждой группы видно, что их структуры являются одинаковыми. Значения числовых коэффициентов и коэффициентов, зависящих от параметра δ_{i+1}, как было отмечено выше, не изменяются при переходе от одного оператора к другому соответствующему оператору с повышенным порядком производной. Не изменяется также и порядок аппроксимации операторов.

Если в качестве *базовых* операторов принять дифференциальные операторы, записанные для первых производных на четырехточечном регулярном шаблоне через линейные комбинации приращений $\Delta f_k,\ k = i-2, i-1, i$, а затем от них перейти к функциональным операторам, то получим следующие восемь формул [7]

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}\left(11\Delta f_{i-2} - 7\Delta f_{i-1} + 2\Delta f_i\right)\left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right),\quad \hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}\left(2\Delta f_{i-2} + 5\Delta f_{i-1} - \Delta f_i\right)\left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_i = \frac{1}{6h}(-\Delta f_{i-2} + 5\Delta f_{i-1} + 2\Delta f_i)\ (\frac{h^3}{12}M_{4,i}),\ \hat{f}'_{i+1} = \frac{1}{6h}(2\Delta f_{i-2} - 7\Delta f_{i-1} + 11\Delta f_i)\ (\frac{h^3}{4}M_{4,i}),\qquad (2.13)$$

$$\hat{f}_{i-2,c} = \frac{1}{6h}\left(11I_{i-2}^{i-1} - 7I_{i-1}^{i} + 2I_i^{i+1}\right)\left(\frac{h^3}{4}M_{3,i}\right),\quad \hat{f}_{i-1,c} = \frac{1}{6h}\left(2I_{i-2}^{i-1} + 5I_{i-1}^{i} - I_i^{i+1}\right)\left(\frac{h^3}{12}M_{3,i}\right),$$

$$\hat{f}_{i,c} = \frac{1}{6h}\left(-I_{i-2}^{i-1} + 5I_{i-1}^{i} + 2I_i^{i+1}\right)\left(\frac{h^3}{12}M_{3,i}\right),\ \hat{f}_{i+1,c} = \frac{1}{6h}\left(2I_{i-2}^{i-1} - 7I_{i-1}^{i} + 11I_i^{i+1}\right)\left(\frac{h^3}{4}M_{3,i}\right).$$

Все данные операторы имеют третий порядок аппроксимации.

Подобные формулы следующей приводимой ниже группы базируются на формуле аппроксимации второй производной также на четырехточечном регулярном шаблоне [7]. Производные записаны здесь с помощью линейных комбинаций приращений $\Delta f_k,\ k = i-2, i-1, i$:

$$\hat{f}''_{i-2} = \frac{1}{h^2}(-2\Delta f_{i-2} + 3\Delta f_{i-1} - \Delta f_i)\ (\frac{11h^2}{12}M_{4,i}),\ \hat{f}''_{i-1} = \frac{1}{h^2}(-\Delta f_{i-2} + \Delta f_{i-1})\quad (\frac{h^2}{12}M_{4,i}),$$

$$\hat{f}''_i = \frac{1}{h^2}(\Delta f_i - \Delta f_{i-1})\quad (\frac{h^2}{12}M_{4,i}),\ \hat{f}''_{i+1} = \frac{1}{h^2}(\Delta f_{i-2} - 3\Delta f_{i-1} + 2\Delta f_i)\quad (\frac{11h^2}{12}M_{4,i})\qquad (2.14)$$

$$\hat{f}'_{i-2} = \frac{1}{h^2}(-2I_{i-2}^{i-1} + 3I_{i-1}^{i} - I_i^{i+1})\quad (\frac{11h^2}{12}M_{3,i}),\ \hat{f}'_{i-1} = \frac{1}{h^2}(-I_{i-2}^{i-1} + I_{i-1}^{i})\quad (\frac{h^2}{12}M_{3,i}),$$

$$\hat{f}'_i = \frac{1}{h^2}\left(I_i^{i+1} - I_{i-1}^{i}\right)\quad (\frac{h^2}{12}M_{3,i}),\quad \hat{f}'_{i+1} = \frac{1}{h^2}(I_{i-2}^{i-1} - 3I_{i-1}^{i} + 2I_i^{i+1})\quad (\frac{11h^2}{12}M_{3,i}).$$

Отметим, что последние четыре формулы из (2.14) позволяют аппроксимировать производные по величинам определенных интегралов. Порядок аппроксимации производных во всех точках шаблона соответствует двум относительно шага h. С помощью этих аппроксимационных формул интегрального типа можно строить интегрально-разностные схемы решения задач с обыкновенными дифференциальными уравнениями, а также в более общем случае- с дифференциальными уравнениями в частных производных.

Аппроксимационная интегральная формула для первой производной на нерегулярном трехточечном шаблоне имеет следующий вид:

$$\tilde{f}'_{i,v} = \frac{2}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1}{h_{i+1}} I_i^{i+1} - \frac{1}{h_i} I_{i-1}^{i}\right)\left(\frac{h_{i+1}^2 - h_i^2}{6} M_{2,i}\right) \tag{2.15}$$

(Здесь выражение в скобках, относящееся к правой части оператора, представляет собой разность удельных интегралов, т.е. интегралов, отнесенных к величинам шагов, к которым относятся указанные определенные интегралы).

Данный оператор также может быть принят в качестве базового, и в этом случае по нему можно построить группу подобия на нерегулярном трехточечном шаблоне. Это построение выполняется аналогично тому, как это сделано выше. Тогда вторая производная в центральной точке трехточечного нерегулярного шаблона будет иметь вид:

$$\tilde{f}''_{i,v} = \frac{2}{H_i^{i+1}}\left(\frac{1}{h_{i+1}} \Delta f_i - \frac{1}{h_i} \Delta f_{i-1}\right)\left(\frac{h_{i+1}^2 - h_i^2}{6} M_{2,i}\right).$$

Данная формула на регулярном шаблоне ($h = const$) имеет традиционный вид и порядок ее аппроксимации равен двум.

Кроме того, из параболических дифференциальных сплайнов получается параметрическое соотношение, связывающее приращения интерполируемой функции и производные этой функции в точках x_{i-1}, x_i:

$$\frac{f'_i}{h_{i+1}} \frac{f'_{i-1}}{h_i} = \frac{\Delta f_i}{h_{i+1}^2} - \frac{\Delta f_{i-1}}{h_i^2}. \tag{2.16}$$

Понижая в этом соотношении порядок производной на единицу, получаем подобную формулу, выражающую связь комбинации значений функции с комбинацией значений интегралов на двух соседних отрезках:

$$\frac{f_i}{h_{i+1}} \frac{f_{i-1}}{h_i} = \frac{I_i^{i+1}}{h_{i+1}^2} - \frac{I_{i-1}^{i}}{h_i^2}.$$

Данную формулу можно использовать для восстановления функции по значениям интегралов.

Некоторые из приведенных в данном разделе формул будут ниже использованы для построения численных схем решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка.

3. Подобие на основе локальных интегральных операторов

Приведенные выше группы подобных операторов, в которых базовыми являются операторы дифференциального типа, могут быть дополнены другими группами операторов, базирующимися на интегральных операторах. Например, квадратурная формула трапеций может быть принята за базовое соотношение для построения такой группы подобия:

$$I_i^{i+1} = \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{12} M_{2,i}\right) \tag{3.1}$$

$$\Delta \hat{f}_i = \frac{h}{2}(f'_i + f'_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{12} M_{3,i}\right) \tag{3.2}$$

$$\Delta \hat{f}_i^{/} = \frac{h}{2}\left(f_i^{//} + f_{i+1}^{//}\right) \left(\frac{h^3}{12} M_{4,i}\right) \qquad (3.3)$$

Принцип формирования группы (3.1)-(3.3) является аналогичным принципу, изложенному выше. Отметим, что оператор (3.2), в свою очередь, представляет собой основу для построения одной из схем решения обыкновенного дифференциального уравнения $\frac{dy}{dx} = g(x,y)$. В этом случае вместо производных f_i', f_{i+1}' в формуле (3.2) следует принять функцию $g(x,y)$ в соответствующей точке. Тогда подобные формулы, вытекающие из квадратур, заменяют интегрально-интерполяционные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Таким же аналогичным путем могут быть сформированы и другие группы подобных формул на регулярных или на нерегулярных шаблонах. Например, в качестве базовой формулы может быть взята квадратурная формула, полученная с использованием параболических интегро-дифференциальных сплайнов на трехточечном нерегулярном шаблоне (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) [7]. Тогда получаются следующие две одноинтервальные подобные формулы:

$$\hat{I}_{i,v}^{i+1} = \frac{h_{i+1}^3}{6H_i^{i+1}}\left(\frac{H_{3i}^{2(i+1)}}{h_{i+1}^2} f_{i+1} + \frac{H_i^{i+1} H_{3i}^{i+1}}{h_{i+1}^2 h_i} f_i - \frac{1}{h_i} f_{i-1}\right), \left(\frac{h_i^2 h_{i+1}^2}{72}\delta_{i+1}(\delta_{i+2}+2) M_{3,i}\right) \qquad (3.4)$$

$$\Delta \hat{f}_i = \frac{h_{i+1}^3}{6H_i^{i+1}}\left(\frac{H_{3i}^{2(i+1)}}{h_{i+1}^2} f_{i+1}' + \frac{H_i^{i+1} H_{3i}^{i+1}}{h_{i+1}^2 h_i} f_i' - \frac{1}{h_i} f_{i-1}'\right), \left(\frac{h_i^2 h_{i+1}^2}{72}\delta_{i+1}(\delta_{i+2}+2) M_{4,i}\right) \qquad (3.5)$$

Здесь $H_{k,i}^{m(k+1)} = kh_i + mh_{i+1}$ - параметр, являющийся линейной комбинацией двух соседних шагов трехточечного шаблона (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) сетки x_i, $i = 0,1,...,n$. Последние две формулы, как видно из оценки остаточного слагаемого, указанного в скобках, имеют четвертый порядок аппроксимации. При этом формулы (3.2), (3.5) (а также и некоторые приводимые ниже) позволяют построить явные схемы вычисления значений функции по значениям производных во всех узлах сетки x_i, $i = 1,...,n$.

Кроме того, они позволяют сконструировать различные схемы решения задачи Коши (в том числе и повышенного порядка точности) в общем случае на нерегулярном шаблоне, которые не изложены в классических учебниках. Обобщение приведенных здесь формул для приращений функций на численные схемы решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений приводится в следующем разделе 4 данной работы. Продолжим рассмотрение принципа подобия, основанного на базовых квадратурных формулах.

Одноинтервальная квадратурная формула четвертого порядка аппроксимации экстраполяционного типа порождает следующие две подобные формулы:

$$\hat{I}_i^{i+1} = \frac{h_{i+1}^2}{6H_{i-1}^i}\left[\frac{H_{3i}^{2(i+1)}}{h_{i-1}} f_{i-2} - \frac{3(H_{i-1}^i)^2 + 2h_{i+1}H_{i-1}^i}{h_{i-1}h_i} f_{i-1} + \frac{6h_i H_{i-1}^i + h_{i+1}(3h_{i-1} + 6h_i + 2h_{i+1})}{h_i h_{i+1}} f_i\right] \qquad (3.6)$$

$$\Delta \hat{f}_i = \frac{h_{i+1}^2}{6H_{i-1}^i}\left[\frac{H_{3i}^{2(i+1)}}{h_{i-1}} f_{i-2}' - \frac{3(H_{i-1}^i)^2 + 2h_{i+1}H_{i-1}^i}{h_{i-1}h_i} f_{i-1}' + \frac{6h_i H_{i-1}^i + h_{i+1}(3h_{i-1} + 6h_i + 2h_{i+1})}{h_i h_{i+1}} f_i'\right] \qquad (3.7)$$

Двухинтервальная (трехточечная) обобщенная на нерегулярный шаблон квадратурная формула парабол четвертого порядка на отрезке $\left[x_{i-1}, x_{i+1}\right]$, выражаюшая сумму «удельных» значений интегралов через линейную комбинацию значений f_{i-1}, f_i, f_{i+1} имеет вид:

$$3\left(\frac{1}{h_i^2}\bar{F}_{i-1}+\frac{1}{h_{i+1}^2}\bar{F}_i^{i+1}\right)=\frac{1}{h_i}f_{i-1}+2\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right)f_i+\frac{1}{h_{i+1}}f_{i+1}$$

Подобная ей формула, связывающая приращения функций, преобразуется к виду:

$$3\left(\frac{1}{h_i^2}\Delta\bar{f}_{i-1}+\frac{1}{h_{i+1}^2}\Delta\bar{f}_i\right)=\frac{1}{h_i}f'_{i-1}+2\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right)f'_i+\frac{1}{h_{i+1}}f'_{i+1} \tag{3.8}$$

Интегрирование параболических дифференциальных сплайнов приводит к нижеследующим двум одноинтервальным квадратурным формулам функционально-дифференциального типа:

$$\bar{F}_i^{i+1}=\frac{h_{i+1}}{3}\left(f_i+2f_{i+1}\right)-\frac{h_{i+1}^2}{6}f'_{i+1}\ \left(\frac{5}{24}h_i^4\ M_{3,i}\right),$$

$$\bar{F}_i^{i+1}=h_{i+1}\ f_i+\frac{h_{i+1}^2}{6}\left(2\ f'_i+f'_{i+1}\right)\ \left(\frac{1}{24}h_i^4\ M_{3,i}\right).$$

Подобные им формулы принимают такой вид:

$$\Delta\bar{f}_i=\frac{h_{i+1}}{3}\left(f'_i+2f'_{i+1}\right)-\frac{h_{i+1}^2}{6}f''_{i+1}\ \left(\frac{5}{24}h_i^4\ M_{4,i}\right), \tag{3.9}$$

$$\Delta\bar{f}_i=h_{i+1}\ f'_i+\frac{h_{i+1}^2}{6}\left(2\ f''_i+f''_{i+1}\right)\ \left(\frac{1}{24}h_i^4\ M_{4,i}\right) \tag{3.10}$$

Из интегрально-дифференциальных параболических сплайнов второго типа, приведенных в разделе 6, следует интегрально-дифференциальное параметрическое соотношение, выражающее связь разности удельных интегралов на двух смежных отрезках с линейной комбинацией производных в точках шаблона $\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)$:

$$\frac{\bar{F}_i^{i+1}}{h_{i+1}}-\frac{\bar{F}_{i-1}}{h_i}=\frac{h_i}{6}f'_{i-1}+\frac{h_i+h_{i+1}}{3}f'_i+\frac{h_{i+1}}{6}f'_{i+1}\ .$$

Для этого соотношения подобная формула имеет вид:

$$\frac{\Delta\bar{f}_i}{h_{i+1}}-\frac{\Delta\bar{f}_{i-1}}{h_i}=\frac{h_i}{6}f''_{i-1}+\frac{h_i+h_{i+1}}{3}f''_i+\frac{h_{i+1}}{6}f''_{i+1} \tag{3.11}$$

Обобщение теорем Коши и Лагранжа о среднем значении на основе применения принципа подобия

В математическом анализе для функций, непрерывных на отрезке $[a,b]$ и дифференцируемых на интервале (a,b) весьма значимыми являются теоремы о среднем значении Коши и Лагранжа. Так, для функций $f(x)$ и $g(x)$, удовлетворяющих указанным условиям, теорема Коши сводится к соотношению:

$$\frac{f(b)-f(a)}{g(b)-g(a)}=\frac{f'(c)}{g'(c)} \tag{3.12}$$

Здесь точка $x=c$ принадлежит интервалу (a,b) .

Следствием формулы (3.12) является классическая формула Лагранжа о конечном приращении, которая для функции $f(x)$, непрерывной на отрезке $[a,b]$, и дифференцируемой на (a,b) имеет вид:

$$f(b)-f(a)=f'(c)\,(b-a)\ ,\ \ a\prec c\prec b \tag{3.13}$$

Если формулу (3.12) записать для первообразных функций $F(x), G(x)$, соответствующих $f(x)$ и $g(x)$, то получится формула, подобная (3.12):

$$\frac{F(b)-F(a)}{G(b)-G(a)}=\frac{F'(c)}{G'(c)} \Rightarrow \frac{I_a^b(f)}{I_a^b(g)}=\frac{f(c)}{g(c)} \qquad (3.14)$$

Формула (3.14) связывает отношение определенных интегралов с отношением средних значений функций $f(x)$ и $g(x)$ на интервале (a,b), и поэтому условия теоремы Коши, накладываемые на эти функции, ослабляются, т.е. они могут не быть дифференцируемыми. Если в качестве $g(x)$ взять константу $g(x)=1$, то интеграл $I_a^b(g)=\int_a^b dx=b-a$ и формула (3.14) принимает вид $I_a^b(f)=f(c)\,(b-a)$. (Подчеркнем, что данная формула является подобной формуле Лагранжа). Переписывая последнее соотношение применительно к отрезку $\Delta x_i = x_{i+1}-x_i = h_i$ и принимая $c = x_{i+0.5}$, получим классическую квадратурную формулу прямоугольников: $I_i^{i+1} = f_{i+0.5}\, h_{i+1}$, имеющую третий порядок аппроксимации относительно шага h_i. Формуле Лагранжа (3.13) о конечном приращении также могут быть сопоставлены подобные формулы, имеющими физический смысл.

Переписывая формулу (3.13) для интервала Δx, получаем выражение:

$$\Delta f = f^{/}(c)\,\Delta x\,,\ x_0 \prec c \prec x_0 + \Delta x \qquad (3.15)$$

Построим для этой формулы подобные ей. С этой целью необходимо функции $f(x)$ сопоставить путь $s(t)$ в равномерном прямолинейном движении, приращению Δx сопоставить интервал времени Δt, а производной $f^{/}(x)$ - скорость $V(t)=const$. Тогда при выполнении условий теоремы Лагранжа вместо соотношения (3.15) получится соотношение:

$$\Delta s = V\,\Delta t \qquad (3.16)$$

или $s = s_0 + V_{cp}\,(t-t_0)$. Эта формула соответствует *закону равномерного прямолинейного движения*. Применяя к формуле (3.16) принцип подобия еще раз, т.е. увеличивая порядок производной в этом соотношении на единицу, получим формулу для приращения скорости:

$$\Delta V = V^{/}\,\Delta t$$

или $V = V_0 + a\,(t-t_0)$, где $a = V'$ - есть ускорение. Таким образом, получена *формула для скорости тела при его равноускоренном прямолинейном движении*. Процесс построения данной физической группы может быть продолжен. В следующем по порядку соотношении получится формула для приращения ускорения тела. Подчеркнем, что группа подобия может строиться не только в направлении повышения порядка производной, но и в направлении ее понижения. Например, если в формуле (3.15) понизить порядок производной на единицу и точку $x=c$ совместить с серединой отрезка Δx, то получается указанная выше квадратурная формула прямоугольников:

$$I_i^{i+1} = f_{i+0.5}\, h_{i+1}\,.$$

Если группу подобия выстраивать по этой квадратурной формуле, взяв ее в качестве базовой, то из нее получится как теорема Лагранжа, так и приведенные выше формулы физики.

В заключение данного раздела приведем формулу, подобной формуле расчета определенного интеграла с использованием интегральной суммы Римана. Эти две приближенные формулы (переход к пределу не осуществляется) имеют вид:

$$F(b)-F(a)=\lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{n-1} f(\xi_i)\,\Delta x_i \quad f(b)-f(a)=\lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{n-1} f'(\xi_i)\,\Delta x_i = \int_a^b f'(x)\,dx\,. \qquad (3.17)$$

Последнюю формулу, которая до настоящего времени в численном анализе не применялась, в настоящей работе предлагается использовать в качестве *интегральной нормы* для контроля точности вычисления производных с использованием локальных или глобальных формул численного дифференцирования. Апробация этой формулы производится в разделе 8 данной статьи.

Выводы

1. Сформулирован в обобщенной форме принцип подобия в теории локальной и глобальной аппроксимации производных, интегралов и в численных схемах решения обыкновенных дифференциальных уравнений;
2. Проведено обобщение теорем Коши и Лагранжа о среднем значении на основе принципа подобия. При этом теорема Коши обобщается на случай связи отношения определенных интегралов на отрезке $[a,b]$ от двух непрерывных функций с отношением средних значений этих функций. Установлена связь формулы Лагранжа с формулами физики;
3. На основе теории подобия предложена интегральная норма для контроля точности вычисления производных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы.- М.: Наука, 1983.
2. *Березин И.С., Жидков Н. П.* Методы вычислений. – Т.1,2. –М.: Наука, 1960.
3. *Волков Е.А.* Численные методы. – М.: Наука, 1987.
4. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – М.: Наука, 1978.
5. *Киреев В.И.* Интегро-дифференциальный метод приближения функций алгебраическими многочленами. Вычислительные технологии. - Новосибирск. ИВТ СО РАН,1993.Т.2, №6.
6. *Киреев В.И.* Интегро-дифференциальные сплайны и их приложение к численному дифференцированию и интегрированию.- Депонировано в ВИНИТИ №1673-В93, 1993.
7. *Киреев В.И. , Пантелеев А.В.* Численные методы в примерах и задачах. - М.: Высшая школа, 2004.

Коротко об авторах

Киреев В.И.- профессор кафедры Высшей математики, доктор физико-математических наук,
Киреева О.В. – соискатель кафедры Высшей математики,
Московский государственный горный университет,
Moscow State Mining University, Russia, ud@msmu.ru