УДК 519.6 DOI: 10.18698/2309-3684-2020-4-111119

Сравнение методов вычисления значений специальных функций математической физики

© В.Ф. Апельцин, И.К. Краснов

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Проведен сравнительный анализ двух подходов к вычислению значений многочленов Чебышева с помощью рекуррентных процедур. Первый подход основан на рекурсии вверх по индексу, начиная с наименьшего значения индекса. Второй подход основан на рекурсии вниз, исходя из очевидных асимптотических выражений функций с высокими значениями индекса.

Ключевые слова: *специальные функции, многочлены Чебышева, рекуррентные процедуры, асимптотическое приближение, численный расчет*

Введение. Хорошо известно, что специальные функции математической физики $Q_n(x)$, являясь решениями обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами, удовлетворяют трехчленным рекуррентным соотношениям для трех таких функций с тремя соседними индексами $n-1,\ n,\ n+1$ [1–4]. Это дает возможность, зная значения двух из таких функций при определенном значении аргумента x, вычислить значение третьей при том же значении аргумента, а затем, повторяя процедуру, вычислять значения функций с последующими значениями индексов. Возможна также рекурсия «вниз», отправляясь от значений специальной функции при двух больших значений соседних индексов, полученных тем или иным способом, последовательно вычислять их значения при меньших значениях индекса.

В случае семейства ортогональных многочленов (Лежандра, Эрмитта, Лагерра, Чебышева, и т.д.) два значения этих функций соседних индексов легко вычисляются по явным их представлениям в виде полиномов, как для малых, так и для больших значений индексов. Тем не менее, представляет интерес исследование численных процедур рекурсий «вверх» и «вниз» с точки зрения их точности и быстродействия.

Для цилиндрических функций (Бесселя, Неймана, Ханкеля) ситуация сложнее. Значения этих функций для индексов 0 и 1 могут быть вычислены для широкого диапазона значений аргумента с помощью специализированных стандартных программ, которыми снабжены большинство языков программирования. Это позволяет осуществить рекурсию «вверх». Однако, вычислительная практика показывает, что эта процедура приводит к быстрой потере точности вычислений и недостоверным результатам по мере роста значений индексов, и требует специальных мер для обеспечения приемлемой точности. Например, значительного увеличения длины мантисс в машинном представлении чисел. С другой стороны, реализация рекурсии «вниз» требует знания значений двух функций соседних индексов при больших, по сравнению с аргументом, значениях индексов. Но их можно брать только из асимптотических приближений этих функций, точность которых не представляется возможным оценить. Поэтому, представляет интерес численного эксперимента по вычислению этих функций двумя описанными способами и сравнение полученных значений.

В данной работе мы рассмотрим результаты таких сравнений для многочленов Чебышева.

Теории многочленов Чебышева посвящены разделы многих монографий по математической физике и численному анализу и публикации в соответствующих периодических изданиях, как отечественных [1–7], так и зарубежных [8–13]. Многочисленность этих публикаций свидетельствует о растущем интересе к этим многочленам как к базисным элементам в альтернативе более традиционным численным методам при моделировании физических процессов в сложных неоднородных средах [14]. Остановимся более подробно на работе [7].

Многочлены Чебышева являются частным случаем так называемых многочленов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, удовлетворяющих гипергеометрическому уравнению

$$\left(1-x^2\right)y''+\left[\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)x\right]y'+n(n+\alpha+\beta+1)y=0. \qquad (1)$$

Они ортогональны на интервале $[-1,1]$ с весом

$$h(x)=(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}, \ (\alpha>-1;\beta>-1).$$

При $\alpha=\beta=-\dfrac{1}{2}$ из уравнения (1) следует уравнение

$$\left(1-x^2\right)T_n''(x)-xT_n'(x)+n^2T_n(x)=0$$

для традиционных полиномов Чебышева, являющихся многочленам наилучшего равномерного приближения непрерывных функций. Наряду с обычными полиномами Чебышева используются также присоединенные полиномы Чебышева T_n^m, схожие с присоединенными полиномами Лежандра и связанные с ними соотношением

$$T_n^m(\cos\vartheta)=(-1)^m C_n^m P_{n-m}^m(\cos\vartheta)\sin^m\vartheta.$$

Эти полиномы успешно используются вместо присоединенных полиномов Лежандра $P_n^m(\cos\vartheta)$ при построении решений уравнения Лапласа в сферических координатах:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial Y}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}=0.$$

Обычная схема разделения переменных приводит к частным решениям вида

$$r^n P_n^m(\cos\vartheta)\begin{cases}\cos m\varphi\\ \sin m\varphi\end{cases}.$$

При разложении заданной функции $f(\vartheta,\varphi)$ на сфере в ряд Фурье по присоединенным полиномам Лежандра и тригонометрическим функциям вычисление коэффициентов разложения требует объема вычислений порядка $O(N^3)$. Кроме того, такое разложение не обеспечивает равномерной сходимости рядов на замкнутом интервале $\vartheta\in[0;\pi]$.

В отличие от этого, использование в качестве решений по углу места ϑ при соединенных полиномов Чебышева $T_n^m(\cos\vartheta)$ снижает объем вычислений до $O(N^2\ln N)$, и обеспечивает более быструю равномерную сходимость рядов Фурье на всем замкнутом интервале $\vartheta\in[0;\pi]$, в том числе и в полюсах сферы.

Численная реализация вычислений значений полиномов Чебышева. Многочлены Чебышёва первого рода $T_n(x)$ могут быть определены с помощью рекуррентного соотношения:

$$T_0(x)=1$$
$$T_1(x)=x$$
$$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x). \qquad (2)$$

Соотношение (2), позволяет производить рекурсивный пересчет по мере возрастания величины индекса от $T_n(x)$ и $T_{n-1}(x)$ к $T_{n+1}(x)$ Оно же позволяет от значений $T_n(x)$, $T_{n+1}(x)$ осуществить пересчет значений многочлена с индексом $n-1$:

$$T_{n-1}(x)=2xT_n(x)-T_{n+1}(x).$$

При этом, исходные значения для двух полиномов с большими соседними индексами удобно взять из их явного представления

$$T_n\left(x\right) = \cos\left(\arccos x\right).$$

Кроме того, есть явное представление в виде многочлена [1]

$$T_n\left(x\right) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} C_n^{2k} \left(x^2 - 1\right)^k x^{n-2k}. \tag{3}$$

Представлением (3) можно воспользоваться для контроля точности вычислений другими методами.

Приведем результаты численных расчетов. Рис. 1 демонстрирует графики трех полиномов разных порядков. Чтобы оценить расхождение между значениями, посчитанными через рекурсию, и по формуле суммы, бралась разность этих значений, и возводилась в квадрат (чтобы затем вычислить среднеквадратичную погрешность).

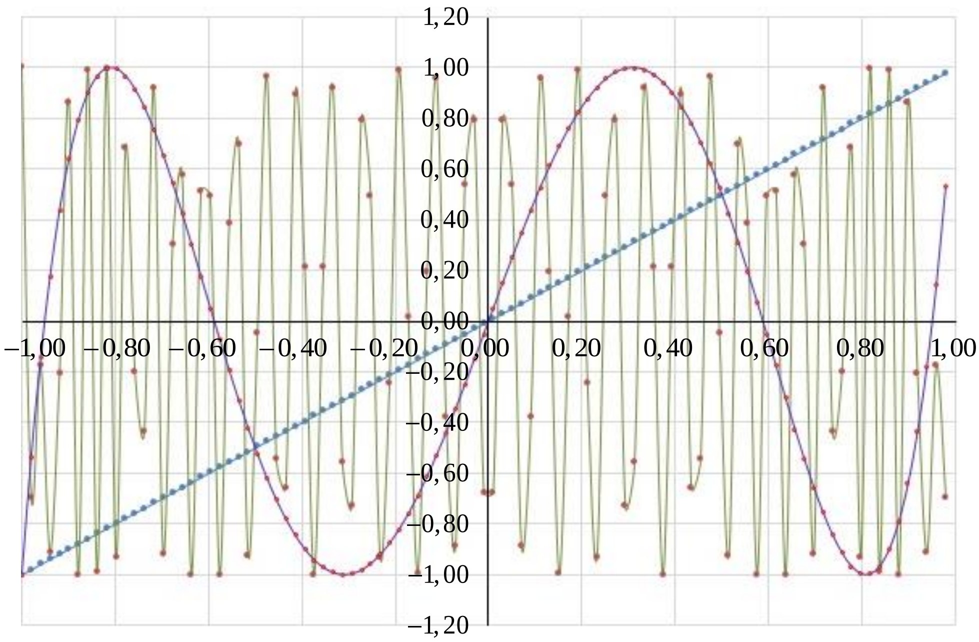

Рис. 1. Графики трех многочленов Чебышева разных порядков: — $T_1(x)$; — $T_5(x)$; — $T_{82}(x)$

Имеющиеся данные квадратов погрешностей в каждой точке для n от 0 до 100 были проанализированы с помощью встроенных инструментов MS Excel и представлены на рис. 2 и рис. 3. Красным обозначены числовые значение равные 0, от белого к салатовому цвету показана степень отличия от 0 (более насыщенный цвет — большее отклонение).

На данных рисунках по вертикали отсчитываются номера полиномов (от 0 до 100 сверху вниз), по горизонтали — точки в которых берутся значения (от –1 до 1 слева направо соответственно). Например, начиная с верхнего левого угла, спускаясь вниз на треть, и вправо на две трети, мы получим значение 33-го полинома, в точке 0,33.

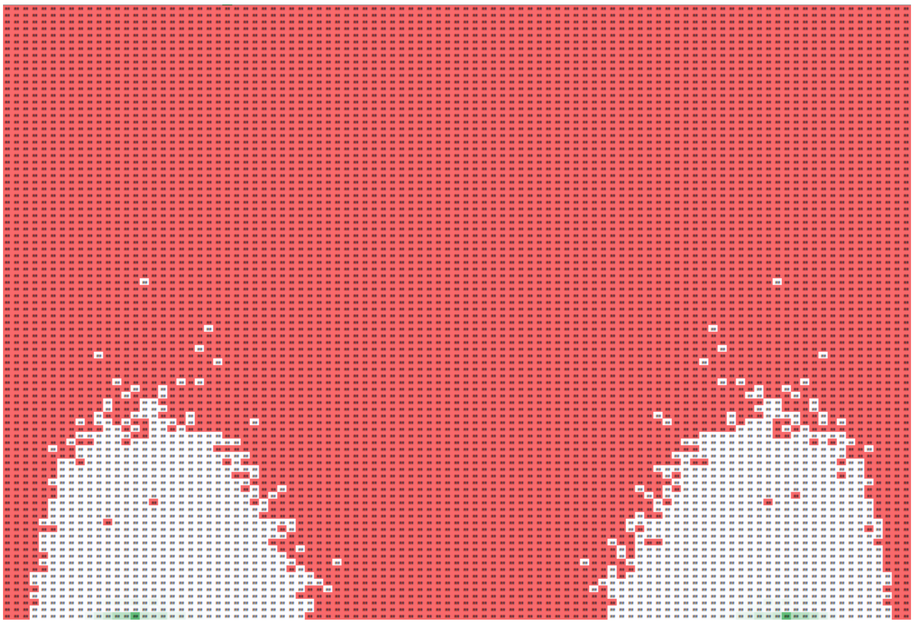

Рис. 2. Анализ квадратов погрешностей методом рекурсии «вверх»

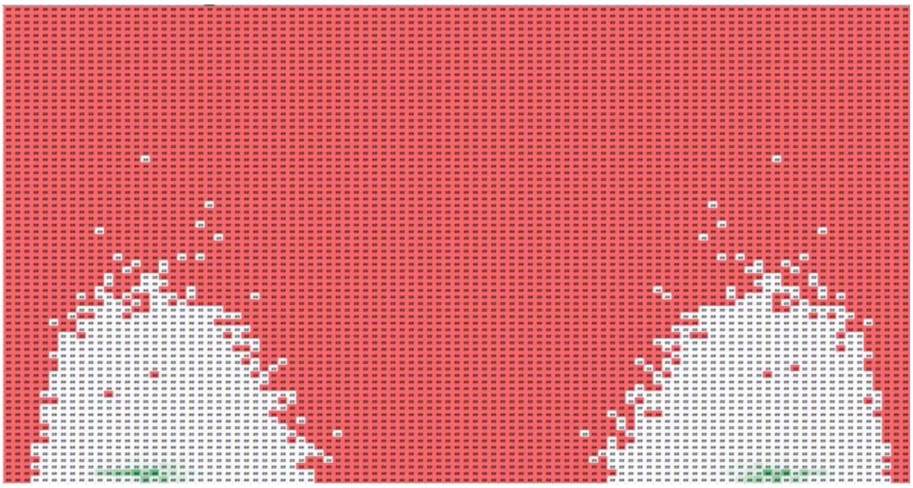

Рис. 3. Анализ квадратов погрешностей методом рекурсии «вниз»

Далее посчитаем сумму всех квадратов отклонений для каждого n и составим по ним графики зависимости общей квадратичной погрешности от n (рис. 4, рис.5).

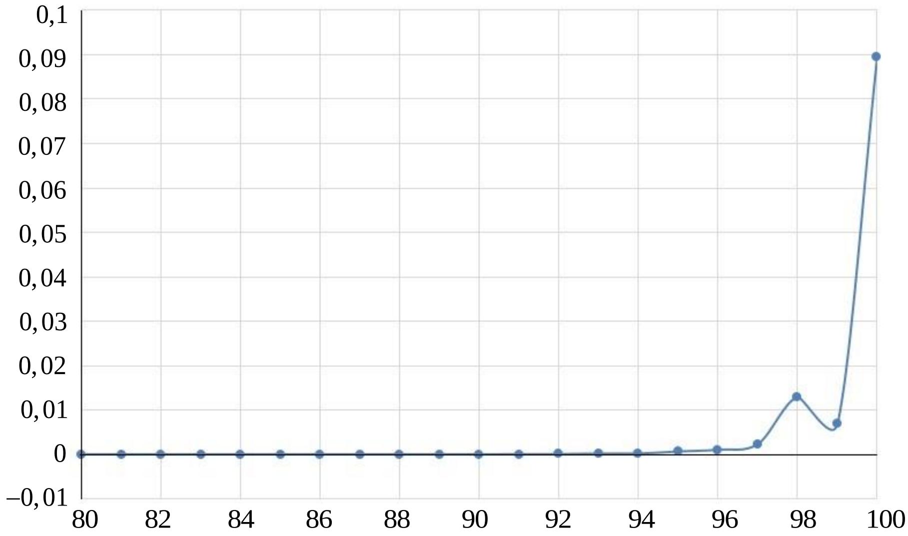

Рис. 4. Общая квадратичная погрешность для метода рекурсии «вверх»

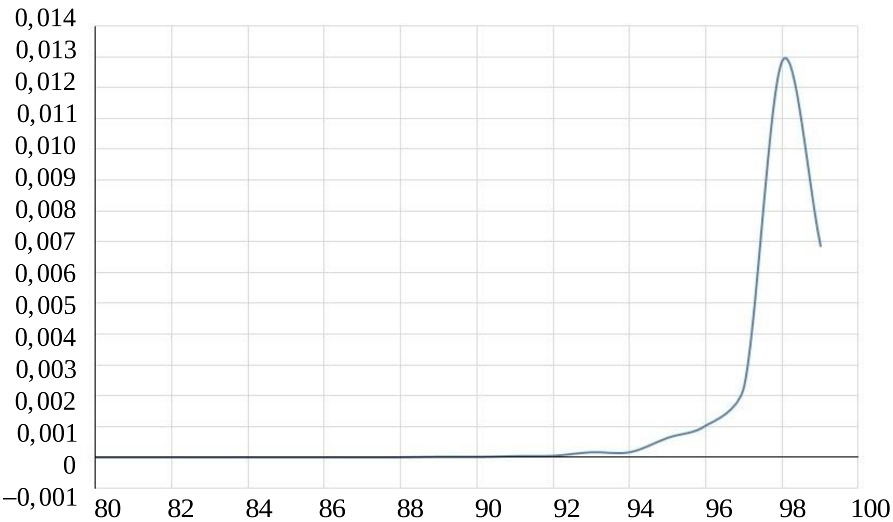

Рис. 5. Общая квадратичная погрешность для метода рекурсии «вниз»

Как видно из цветовой диаграммы таблиц, при возрастании степени полинома погрешность увеличивается с увеличением модуля переменной x (т.к. значения в центре таблицы соответствуют значениям полинома в точке 0, а по левому и правому краю -1 и 1 соответственно), причём в точках -1 и 1 погрешности не наблюдается, т.к. операции выполняются с целыми числами.

На графиках также можно видеть рост погрешности вычислений при росте степени полинома, при этом независимо от выбора метода вычислений. Перегиб графика на рис. 5 связан с тем, что начальные значения полиномов с номерами 99 и 100 были посчитаны по формуле, и погрешность таких вычислений меньше, чем вычислений через рекурсию (поэтому на рис. 4 график идёт вверх после 98, а график на рис. 5 идёт вниз).

Окончательно можно сделать вывод, что погрешность вычислений остаётся предельно малой при любом из вышеперечисленных методов, и существенно меняется только в зависимости от степени полинома. Кроме того, из рис. 5 следует, что метод рекурсии вниз по мере убывания величины индекса дает результаты с нарастанием точности.

Выводы. Проведенный численный анализ позволяет утверждать, что в случае ортогональных полиномов вычисление их значений по рекуррентным формулам дает достаточно точные результаты как при рекурсии по индексу вверх, так и вниз.

Что касается других специальных функций, например, цилиндрических, то ситуация становится сложнее и требует для достижения приемлемой точности вычислений дополнительных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. Москва, Физматгиз, 1962, 1100 с.

[2] Кузнецов Д.С. *Специальные функции*. Москва, Высшая школа, 1962, 248 с.

[3] Кампе де Ферье Ж., Кемпбелл Р., Петьо Г., Фогель Т. *Функции математической физики: справочное руководство*. Москва, Физматгиз, 1963, 102 с.

[4] Васильев Н., Зелевинский А. Многочлены Чебышева и рекуррентные соотношения. *Квант*, 1982, №1, с. 12–19.

[5] Васильев Н.И., Клоков Ю.А., Шкерстена А.Я. *Применение полиномов Чебышева в численном анализе*. Рига, Зинатне, 1984, 240 с.

[6] Хованский А.Г. Полиномы Чебышева и их обращение. *Математическое просвещение*, 2013, вып. 17, с. 93–106.

[7] Фролов А.В., Цветков В.И. О гармоническом анализе действительных функций на сфере. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2004, т. 44, № 11, с. 1964–1971.

[8] Nagle R.K., Saff E.B., Snider A.D. *Fundamentals of Differential Equations*. Boston, Pearson Education Publ., 2012, 719 p.

[9] Reutskiy S.Y., Chen C.S. Approximation of multivariate functions and evaluation of particular solutions using Chebyshev polynomial and trigonometric basis functions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2006, vol. 67, iss. 13, pp. 1811–1829.

[10] Tian H.Y. Reducing order of derivatives and derivation of coefficients for Chebyshev polynomial approximation. *Preprint*, 2006.

[11] Reutskiy S.Y., Chen C.S., Tian H.Y. A boundary meshless method using Chebyshev interpolation and trigonometric basis function for solving heat conductions problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2008, vol. 74, iss. 10, pp. 1621–1644.

[12] Boyce W.E., Diprima R.C., Meade D.B. *Elementary differential equations and boundary value problems*. Hoboken, John Wiley & Sons Publ., 2017, 622 p.

[13] Ding J., Tian H.Y., Chen C.S. The recursive formulation of particular solutions for some elliptic pdes with polynomial source functions. *Communications in Computational Physics*, 2009, vol. 5, iss. 5, pp. 942–958.

[14] Краснов И.К., Мозжорина Т.Ю., Баланин А.Н. Численное моделирование перестройки наноструктуры сплавов методами молекулярной динамики, *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 16, с. 3–16.

Статья поступила в редакцию 15.08.2020

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:
Апельцин В.Ф., Краснов И.К. Сравнение методов вычисления значений специальных функций математической физики. *Математическое моделирование и численные методы*, 2020, № 4, с. 111–119.

Апельцин Виктор Филиппович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана.
e-mail: vapeltcin@hotmail.com

Краснов Игорь Константинович — канд. техн. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана.
e-mail: igorkrasnov@yandex.ru

Comparison of methods for calculating values special functions of mathematical physics

© V.Ph. Apeltsin, I.K. Krasnov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

Comparison of two approaches to calculate values of Chebishev polynomials via recurrent procedures is realized. At that, first approach is based upon recursion upwards with respect to the index starting from the least index value. Second approach is based upon recursion downwards starting from evident asymptotical expressions of the functions with high values of index.

Keywords: *special functions, recurrent procedures, asymptotic approximation, numerical calculation.*

REFERENCES

[1] Gradshtein I. S., Ryzhik I. M. *Tablicy integralov, summ, ryadov i proizvedenii* [Tables of integrals, sums, series and productions]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1962, 1100 p.
[2] Kuznecov D.S. *Special'nye funkcii* [Special functions]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1962, 248 p.
[3] Campe de Ferrier J., Campbell R., Petyo G., Vogel T. *Funkcii matematicheskoi fiziki: spravochnoe rukovodstvo* [Functions of mathematical physics: a reference guide]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1963, 102 p.
[4] Vasiliev N., Zelevinsky A. Mnogochleny Chebysheva i rekurrentnye sootnosheniya [Chebyshev polynomials and recurrent relations]. *Kvant* — *Quantum*. 1982, no. 1, pp. 12–19.
[5] Vasiliev N.I., Klokov Yu.A., Shkerstena A.Ya. *Primenenie polinomov Chebysheva v chislennom analize* [Application of Chebyshev polynomials in numerical analysis]. Riga, Zinatne Publ., 1984, 240 p.

[6] Khovansky A.G. Polinomy Chebysheva i ih obrashchenie [Chebyshev polynomials and their conversion]. *Matematicheskoe prosveshchenie — Mathematical Education*, 2013, iss. 17, pp. 93–106.
[7] Frolov A.V., Tsvetkov V.I. On the harmonic analysis of functions of a real variable on a sphere. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2004, vol. 44, no. 11, pp. 1867–1874.
[8] Nagle R.K., Saff E.B., Snider A.D. *Fundamentals of Differential Equations*. Boston, Pearson Education Publ., 2012, 719 p.
[9] Reutskiy S.Y., Chen C.S. Approximation of multivariate functions and evaluation of particular solutions using Chebyshev polynomial and trigonometric basis functions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2006, vol. 67, iss. 13, pp. 1811–1829.
[10] Tian H.Y. Reducing order of derivatives and derivation of coefficients for Chebyshev polynomial approximation. *Preprint*, 2006.
[11] Reutskiy S.Y., Chen C.S., Tian H.Y. A boundary meshless method using Chebyshev interpolation and trigonometric basis function for solving heat conductions problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2008, vol. 74, iss. 10, pp. 1621–1644.
[12] Boyce W.E., Diprima R.C., Meade D.B. *Elementary differential equations and boundary value problems*. Hoboken, John Wiley & Sons Publ., 2017, 622 p.
[13] Ding J., Tian H.Y., Chen C.S. The recursive formulation of particular solutions for some elliptic pdes with polynomial source functions. *Communications in Computational Physics*, 2009, vol. 5, iss. 5, pp. 942–958.
[14] Krasnov I.K., Mozzhorina T.Yu., Balanin A.N. Numerical modeling of alloys nanostructure rearrangement by means of molecular dynamics methods. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2017, no. 4, pp. 3–16.

Apeltsin V. Ph, Cand. Sc. (Phys.–Math) Assoc. Professor of Computational Mathematics and Mathematical Physics Department, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: vapeltcin@hotmail.com

Krasnov I.K., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor of Computational Mathematics and Mathematical Physics Department, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: igorkrasnov@yandex.ru