УДК 517.392

ПОСТРОЕНИЕ КУБАТУРНЫХ ФОРМУЛ С ПЕРЕМЕНОЙ ШАГА

Л.В.В о й т и ш е к (Новосибирск)

В теории кубатурных формул с регулярным пограничным слоем предполагается, что узлы интегрирования расположены в узлах некоторой периодической решетки Γ_h с фиксированным шагом h. В практике вычислений часто возникает потребность в кубатурных формулах, позволяющих интегрировать с разным шагом в разных частях области интегрирования. Такие формулы всегда можно построить, синтезируя их из элементарных функционалов, каждый из которых имеет нужный шаг интегрирования. Однако этот способ построения, во многих случаях неизбежный, является очень трудоемким и громоздким.

В настоящей работе предложен способ построения кубатурных формул с переменой шага в случае, когда часть области интегрирования, где изменяется шаг, является рациональным многогранником.

Теория кубатурных формул с регулярным пограничным слоем для рациональных многогранников подробно изложена в [1, гл. XIX]. Напомним некоторые определения и основные результаты, необходимые для дальнейшего изложения.

Формула приближенного интегрирования

$$\int_{\Omega} f(x)dx \approx \sum_{hH\gamma\in\Omega} h^n C_\gamma f(hH\gamma) \tag{1}$$

характеризуется функционалом погрешности

$$\ell(x) = \chi_\Omega(x) - \sum_{hH\gamma\in\Omega} h^n C_\gamma \delta(x - hH\gamma).$$

Здесь Ω - область в n-мерном евклидовом пространстве, узлы интегрирования $hH\gamma$ являются точками периодической решетки с матрицей hH, где h - параметр, называемый шагом интегрирования, γ - целочисленный вектор.

В теории кубатурных формул С.Л.Соболева рассматриваются кубатурные формулы с регулярным пограничным слоем, являющиеся аналогом квадратурных формул Грегори. Кубатурные формулы с регулярным пограничным слоем получаются путем суммирования функционалов ошибок с малыми носителями, ортогональных ко всем полиномам степени ниже m и ограниченных в $C^*(\Omega)$, причем там, где это возможно, эти малые функционалы строятся одинаково. Полученная таким образом кубатурная формула имеет один и тот же коэффициент во всех узлах интегрирования кроме тех, которые расположены вблизи границы области и образуют ее пограничный слой. Процесс построения кубатурных формул с регулярным пограничным слоем сильно упрощается для многогранников, которые С.Л.Соболев назвал рациональными.

Любой выпуклый многогранник можно задать системой неравенств

$$A_k = \sum_{i=1}^{n} a_{ki} x_i - b_k \geq 0, \quad k=1,\dots,N. \tag{2}$$

Выпуклый многогранник называется рациональным, если в системе неравенств (2) все коэффициенты a_{ki} рациональны. Назовем гранью многогранника множество точек, в которых часть функций A_k обращается в нуль, а остальные неотрицательны:

$$A_{k_j} = 0, \quad j=1,\dots,\ell. \tag{3}$$

Пусть r - ранг системы (3). Число $s=n-r$ называется размерностью грани. Множество точек, удовлетворяющее системе неравенств

$$A_{k_j} \geq 0, \quad j=1,\dots,\ell, \tag{4}$$

называется ℓ-гранным телесным углом порядка r. Гиперплоскость (3) называется острием телесного угла. Все пространство будем считать углом нулевого порядка.

Пусть $\mu(s)$ - число всех граней размерности s. Перенумеруем все телесные углы и обозначим их через Ω_{js}, где s - размерность острия угла, $j=1,\dots,\mu(s)$.

Нетрудно понять, что если на s-мерной грани рационального многогранника (в уравнениях которой все коэффициенты, включая правые части, рациональны), лежит хотя бы одна точка с целыми координатами, то плоскость этой грани содержит бесконечно много таких точек. Эти точки составляют s-мерную подрешетку основной кубической решетки, и вся кубическая решетка расчленяется на s-мерные подрешетки, расположенные на гиперплоскостях, параллельных плоскости этой грани. Все эти подрешетки инвариантны относительно одной и той же группы сдвигов (вдоль плоскости грани). Последнее свойство позволяет продолжить стандартизацию малых функционалов, выбирая одинаковыми функционалы, которые соответствуют точкам пограничного слоя, находящимся на одной и той же гиперплоскости, параллельной какой-нибудь грани многогранника.

О п р е д е л е н и е 1. Функционал погрешности кубатурной формулы для рационального многогранника M назовем правильно построенным, если выполнено следующее условие: коэффициенты C_γ во всех точках, лежащих вблизи какой-нибудь грани многогранника M на расстоянии не более $2Lh$ от нее и отстоящих от границ этой грани не менее чем на $2Lh$, постоянны на любой гиперплоскости, параллельной этой грани. Здесь L - константа, не зависящая от h.

Пусть $\ell^{(j,s)}$ - функционалы погрешности, построенные для телесных углов многогранника M, рассматриваемых как неограниченные многогранники.

Определение 2. Систему функционалов $\ell^{(j,s)}(x), s=0,\dots,n; j=1,\dots,\mu(s)$, назовем правильно построенной, если выполнены условия:

а) каждый функционал $\ell^{(j,s)}(x)$ правильно построен;

б) коэффициенты в точках, лежащих вблизи общей грани двух телесных углов (быть может, разных порядков), в функционалах обоих углов совпадают.

Теорема 1. Функционал ошибки кубатурной формулы для рационального многогранника является правильно построенным в том и только в том случае, если он представим в виде

$$\ell(x) = \sum_{s=0}^{n} (-1)^s \sum_{j=1}^{\mu(s)} \ell^{(j,s)}(x), \tag{5}$$

где $\ell^{(j,s)}(x)$, $s=0,\dots,n$; $j=1,\dots,\mu(s)$, - правильно построенная система функционалов для телесных углов многогранника.

Функционал $\ell(x)$ будем называть формально ортогональным к полиномам степени не выше m, если преобразование Фурье $\tilde{\ell}(p)$ и все его производные до порядка m обращаются в нуль в начале координат. Для функционалов с ограниченным носителем формальная ортогональность совпадает с обычной ортогональностью функционала к полиномам степени не выше m.

Из теоремы 1 следует, что формальная ортогональность всех функционалов $\ell^{(j,s)}(x)$ правильно построенной системы функционалов влечет за собой ортогональность $\ell(x)$ ко всем полиномам степени не выше m.

Приступим теперь к построению кубатурных формул с переменой шага. Будем предполагать, что для области Ω уже построен функционал $\ell(x)$ с регулярным пограничным слоем для кубической решетки с шагом интегрирования h.

Пусть M - рациональный многогранник с вершинами в узлах кубической решетки, расположенный внутри Ω в той его части, где все коэффициенты функционала $\ell(x)$ равны h^n. Наша задача состоит в построении такого функционала, у которого шаг интегрирования внутри M равен $\bar{h}$, а в области $\Omega \setminus M$ шаг остается прежним, т.е. равным h. Естественно, что такой функционал наряду с пограничным слоем вблизи границы Ω будет иметь пограничный слой вблизи границы многогранника M. Как будет показано ниже, пограничный слой вблизи границы M можно сделать односторонним, сохранив в точках, лежащих вблизи границы M, но вне M, прежнее значение коэффициентов h^n

Поставленную задачу можно решить, вычитая из функционала $\ell(x)$ функционал $\ell_1(x)$ вида

$$\ell_1(x) = \sum_{\bar{h}\gamma\in M} \bar{h}^n C_\gamma \delta(x-\bar{h}\gamma) - \sum_{h\gamma\in M} h^n \delta(x-h\gamma) =$$
$$= \ell_{\bar{h}}(x) - \ell_h(x). \tag{6}$$

Из формулы (6) видно, что функционал $\ell_1(x)$ аннулирует точечную часть функционала $\ell(x)$, относящуюся к внутренности M, и заменяет ее линейной комбинацией δ-функций с носителем, расположенным на решетке с шагом $\bar{h}$.

Функционал

$$\ell(x) - \ell_1(x) = i_\Omega - \sum_{\bar{h}\gamma\in M} \bar{h}^n C_\gamma \delta(x-\bar{h}\gamma) - \sum_{h\gamma\in\Omega\setminus M} h^n C_\gamma \delta(x-h\gamma)$$

и будет искомым функционалом погрешности.

Будем предполагать, что $\ell_{\bar{h}}(x)$ - правильно построенный функционал. Это требование выполнимо, так как $\ell_{\bar{h}}(x)$ - функционал для рационального многогранника. Функционал $\ell_h(x)$ является, очевидно, правильно построенным. По теореме 1, каждый из этих функционалов представим в виде (5). Поэтому

$$\ell_1(x) = \sum_{s=0}^{n} (-1)^s \sum_{j=1}^{\mu(s)} \left(\ell_{\bar{h}}^{(j,s)}(x) - \ell_h^{(j,s)}(x)\right). \tag{7}$$

Для того чтобы $\ell_1(x)$ был ортогонален ко всем полиномам степени не выше m, достаточно потребовать формальную ортогональность к полиномам всех функционалов $\ell_{\bar{h}}^{(j,s)}(x) - \ell_h^{(j,s)}(x) = \ell_1^{(j,s)}(x)$. Покажем, как это можно сделать для n-мерного бруса $0 \le x_i \le a_i$ $i = 1,\dots,n$, у которого все вершины являются узлами как кубической решетки с шагом h, так и решетки с шагом $\bar{h}$. В этом случае достаточно построить функционалы $\ell_1^{(j,s)}(x)$ для тех телесных углов, острия которых проходят через начало координат. Как будет показано ниже, $\ell_{\bar{h}}^{(j,s)}(x)$ можно сделать функционалами с пограничным слоем, потребовав, чтобы коэффициенты $C_\gamma^{(j,s)}$ были отличны от $\bar{h}^n$ только в некоторой полосе, расположенной вблизи границы телесного угла. Телесный угол Ω_{1n} совпадает со всем пространством R^n. Для него

$$\ell_1^{(1,n)}(x) = \sum_\gamma \bar{h}^n \delta(x-\bar{h}\gamma) - \sum_\gamma h^n \delta(x-h\gamma) =$$
$$= \varphi_0\left(\frac{x}{\bar{h}}\right) - \varphi_0\left(\frac{x}{h}\right),$$

где $\varphi_0(x) = \sum_\gamma \delta(x-\gamma)$.

Известно, что преобразование Фурье $\tilde{\varphi}_0(p) = \varphi_0(p)$. Поэтому

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n)}(p) = \bar{h}^n \varphi_0(p\bar{h}) - h^n \varphi_0(ph).$$

В некоторой окрестности начала координат $\tilde{\ell}_1^{(1,n)}(p)=0$, и, значит, $\ell_1^{(1,n)}(x)$ формально ортогонален ко всем полиномам. Телесные углы $\Omega_{j,n-1}$ являются полупространствами $x_j \geq 0$. Справедливо

$$\ell_1^{(1,n-1)}(x)=\bar{h}^{-n}\sum_{\gamma_2,\dots,\gamma_n=-\infty}^{+\infty}\delta(x_2-\bar{h}\gamma_2)\cdot\delta(x_3-\bar{h}\gamma_3)\cdot\ldots\cdot\delta(x_n-\bar{h}\gamma_n)\times$$

$$\times\left(\sum_{\gamma_1=0}^{m}C_{\gamma_1}\delta(x_1-\bar{h}\gamma_1)+\sum_{\gamma_1=m+1}^{\infty}\delta(x_1-\bar{h}\gamma_1)\right)-$$

$$-h^{n}\sum_{\gamma_2,\dots,\gamma_n=-\infty}^{+\infty}\delta(x_2-h\gamma_2)\cdot\ldots\cdot\delta(x_n-h\gamma_n)\cdot\sum_{\gamma_1=0}^{\infty}\delta(x_1-h\gamma_1).$$

При вычислении преобразования Фурье функционала $\ell_1^{(1,n-1)}(x)$ воспользуемся формулой, которую приведем здесь без доказательства,

$$\widetilde{\sum_{\gamma=\ell}^{+\infty}\delta(x-h\gamma)}=-\frac{e^{2\pi i p h\ell}}{e^{2\pi i p h}-1}+\frac{1}{2}\delta(ph).$$ Имеем

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n-1)}(p)=\bar{h}^{-n}\cdot\varphi_0(\bar{h}p_2)\cdot\ldots\cdot\varphi_0(\bar{h}p_n)\times$$

$$\times\left(\sum_{\gamma_1=0}^{m}C_{\gamma_1}e^{2\pi i p_1\bar{h}\gamma_1}-\frac{e^{2\pi i p_1\bar{h}(m+1)}}{e^{2\pi i p_1\bar{h}}-1}+\frac{1}{2}\delta(p_1\bar{h})\right)-$$

$$-h^{n}\varphi_0(hp_2)\cdot\ldots\cdot\varphi_0(hp_n)\left(-\frac{1}{e^{2\pi i p_1 h}-1}+\frac{1}{2}\delta(p_1h)\right).$$

В окрестности начала координат $h\varphi_0(hx)=\delta(x)$. Поэтому в этой окрестности

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n-1)}(p)=\delta(p_2)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\left[\bar{h}\sum_{\gamma_1=0}^{m}C_{\gamma_1}e^{2\pi i p_1\bar{h}\gamma_1}-\right.$$

$$\left.-\frac{\bar{h}e^{2\pi i p_1\bar{h}(m+1)}}{e^{2\pi i p_1\bar{h}}-1}+\frac{1}{2}\delta(p_1)+\frac{h}{e^{2\pi i p_1 h}-1}-\frac{1}{2}\delta(p_1)\right]. \qquad (8)$$

Функция $\frac{e^{zt}}{e^{t}-1}$ является производящей функцией для полиномов Бернулли. Справедливо разложение

$$\frac{e^{zt}}{e^t-1} = \frac{1}{t} + \sum_{q=0}^{\infty} \frac{B_{q+1}(z)\cdot t^q}{(q+1)!}.$$

Воспользовавшись этим разложением и разложив в ряд e^z, получим

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n-1)}(p) = \delta(p_2)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(2\pi i p_1)^q}{q!}\left(\bar{h}^{q+1}\sum_{\gamma_1=0}^{m} C_{\gamma_1}\cdot\gamma_1^q - \right.$$

$$\left. - \frac{\bar{h}^{q+1}B_{q+1}(m+1)}{q+1} + \frac{h^{q+1}B_{q+1}(0)}{q+1}\right) =$$

$$= \delta(p_2)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(2\pi i p_1)^q}{q!}\left(\bar{h}^{q+1}\sum_{\gamma_1=0}^{m}(C_{\gamma_1}-1)\gamma_1^q - \right.$$

$$\left. - \frac{(\bar{h}^{q+1}-h^{q+1})B_{q+1}}{q+1}\right). \tag{9}$$

Последнее равенство следует из свойства полиномов Бернулли, выражаемого формулой

$$B_{q+1}(m+1) = B_{q+1}(0) + (q+1)\sum_{\gamma=0}^{m}\gamma^q,$$

где $B_{q+1}(0) = B_{q+1}$ - числа Бернулли.

Теперь для того, чтобы у $\tilde{\ell}_1^{(1,n-1)}(p)$ был нуль порядка m в начале координат, достаточно потребовать выполнения системы

$$\sum_{\gamma=0}^{m}(C_\gamma-1)\gamma^q = \frac{1-\left(\frac{h}{\bar{h}}\right)^{q+1}}{q+1}\cdot B_{q+1}, \quad q = 0,\ldots,m. \tag{10}$$

Т е о р е м а. Пусть точка $\bar{h}\gamma$ лежит в пограничном слое n-мерного бруса вблизи $n-k$ -мерной его грани M^{n-k} и отстоит от границ этой грани более чем на $m\bar{h}$. Тогда коэффициенты $C_\gamma = C_{\gamma_1,\ldots,\gamma_n}$ можно задать в виде $C_\gamma = C_{i_1}\cdot C_{i_2}\cdot\ldots\cdot C_{i_k}$, где C_ℓ - коэффициенты, удовлетворяющие системе (10), $\bar{h}i_k$ - расстояния точки $\bar{h}\gamma$ от $n-1$ -одномерных граней, определяющих M^{n-k}.

Докажем справедливость этого утверждения при $k=2$ для телесного угла $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$.

Так как функционал $\ell_1^{(1,n-2)}(x)$, по предположению, построен правильно, коэффициенты в точках $\bar{h}\gamma$ при $\gamma_1 > m$, $\gamma_2 > m$ постоянны и равны $\bar{h}^n$; при $\gamma_1 > m$, $\gamma_2 \leq m$ или $\gamma_2 > m$, $\gamma_1 \leq m$ коэффициенты совпадают с коэффициентами в функционалах $\ell_1^{(1,n-1)}(x)$, которые определяются системой (10). В точках, где $\gamma_1 \le m, \gamma_2 \le m$, значения коэффициентов зависят лишь от их расстояний от $n-1$-мерных граней $x_1=0$ и $x_2=0$ и постоянны на каждой гиперплоскости, параллельной $n-2$-мерной грани $x_1=0, x_2=0$. Положим в этих точках $C_\gamma = C_{\gamma_1,\dots,\gamma_n} = C_{\gamma_1} \cdot C_{\gamma_2}$ и покажем, что при таком задании коэффициентов $\tilde{\ell}_1^{(1,n-2)}(p)$ будет иметь нуль порядка m в начале координат.

$$\ell_1^{(1,n-2)}(x) = \phi_0\left(\frac{x_3}{\bar{h}}\right)\cdot\ldots\cdot\phi_0\left(\frac{x_n}{\bar{h}}\right)\cdot\bar{h}^2 \times$$
$$\times\left(\sum_{\gamma_1=0}^{m} C_{\gamma_1}\cdot\delta(x_1-\bar{h}\gamma_1)+\sum_{\gamma_1=m+1}^{\infty}\delta(x_1-\bar{h}\gamma_1)\right)\left(\sum_{\gamma_2=0}^{m} C_{\gamma_2}\delta(x_2-\bar{h}\gamma_2)+\sum_{\gamma_2=m+1}^{\infty}\delta(x_2-\bar{h}\gamma_2)\right)-$$
$$-\phi_0\left(\frac{x_3}{h}\right)\cdot\ldots\cdot\phi_0\left(\frac{x_n}{h}\right)\cdot h^2\cdot\sum_{\gamma_1,\gamma_2=0}^{\infty}\delta(x_1-h\gamma_1)\cdot\delta(x_2-h\gamma_2).$$

Введем обозначения:

$$\psi(p) = \frac{1}{2}\delta(p) - \frac{1}{2\pi i p};$$
$$f_1(p) = \bar{h}\cdot\sum_{\gamma=0}^{m}(C_\gamma - 1)e^{2\pi i p\bar{h}\gamma} - \bar{h}\sum_{q=0}^{\infty}\frac{B_{q+1}}{(q+1)!}(2\pi i p\bar{h})^q;$$
$$f_2(p) = -h\sum_{q=0}^{\infty}\frac{B_{q+1}}{(q+1)!}(2\pi i p h)^q.$$

Нетрудно убедиться в том, что в некоторой окрестности начала координат

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n-2)}(p) = \delta(p_3)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\Big[(f_1(p_1)+\psi(p_1))\times$$
$$\times(f_1(p_2)+\psi(p_2)) - (f_2(p_1)+\psi(p_1))\cdot(f_2(p_2)+\psi(p_2))\Big] =$$
$$= \delta(p_3)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\Big[\psi(p_1)\cdot(f_1(p_2)-f_2(p_2))+\psi(p_2)\cdot(f_1(p_1)-f_2(p_1))+$$
$$+f_1(p_2)\cdot(f_1(p_1)-f_2(p_1))+f_2(p_1)\cdot(f_1(p_2)-f_2(p_2))\Big].$$

Из (8) следует, что

$$\tilde{\ell}_1^{(1,n-1)}(p) = \delta(p_2)\cdot\ldots\cdot\delta(p_n)\cdot\Big[f_1(p_1)-f_2(p_2)\Big].$$

Согласно (9) и (10), $f_1(p)-f_2(p)$ имеет нуль порядка m в начале координат. Поэтому $\tilde{\ell}_1^{(1,n-2)}(p)$ и все его производные порядка не меньшего m равны нулю при $p=0$, т.е. функционал $\tilde{\ell}_1^{(1,n-2)}(x)$ формально ортогонален ко всем полиномам степени не выше m.

Для $3 \le K \le n$ доказательство можно провести по индукции. Функционал с переменой шага $\ell(x) - \ell_1(x)$ теперь можно записать так:

$$\ell(x) - \ell_1(x) = i_\Omega(x) - h^n \cdot \sum_{h\gamma \in \Omega \setminus M} C_\gamma \delta(x - h\gamma) -$$

$$- \bar{h}^n \cdot \prod_{i=1}^{n} \sum_{\gamma_i=0}^{K_i} \bar{C}_{\gamma_i} \delta(x_i - \bar{h}\gamma_i),$$

где

$$K_i = \frac{a_i}{\bar{h}}; \quad \bar{C}_{\gamma_i} = \begin{cases} C_{\gamma_i}, & 0 \le \gamma_i \le m, \\ 1, & m+1 \le \gamma_i \le K_i - m - 1, \\ C_{K_i - \gamma_i}, & K_i - m \le \gamma_i \le K_i. \end{cases}$$

Коэффициенты C_γ при $h\gamma \in \Omega \setminus M$ сохраняют те же значения, которые были в функционале $\ell(x)$.

Литература

1. Соболев С.Л. Введение в теорию кубатурных формул. М., "Наука", 1974, 808 с.
2. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа. Ч.1. М., Физматгиз, 1962, 343 с.