

1. Гихман И. И., Скороход А. В., Ядренко М. И. Теория вероятностей и математическая статистика. — Киев: Вища шк., 1979.—407 с.
2. Рсо С. Р. Линейные статистические методы и их приложения. — М.: Наука, 1968.—497 с.
3. Солопченко Г. Н. Определение параметров дробно-рациональной передаточной функции средств измерений по экспериментальным данным. — Метрология: Прил. к журн. «Измер. техника», 1978, 5, с. 25—35.
4. Netto E. Zur Cauchy'schen Interpolationsaufgabe. — Math. Ann., 1893, 42, S. 453—456.
5. Wuytack L. On some aspects of the rational interpolation problem. — SIAM J. Numer. Anal., 1974, 11, N 1, p. 52—60.
6. Wuytack L. On the osculatory rational interpolation problem. — Math. Comput., 1975, 29, N 131, p. 837—843.

Львовский государственный ун-т им. Ив. Франко

Получено 15.02.84

УДК 517.949.8

Р. В. Фильц

ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛОГ ОПЕРАТОРА ГАМИЛЬТОНА

Одним из важнейших этапов разработки численных алгоритмов решения краевых задач математической физики является составление разностных операторов, аппроксимирующих дифференциальные операторы, входящие в ключевые дифференциальные уравнения. Эта процедура выполняется для каждого вновь рассматриваемого оператора в отдельности [1] и при этом не ставится требование, чтобы разностное уравнение, аппроксимирующее исходное тензорное дифференциальное уравнение, сохраняло свойство инвариантности при преобразованиях координат. Игнорирование этого требования приводит в разностную краевую задачу качества, не свойственные исходной дифференциальной краевой задаче, что приводит к зависимости численного решения от выбора системы координат, а при особо неблагоприятном стечении обстоятельств может пагубно отразиться даже на качественной стороне результатов.

Ниже излагается сущность метода, обеспечивающего для дифференциального оператора Гамильтона составление инвариантного разностного аналога.

Рассмотрим в трехмерном евклидовом пространстве скалярную функцию $U = U[x, y, z]$, являющуюся полным полиномом n -й степени. Пусть заданы $P = (3 + n)!(6n!)^2$ точек $Q_p = Q[x_p, y_p, z_p]$ ($p = \overline{1, P}$) и в этих точках известны значения функции U равные соответственно U_1, \dots, U_P . Эти точки будем называть узлами, их совокупность — комплектом, а значения функции в узлах — дискретами. Будем полагать, что узлы не принадлежат одной поверхности n -го порядка, а удовлетворяющий этому условию комплект будем называть несингулярным.

Разложение функции U в ряд Тейлора имеет вид

$$U = u^{(0)} + u^{(x)}x + u^{(y)}y + u^{(z)}z + u^{(xy)}2xy/2! + u^{(yz)}2yz/2! + u^{(zx)}2zx/2! + u^{(x^2)}x^2/2! + u^{(y^2)}y^2/2! + u^{(z^2)}z^2/2! + \dots + u^{(x^n)}x^n/n! + u^{(y^n)}y^n/n! + u^{(z^n)}z^n/n!, \quad (1)$$

где буквы u с верхними индексами, заключенными в скобки, обозначают частные производные функции U по соответствующим независимым переменным, вычисленные в начале координат.

Вводя в рассмотрение P -мерное линейное векторное пространство, представим выражение (1) в виде

$$\text{где} \quad U = \vec{T}\vec{u}, \quad (2)$$

$$\vec{T} = \left(1, x, y, z, \frac{2xy}{2!}, \frac{2yz}{2!}, \frac{2zx}{2!}, \frac{x^2}{2!}, \frac{y^2}{2!}, \frac{z^2}{2!}, \dots, \frac{x^n}{n!}, \frac{y^n}{n!}, \frac{z^n}{n!} \right) \quad (3)$$

— P -мерный вектор-строка, называемый в дальнейшем вектором Тейлора;

$$\vec{u}_* = (u^{(0)}, u^{(x)}, u^{(y)}, u^{(z)}, u^{(xy)}, u^{(yz)}, u^{(zx)}, u^{(x^2)}, u^{(y^2)}, u^{(z^2)}, \dots, u^{(x^n)}, u^{(y^n)}, u^{(z^n)}) \quad (4)$$

— P -мерный вектор-столбец производных при $x = y = z = 0$. Здесь и далее индекс * обозначает транспонирование.

Составив для каждого из узлов комплекта выражение вида (1), приходим к линейной системе алгебраических уравнений

$$U_1 = u^{(0)} + u^{(x)}x_1 + u^{(y)}y_1 + u^{(z)}z_1 + u^{(xy)}2x_1y_1/2! + \dots + u^{(z^n)}z_1^n/n!,$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$U_P = u^{(0)} + u^{(x)}x_P + u^{(y)}y_P + u^{(z)}z_P + u^{(xy)}2x_Py_P/2! + \dots + u^{(z^n)}z_P^n/n!. \quad (5)$$

В векторной записи эта система имеет вид

$$\vec{U}_* = T\vec{u}_*, \quad (6)$$

где $\vec{U}_* = (U_1, \dots, U_P)$, — вектор-столбец дискрет узлов комплекта;

$$T = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 & 2x_1y_1/2! & \dots & z_1^n/n! \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_P & y_P & z_P & 2x_Py_P/2! & \dots & z_P^n/n! \end{pmatrix} \quad (7)$$

— P -мерная квадратная несингулярная матрица, называемая в дальнейшем матрицей Тейлора.

Решив уравнение (6) относительно вектора производных, имеем

$$\vec{u}_* = T^{-1}\vec{U}_*. \quad (8)$$

С учетом (8) выражение (2) принимает вид

$$U = \vec{T}T^{-1}\vec{U}_* = \vec{F}_T\vec{U}_*, \quad (9)$$

где

$$\vec{F}_T = \vec{T}T^{-1} \quad (10)$$

— P -мерный вектор-строка, являющийся оператором, преобразующим вектор-столбец дискрет \vec{U}_* функции U на комплекте узлов в текущее значение этой функции в произвольной точке пространства. Назовем его формантом Тейлора.

Рассмотрим новую систему координат, расположенную таким образом, что ее начало определяется в исходной системе x, y, z координатами x_0, y_0, z_0 , а положения ее осей по отношению к осям исходной системы заданы углами α_{jk} ($j, k = x, y, z$).

Координаты точки Q в исходной и новой системах связаны линейными соотношениями

$$x = \tilde{x} \cos \alpha_{xx} + \tilde{y} \cos \alpha_{yx} + \tilde{z} \cos \alpha_{zx} + x_0,$$

$$y = \tilde{x} \cos \alpha_{xy} + \tilde{y} \cos \alpha_{yy} + \tilde{z} \cos \alpha_{zy} + y_0, \quad (11)$$

$$z = \tilde{x} \cos \alpha_{xz} + \tilde{y} \cos \alpha_{yz} + \tilde{z} \cos \alpha_{zz} + z_0.$$

Подставив (11) в (1), приходим к выражению, которое в силу линейности соотношений (11) также является в общем случае полным полиномом n -й степени. Представим его в виде

$$U = \vec{T}\vec{u}_*, \quad (12)$$

где

$$\vec{T} = \left(1, \tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \frac{2\tilde{x}\tilde{y}}{2!}, \frac{2\tilde{y}\tilde{z}}{2!}, \frac{2\tilde{z}\tilde{x}}{2!}, \frac{\tilde{x}^2}{2!}, \dots, \frac{\tilde{z}^n}{n!} \right), \quad (13)$$

$$\vec{u}_* = \left(u^{(0)}, u^{(\tilde{x})}, u^{(\tilde{y})}, u^{(\tilde{z})}, u^{(\tilde{x}, \tilde{y})}, \dots, u^{(\tilde{z}^n)} \right). \quad (14)$$

— соответственно вектор Тейлора и вектор производных в новой системе координат. Повторив операции, аналогичные выполненным в (7)—(10), находим, что

$$U = \vec{T}\vec{T}^{-1}\vec{U}_* = \vec{F}_T\vec{U}_*, \quad (15)$$

где \vec{T} , \vec{F}_T — соответственно матрица Тейлора и формант Тейлора, составленные в системе \tilde{x} , \tilde{y} , \tilde{z} . Сопоставляя (15) с (9), находим, что $\vec{F}_T = \vec{T}\vec{T}^{-1} = \vec{T}T^{-1} = \vec{F}_T$, т. е. формант Тейлора не зависит от системы координат.

Подставив выражения (11) в вектор (3), получаем следующие формулы преобразования для вектора Тейлора:

$$\vec{T} = \vec{T}\Phi, \quad \vec{T} = \vec{T}\Phi^{-1}, \quad (16)$$

где Φ — P -мерная матрица, определяемая координатами x_0 , y_0 , z_0 и углами α_{jk} , причем $\det \Phi = 1$. Поскольку матрицы T и \vec{T} формируются построчно из векторов \vec{T} и \vec{T} соответственно, то для матрицы Тейлора и обратной ее матрицы справедливы формулы преобразования:

$$T = \vec{T}\Phi, \quad \vec{T} = T\Phi^{-1}, \quad (17)$$

$$T^{-1} = \Phi^{-1}\vec{T}^{-1}, \quad \vec{T}^{-1} = \Phi T^{-1}. \quad (18)$$

Согласно (2), (16), (12)

$$U = \vec{T}\vec{u}_* = \vec{T}\Phi\vec{u}_* = \vec{T}\vec{u}_*$$

и, следовательно, вектор производных преобразуется по формулам

$$\vec{u}_* = \Phi^{-1}\vec{u}_*, \quad \vec{u}_* = \Phi\vec{u}_*. \quad (19)$$

Продифференцировав выражение (6) по переменным x , y , z , имеем

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial \vec{T}}{\partial x}\vec{u}_*, \quad \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{\partial \vec{T}}{\partial y}\vec{u}_*, \quad \frac{\partial U}{\partial z} = \frac{\partial \vec{T}}{\partial z}\vec{u}_*. \quad (20)$$

Частные производные вектора Тейлора имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{T}}{\partial x} &= (0, 1, 0, 0, y, 0, z, x, 0, 0, \dots, x^{n-1}/(n-1)!, 0, 0), \\ \frac{\partial \vec{T}}{\partial y} &= (0, 0, 1, 0, x, z, 0, 0, y, 0, \dots, 0, y^{n-1}/(n-1)!, 0), \\ \frac{\partial \vec{T}}{\partial z} &= (0, 0, 0, 1, 0, y, x, 0, 0, z, \dots, 0, 0, z^{n-1}/(n-1)!), \end{aligned} \quad (21)$$

т. е. они представляют собой векторы, формируемые из тех же элементов, из которых состоит вектор \vec{T} . Поэтому векторы (21) могут быть представлены в виде произведений

$$\frac{\partial \vec{T}}{\partial x} = \vec{T}D_1, \quad \frac{\partial \vec{T}}{\partial y} = \vec{T}D_2, \quad \frac{\partial \vec{T}}{\partial z} = \vec{T}D_3, \quad (22)$$

где D_1, D_2, D_3 — P -мерные квадратные сингулярные матрицы, элементами которых являются нули или единицы.

Градиент функции U с учетом (2), (22), (8) определяется выражением

$$\begin{aligned}\nabla U = \text{grad } U &= \frac{\partial U}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial U}{\partial z} \vec{k} = \vec{T} (D_1 \vec{i} + D_2 \vec{j} + D_3 \vec{k}) \vec{u}_* = \\ &= \vec{T} N \vec{u}_* = \vec{T} N T^{-1} U_* = \vec{F}_H \vec{U}_*.\end{aligned}\quad (23)$$

Здесь $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ — орты по осям x, y, z соответственно;

$$N = D_1 \vec{i} + D_2 \vec{j} + D_3 \vec{k}; \quad (24)$$

$$\vec{F}_H = \vec{T} N T^{-1}. \quad (25)$$

Легко убедиться, что

$$\nabla \vec{T} = \vec{T} N,$$

т. е. умножение вектора Тейлора на матрицу N равносильно действию на этот вектор дифференциального оператора Гамильтона, поэтому матрицу N логично назвать матрицей Гамильтона.

Вектор-строка \vec{F}_H является оператором, преобразующим вектор-столбец дискрет \vec{U}_* функции U на комплексе узлов в текущее значение градиента этой функции в произвольной точке пространства. Назовем вектор \vec{F}_H формантом Гамильтона.

Повторив применительно к системе координат $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ операции, аналогичные изложенным в выражениях (21)—(24), имеем

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial \tilde{x}} &= \vec{T} D_1 \vec{u}_*, \quad \frac{\partial U}{\partial \tilde{y}} = \vec{T} D_2 \vec{u}_*, \quad \frac{\partial U}{\partial \tilde{z}} = \vec{T} D_3 \vec{u}_*, \\ \text{grad } U &= \left(\frac{\partial U}{\partial \tilde{x}} \vec{i} + \frac{\partial U}{\partial \tilde{y}} \vec{j} + \frac{\partial U}{\partial \tilde{z}} \vec{k} \right) = \vec{T} (D_1 \vec{i} + D_2 \vec{j} + D_3 \vec{k}) \vec{u}_* = \\ &= \vec{T} \vec{N} \vec{u}_* = \vec{T} \vec{N} \vec{T}^{-1} \vec{U}_* = \vec{F}_H \vec{U}_*,\end{aligned}\quad (26)$$

где $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ — орты; $\vec{N} = D_1 \vec{i} + D_2 \vec{j} + D_3 \vec{k}$ — матрица Гамильтона; $\vec{F}_H = \vec{T} \vec{N} \vec{T}^{-1}$ — формант Гамильтона в новой системе координат.

Сопоставляя (26) с (23), находим, что формант Гамильтона

$$\vec{F}_H = \vec{T} N T^{-1} = \vec{T} \vec{N} \vec{T}^{-1} = \vec{F}_H \quad (27)$$

не зависит от системы координат.

Преобразовав выражение (26) с учетом (16), (18), приходим к равенству $\vec{T} \Phi N \Phi^{-1} \vec{T}^{-1} = \vec{T} \vec{N} \vec{T}^{-1}$, откуда в силу произвольности вектора \vec{T} и матрицы \vec{T} следуют формулы преобразования матрицы Гамильтона:

$$N = \Phi^{-1} \vec{N} \Phi, \quad \vec{N} = \Phi N \Phi^{-1}.$$

Если задана векторная функция

$$\vec{V} = \vec{V}[x, y, z] = V_x[x, y, z] \vec{i} + V_y[x, y, z] \vec{j} + V_z[x, y, z] \vec{k},$$

то, применив к скалярным функциям V_x, V_y, V_z операции (1)—(10), приходим к выражению

$$\vec{V} = \vec{T} T^{-1} (\vec{V}_x \vec{i} + \vec{V}_y \vec{j} + \vec{V}_z \vec{k}) = \vec{T} T^{-1} \vec{V}_*, \quad (28)$$

где $\vec{V}_{x_*}, \vec{V}_{y_*}, \vec{V}_{z_*}, \vec{V}_*$ — P -мерные вектор-столбцы дискрет в узлах комплекта соответственно для скалярных функций V_x, V_y, V_z и для векторной функции \vec{V} .

Дивергенция функции \vec{V} с учетом (28), (22), (24), (25) определяется выражением

$$\begin{aligned} \nabla \vec{V} &= \text{div } \vec{V} = \frac{\partial \vec{T}}{\partial x} T^{-1} \vec{V}_{x_*} + \frac{\partial \vec{T}}{\partial y} T^{-1} \vec{V}_{y_*} + \frac{\partial \vec{T}}{\partial z} T^{-1} \vec{V}_{z_*} = \\ &= \vec{T} (D_1 T^{-1} \vec{V}_{x_*} + D_2 T^{-1} \vec{V}_{y_*} + D_3 T^{-1} \vec{V}_{z_*}) = \vec{T} N T^{-1} \vec{V}_* = \vec{F}_H \vec{V}_*. \end{aligned} \quad (29)$$

Аналогичным способом легко получить выражение

$$\nabla \times \vec{V} = \text{rot } \vec{V} = \vec{T} N T^{-1} \times \vec{V}_* = \vec{F}_H \times \vec{V}_*. \quad (30)$$

Если для операций $\text{div } \vec{V}$ и $\text{rot } \vec{V}$ повторить все выкладки в системе координат $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$, то с учетом (27) приходим к выражениям

$$\nabla \vec{V} = \vec{F}_H \vec{V}_* = \vec{F}_H \vec{V}_*, \quad \nabla \times \vec{V} = \vec{F}_H \times \vec{V}_* = \vec{F}_H \times \vec{V}_*.$$

Из выражений (23), (29), (30) следует, что вычисление градиента, дивергенции и ротора для функции трехмерного аргумента, представленного усеченным рядом Тейлора, формально сводится к замене дифференциального оператора Гамильтона формантом Гамильтона, а самой функции — вектором ее дискрет на несингулярном комплекте узлов.

Применив формулы (23), (29), (30) к p -му узлу комплекта, получаем разностные выражения, определяющие рассматриваемые инвариантные дифференциальные операции через значение функции в узлах комплекта:

$$\Delta U|_{\vec{r}=\vec{r}_p} = \vec{F}_{H_p} \vec{U}_*, \quad \nabla \vec{V}|_{\vec{r}=\vec{r}_p} = \vec{F}_{H_p} \vec{V}_*, \quad \nabla \times \vec{V}|_{\vec{r}=\vec{r}_p} = \vec{F}_{H_p} \times \vec{V}_*,$$

где \vec{r}_p — радиус-вектор p -го узла; \vec{F}_{H_p} — формант Гамильтона, вычисленный в этом узле. Ввиду независимости форманта Гамильтона от системы координат удобно при вычислении вектора \vec{F}_{H_p} располагать начало системы координат в p -м узле. При этом вектор Тейлора принимает вид $\vec{T} = (1, 0, \dots, 0)$ и тогда, как легко убедиться, $\vec{T}N = (0, i, j, k, 0, \dots, 0)$, поэтому значение форманта Гамильтона вычисляется по выражению $\vec{F}_{H_p} = \vec{i}\tau_2 + \vec{j}\tau_3 + \vec{k}\tau_4$, где τ_2, τ_3, τ_4 — соответственно вторая, третья и четвертая строки обратной матрицы Тейлора, составленной при условии, что начало системы координат расположено в p -м узле.

Полученные результаты применимы при любой степени полинома для произвольного расположения узлов в несингулярном комплекте и непосредственно пригодны для вычислений на ЭВМ.

При принятой степени полинома и заданном несингулярном комплекте узлов изложенный способ реализации инвариантных дифференциальных операций функции и составления инвариантных разностных выражений обеспечивает единственность решения, что непосредственно вытекает из несингулярности матрицы Тейлора.

Приложение

Для полинома третьей степени вектор Тейлора имеет вид

$$\begin{aligned} \vec{T} &= \left(1, x, y, z, \frac{2xy}{2!}, \frac{2yz}{2!}, \frac{2zx}{2!}, \frac{x^2}{2!}, \frac{y^2}{2!}, \frac{z^2}{2!}, \frac{6xyz}{3!}, \right. \\ &\left. \frac{3x^2y}{3!}, \frac{3y^2z}{3!}, \frac{3z^2x}{3!}, \frac{3xy^2}{3!}, \frac{3yz^2}{3!}, \frac{3zx^2}{3!}, \frac{x^3}{3!}, \frac{y^3}{3!}, \frac{z^3}{3!} \right) \end{aligned}$$

и ему соответствует матрица Гамильтона

