Zeitschrift für Analysis
und ihre Anwendungen
Vol. 10 (1991) 1, p. 93–106

Квадратурные формулы, вытекающие из МКЭ-аппроксимации

С. Г. Михлин †

In einer vorangegangenen Arbeit hatte der Verfasser für Funktionen der Klasse $C^{(s)}[0, 1]$ (s eine beliebige natürliche Zahl) eine FEM-Approximationsformel konstruiert, welche nur von den Werten der Funktion in den Knoten abhängt. Dabei ist eine Fortsetzung der gegebenen Funktion innerhalb der Klasse $C^{(s)}$ auf ein kleines Segment einerseits oder beiderseits des Intervalls $[0, 1]$ erforderlich. Entsprechend erhalten wir zwei Approximationsformeln. Diese integrierend, erhalten wir zwei neue Quadraturformeln, deren Genauigkeit von s abhängt. Die rechte Seite jeder dieser Quadraturformeln ist die Summe der rechten Seite der klassischen Trapezformel und eines gewissen Terms vom Typ einer Grenzschicht. Bei der zweiseitigen Fortsetzung des Integranden wird die Grenzschicht zwar etwas komplizierter, aber die Genauigkeit der Quadraturformel wird auch größer.

В одной из предшествующих работ автора для класса $C^{(s)}$ $[0, 1]$ (s — любое натуральное число) была построена МКЭ-аппроксимация, зависящая только от значений самой функции в узлах сетки. При этом оказывается необходимым продолжить данную функцию с сохранением класса $C^{(s)}$ на малый отрезок по одну или по обе стороны отрезка $[0, 1]$. Соответственно получаются две аппроксимационные формулы; проинтегрировав их, получим две новые квадратурные формулы, точность которых зависит от s. Правая часть каждой из них есть сумма правой части классической формулы трапеций и некоторого выражения типа пограничного слоя. При двустороннем продолжении подынтегральной функции пограничный слой несколько усложняется, но точность квадратурной формулы возрастает.

The author has constructed in one of his preceeding papers a FEM-approximation formula for functions of the class $C^{(s)}[0, 1]$ (s an arbitrary natural number) which depends only on the values of the given function at the knots of the net. This construction demands to continue the given function (with preserving the class $C^{(s)}$) on a little segment of one or both sides of the segment $[0, 1]$. Accordingly one obtains two approximate formulae. Integrating them one obtains two quadrature formulae which accuracy depends from s. The right-hand side of every of them is the sum of the right-hand side of the classical trapezoid rule and some boundary layer. If one use bilateral continuation, then the boundary layer becomes a little more complicated, but the accuracy of the quadrature formula increases.

Введение

Пусть $u = u(t)$ — произвольная функция, скажем, вещественной переменной, определенная и интегрируемая на некотором промежутке $[a, b]$. Любая аппроксимационная формула для этой функции, будучи проинтегрирована на указанном промежутке, порождает некоторую квадратурную формулу. *Метод конечных элементов* (МКЭ) является источником многих аппроксимационных формул и, соответственно, многих квадратурных (кубатурных, если t — точка многомерного пространства) формул. Некоторые такие формулы получены в [1 : Гл. X]. В частности, как показано в [1], таким путем можно получить классическую формулу Эйлера — Маклорена, а также оценку ее погрешности. В той же монографии [1] получены две кубатурные формулы для функций, заданных в кубе или в шаре; эти формулы также основаны на МКЭ-аппроксимации подынтегральной функции.

В данной статье строятся две новые квадратурные формулы, исходя из МКЭ-аппроксимации с пограничным слоем (см. [1: Гл. VIII, § 6]); в качестве исходной системы берется система кусочно полиномиальных функций, удовлетворяющих усиленным фундаментальным соотношениям. Построение МКЭ-аппроксимации в данном случае требует продолжения данной функции, с сохранением класса, за отрезок, на котором она задана первоначально. При этом продолжение можно строить либо за один из концов названного отрезка, либо за оба; соответственно получаются две квадратурные формулы.

Глава I. Одностороннее продолжение

§ 1. Первоначальный вид квадратурной формулы, оценка ее погрешности аппроксимации

Пусть s натуральное число, t — вещественная переменная и $\{\omega_{qs}\}_{q=0,1,\dots,s-1}$ — система s кусочно полиномиальных исходных функций степени $2s-1$, описанных в [1: стр. 14]. Напомним ее основные свойства; в отличие от [1], примем, что $\operatorname{supp}\omega_{qs}=[-1,1]$. Система $\{\omega_{qs}\}$ удовлетворяет „усиленным фундаментальным соотношениям"

$$\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{i=0}^{s}\frac{(1-i)^{\gamma-q}}{(\gamma-q)!}\,\omega_{qs}(t-i)=\frac{t^\gamma}{\gamma!},\quad 0\le\gamma\le 2s-1; \tag{1.1}$$

самые функции ω_{qs} определяются на своем носителе формулой

$$q!\,\omega_{qs}(t)=\begin{cases}(1-t)^s t^q\sum\limits_{k=0}^{s-q-1}a_k^{(s)}t^k & (0\le t\le 1)\\ (1+t)^s t^q\sum\limits_{k=0}^{s-q-1}(-1)^k a_k^{(s)}t^k & (-1\le t\le 0),\end{cases}\qquad a_k^{(s)}=\binom{s+k-1}{k}. \tag{1.2}$$

Из неё вытекает, в частности, что $\omega_{qs}^{(\alpha)}(-t)=(-1)^{q-\alpha}\omega_{qs}^{(\alpha)}(t)$. Пусть $u\in C^{(s)}[a,b]$. МКЭ-аппроксимация u^h функции u по исходной системе $\{\omega_{qs}\}$, как известно, определяется формулой

$$u^h(t)=\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{i=0}^{2n}h^q u^{(q)}(a+jh)\,\omega_{qs}(t/h-j),\qquad h=(b-a)/2n; \tag{1.3}$$

Оценим разность $u(t)-u^h(t)$ в предположении, что $a=0$, $b=1$, $u\in C^{(2s)}[0,1]$. Выберем произвольное целое значение j_0, $0\le j_0\le 2n$, и положим $t_0=j_0h$, $t=t_0+\tau h$, $0\le\tau\le 1$, так что t будет изменяться в пределах от t_0 до t_0+h. Имеем

$$u(t)-u^h(t)=u(t_0+\tau h)-\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{j=0}^{2n}h^q u^{(q)}(jh)\,\omega_{qs}\big(\tau-(j-j_0)\big).$$

Вычитаемое может быть отлично от тождественного нуля только, если $j = j_0$ или $j = j_0 + 1$, поэтому последняя формула упрощается:

$$u(t) - u^h(t) = u(t_0 + \tau h) - \sum_{q=0}^{s-1} [h^q u^{(q)}(t_0)\, \omega_{qs}(\tau) + h^q u^{(q)}(t_0 + h)\, \omega_{qs}(\tau - 1)].$$

Разложим $u(t_0 + \tau h)$ по строке Тейлора до остаточного члена с производной $u^{(2s)}$, а $u^{(q)}(t_0 + h)$ — до остаточного члена с производной того же порядка $2s$, и подставим это сюда. В силу фундаментальных соотношений (1.1) главные члены строк Тейлора исчезнут и останется равенство

$$u(t) - u^h(t) = h^{2s}\left[\frac{t^{2s}}{(2s)!} u^{(2s)}(\xi)\, \omega_{qs}(\tau) - \sum_{q=0}^{s-1} \frac{1}{(2s-q)!} u^{(2s)}(\xi')\, \omega_{qs}(\tau - 1)\right].$$

Здесь ξ и ξ' некоторые точки промежутков $(t_0, t_0 + \tau h)$ и $(t_0, t_0 + h)$ соответственно. Для рассматриваемых здесь кусочно полиномиальных функций ω_{qs} верно неравенство $|\omega_{qs}(\tau)| \leqq 1/q!$ [2: формула (10.1.9)], и из последнего равенства следует

$$|u(t) - u^h(t)| \geqq \frac{h^{2s}}{(2s)!}\left[1 + \sum_{q=0}^{s-1} \frac{(2s)!}{(2s-q)!\,q!}\right] \|u^{(2s)}\|_C.$$

Сумма в квадратных скобках есть сумма возрастающих коэффициентов бинома Ньютона степени $2s$ минус центральный коэффициент, равный $(2s)!/(S!)^2$; равноотстоящие от концов коэффициенты бинома равны между собой, а сумма всех его коэффициентов равна 2^{2s}. Отсюда ясно, что эта сумма равна $2^{-1}(2^{2s} - (2s)!/(s!)^2)$, и мы приходим к оценке

$$|u(t) - u^h(t)| \leqq \frac{h^{2s}}{(2s)!}\left[1 + \frac{1}{2}\left(2^{2s} - \frac{(2s)!}{(s!)^2}\right)\right] \|u^{(2s)}\|_C. \tag{1.4}$$

Эту оценку можно несколько упростить, сделав ее чуть более грубой, если заметить, что центральный коэффициент бинома Ньютона степени $2s$ равен 2 при $s = 1$ и больше 2 при $s > 1$, так что

$$|u(t) - u^h(t)| \leqq \left((2h)^{2s} 2(2s)!\right) \|u^{(2s)}\|_C. \tag{1.5}$$

Из формулы (1.3) можно исключить производные, добавив при этом некоторую новую погрешность [1: Гл. VIII, § 6]. Найдем такие коэффициенты $c_{ql}^{(s)}$, чтобы

$$h^q u^{(q)}(t) = \sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)}\, u(t + lh) + O(h^{2s}). \tag{1.6}$$

Разложим $u(t + lh)$ по строке Тейлора:

$$u(t + lh) = \sum_{r=0}^{2s-1} \frac{u^{(r)}(t)}{r!} l^r h^r + \frac{l^{2s} h^{2s}}{(2s)!} u^{(2s)}(\xi).$$

Подставим это в (1.6):

$$h^q u^{(q)}(t) = \sum_{l=0}^{2s-1} \sum_{r=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} \frac{u^{(r)}(t)}{r!} l^r h^r + \sum_{l=0}^{2s-1} \frac{l^{2s} h^{2s}}{(2s)!} \theta_{q,l} \|u^{(2s)}\|_C,$$

$|\theta_{q,l}| < 1$. Отсюда получается s систем для искомых коэффициентов:

$$\sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} l^r = \delta_{qr} r!, \qquad r = 0, 1, \ldots, 2s - 1 \tag{1.7}$$

($q = 0, 1, \ldots, s-1$; δ_{qr} — символ Кронекера). Их общий определитель есть определитель Вандермонда чисел $0, 1, \ldots, 2s-1$; он отличен от нуля, и коэффициенты $c_{ql}^{(s)}$ определяются единственным образом. Заметим, что при $q = 0$ решение системы (1.7) очевидно: $c_{0l} = \delta_{0l}$.

Заменив в формуле (1.3) производные по формуле (1.6), получим

$$u^h(t) = \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{j=0}^{2n} \sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u\big((j+l)\,h\big)\, \omega_{qs}(t/h - j) + R(t, s, h), \tag{1.8}$$

где

$$R(t, s, h) = \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{j=0}^{2n} \sum_{l=0}^{2s-1} \theta_{q,t}(l^{2s}h^{2s}/(2s)!)\, \|u^{(2s)}\|_C$$

и, следовательно,

$$|R(t, s, h)| \leqq 2ns \sum_{l=0}^{s-1} \frac{l^{2s}h^{2s}}{(2s)!} \|u^{(2s)}\|_C = \frac{\|u^{(2s)}\|_C}{2(2s-1)!}\, h^{2s-1} \sum_{l=1}^{2s-1} l^{2s}.$$

Тройную сумму в (1.8) обозначим через $\hat{u}^h(t)$. Тогда

$$u(t) = \hat{u}^h(t) + \theta_t R(s, h), \qquad |\theta_t| \leqq 1, \tag{1.9}$$

где

$$R(s, h) = \left[\frac{(2h)^{2s}}{2(2s)!} + \frac{h^{2s-1}}{2(2s-1)!} \sum_{l=1}^{2s-1} l^{2s}\right] \|u^{(2s)}\|_C. \tag{1.10}$$

Проинтегрировав тождество (1.9) по t в пределах от 0 до 1, получим квадратурную формулу

$$\int_0^1 u(t)\,dt \approx \int_0^1 \hat{u}^h(t)\,dt$$

$$= \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{j=0}^{2n} \sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u\big((j+l)\,h\big) \int_0^1 \omega_{qs}(t/h - j)\,dt,$$

погрешность аппроксимации которой оценивается величиной (1.10).

Заметим, что для построения функции $\hat{u}^h$ необходимо продолжить u с сохранением класса на промежуток $\big(1, (2s-1)\,h\big)$. Такое продолжение можно реализовать в виде полинома степени $2s-1$, представляющего собой главную часть строки Тейлора для функции u в точке 1.

§ 2. Вычисление интегралов от исходных функций

Интегрирование функции $\hat{u}^h$ выполним следующим образом. Возьмем целое число j_0, $0 \leqq j_0 \leqq 2n-1$, положим $j_0 h = t_0$ и проинтегрируем $\hat{u}^h$ в пределах от $j_0 h$ до $(j_0+1)\,h$. Положим еще $t = t_0 + \tau h$, $0 \leqq \tau \leqq 1$ и $j + l = k$. Тогда

$$\int_{j_0 h}^{(j_0+1)h} \hat{u}^h(t)\,dt = h \sum_{k=0}^{2n+2s-1} \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u(kh)\, \omega_{qs}\big(\tau - (k - j_0 - l)\big)\,d\tau.$$

Носитель функции ω_{qs} есть отрезок $[-1, +1]$, интеграл в последней формуле справа отличен от нуля только при значениях $k = j_0 + l$ и $k = j_0 + l + 1$, и последнее равенство принимает следующий вид:

$$\int_{j_0h}^{(j_0+1)h} \hat{u}^h(t)\,dt = h\left[\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u\big((j_0+l)\,h\big)\int_0^1 \omega_{qs}(\tau)\,d\tau\right.$$

$$\left.+\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{l=0}^{2s-1} u\big((j_0+l+1)\,h\big)\int_0^1 \omega_{qs}(\tau-1)\,d\tau\right]. \tag{2.1}$$

Вычислим интегралы справа. Из соотношений (1.2) вытекает, что $\omega_{qs}(t) = t^q\psi_{qs}(t)/q!$, где $\psi_{qs}(t) = (1-t)^s\,(a_0^{(s)} + a_1^{(s)}t + \cdots + a_{s-q-1}^{(s)}t^{s-q-1})$. Отсюда в свою очередь вытекает, что

$$\psi_{qs}(1) = 0, \quad \psi_{qs}'(t) = -s\binom{2s-q-1}{s}t^{s-q-1}(1-t)^{-1}.$$

Теперь

$$\alpha_{qs} := \int_0^1 \omega_{qs}(\tau)\,d\tau = \frac{1}{q!}\int_0^1 \tau^q\psi_{qs}(\tau)\,d\tau$$

$$= -\frac{1}{(q+1)!}\int_0^1 \tau^{q+1}\psi_{qs}'(\tau)\,d\tau = \frac{s}{(q+1)!}\binom{2s-q-1}{s}B(s+1,s)$$

$$= \binom{s}{q+1}\frac{(2s-q-1)!}{(2s)!}, \tag{2.2}$$

где B есть бэта-функция Эйлера. Далее,

$$\int_0^1 \omega_{qs}(\tau-1)\,d\tau = \int_0^1 \omega_{qs}(-\tau)\,d\tau = (-1)^q\int_0^1 \omega_{qs}(\tau)\,d\tau = (-1)^q\,\alpha_{qs}.$$

Приведём таблицу значений α_{qs} для значений s, $1 \leqq s \leqq 6$:

q ↓ s →	1	2	3	4	5	6
0	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
1		1/12	1/10	3/28	1/9	5/44
2			1/120	1/84	1/72	1/66
3				1/1680	1/1008	1/792
4					1/30240	1/15840
5						1/665280

Формулу (2.1) перепишем с учетом полученных значений интегралов:

$$\int_{j_0h}^{(j_0+1)h} \hat{u}^h(t)\,dt = h\left[\sum_{q=0}^{s-1}\alpha_{qs}\sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u\big((j_0+l)\,h\big)\right.$$

$$\left.+\sum_{q=0}^{s-1}(-1)^q\alpha_{qs}\sum_{l=0}^{2s-1} c_{ql}^{(s)} u\big((j_0+l+1)\,h\big)\right].$$

Последнее равенство просуммируем по j_0 от 0 до $2n-1$:

$$\int_0^1 \tilde{u}^h(t)\,dt = h\left[\sum_{j_0=0}^{2n-1}\sum_{q=0}^{s=1}\sum_{l=0}^{2s-1}\alpha_{qs}C_{ql}^{(s)}u\big((j_0+l)\,h\big)\right.$$
$$\left.+\sum_{j_0=0}^{2n-1}\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{l=0}^{2s-1}(-1)^q\,\alpha_{qs}c_{ql}^{(s)}u\big((j_0+l+1)\,h\big)\right]. \tag{2.3}$$

В первой сумме выделим члены с $j_0=0$, а во второй — члены с $j_0=2n-1$. Выражение (2.3) преобразуется так:

$$\int_0^1 \tilde{u}^h(t)\,dt = h\left\{\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{l=0}^{2s-1}\sum_{j_0=1}^{2n-1}\alpha_{qs}[1+(-1)^q]\,c_{ql}^{(s)}u\big((j_0+l)\,h\big)\right.$$
$$\left.+\sum_{q=0}^{s-1}\sum_{l=0}^{2s-1}\alpha_{qs}c_{ql}^{(s)}[u(lh)+(-1)^q u(1+lh)]\right\}. \tag{2.4}$$

Рассмотрим тройную сумму здесь. Положим $j_0+l=k$; индекс k меняется в пределах от 1 до $2n+2s-2$. Заметим, что при $l=0$ будет $k=j_0$ и индекс k меняется от 1 до $2n-1$. Заметим еще, что слагаемое $u(k)$ встречается несколько, скажем λ_k, раз. Переставим суммирование по l и k, тогда рассматриваемая сумма принимает вид

$$h\sum_{q=0}^{s-1}\alpha_{qs}[1+(-1)^q]\sum_{k=1}^{n+2s-2}u(kh)\sum_{l=0}^{2s-1}c_{ql}^{(s)}.$$

Из уравнений (1.7) при $r=0$ находим

$$\sum_{l=0}^{2s-1}c_{ql}^{(s)} = \delta_{q0}\cdot 0! = \begin{cases}1, & q=0,\\ 0, & q>0,\end{cases}$$

и рассматриваемая сумма оказывается достаточно простой: она равна

$$2h\alpha_{0s}u(jh) = h\sum_{j=1}^{2s-1}u(jh). \tag{2.5}$$

Из двойной суммы в (2.4) выделим члены с $q=0$. При этом $\alpha_{0s}=1/2$ и $c_{00}^{(s)}=1$; $c_{0l}^{(s)}=0$ для $l>0$; из суммы по l останется лишь член с $l=0$, равный $h[u(0)+u(1)]/2$. Присоединив его к сумме (2.5), получим правую часть формулы трапеций. Остается выражение

$$h\sum_{q=1}^{2s-1}\alpha_{qs}\sum_{l=0}^{2s-1}c_{ql}^{(s)}[u(lh)+(-1)^q\,u(1+lh)].$$

Окончательно интересующая нас квадратурная формула принимает вид

$$\int_0^h u(t)\,dt \approx h\left[\frac{u(0)+u(1)}{2}+\sum_{j=1}^{2n-1}u(jh)\right]$$
$$+\sum_{q=1}^{s-1}\alpha_{qs}\sum_{l=0}^{2s-1}C_{ql}^{(s)}[u(lh)+(-1)^q\,u(1+lh)]. \tag{2.6}$$

Правая часть этой формулы естественно распадается на две части. Одна из них есть правая часть классической формулы трапеций; вторую часть мы, следуя С. Л. Соболеву [3: стр. 704], назовем *пограничным слоем* формулы (2.6).

§ 3. Вычисление коэффициентов $c_{ql}^{(s)}$

Чтобы воспользоваться формулой (2.6), надо предварительно вычислить коэффициенты $c_{ql}^{(s)}$. Для этого достаточно решить системы (1.7). В данном параграфе мы вычислим эти коэффициенты для значений $s = 2, 3, 4$. На этих примерах станет ясен сравнительно простой прием, позволяющий достаточно быстро провести исключение неизвестных по методу Гаусса. Для упрощения записи обозначим $\gamma_l = c_{ql}^{(s)}$, $l = 0, 1, \ldots, 2s-1$; нужно иметь в виду, что γ_l зависит еще от s и q.

1. Если $s = 2$, то q принимает только одно значение 1. Напишем единственную в этом случае систему (1.7):

$$\begin{aligned}
\gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 &= 0,\\
\gamma_1 + 2\gamma_2 + 3\gamma_3 &= 1,\\
\gamma_1 + 4\gamma_2 + 9\gamma_3 &= 0,\\
\gamma_1 + 8\gamma_2 + 27\gamma_3 &= 0.
\end{aligned}$$

Эта система решается просто; ее решение есть $\gamma_0 = c_{10}^{(2)} = -11/6$, $\gamma_1 = c_{11}^{(2)} = 3$, $\gamma_2 = c_{12}^{(2)} = -3/2$, $\gamma_3 = c_{13}^{(2)} = 1/3$.

2. Пусть теперь $s = 3$, $2s - 1 = 5$, q принимает два значения 1 и 2. Соответствующие две системы (1.7) запишем так:

$$\begin{array}{rcrcrcrcrcrl|c|c}
 & & & & & & & & & & & & q=1 & q=2\\ \hline
\gamma_0 + \gamma_1 &+& \gamma_2 &+& \gamma_3 &+& \gamma_4 &+& \gamma_5 &=& & & 0 & 0\\
\gamma_1 &+& 2\gamma_2 &+& 3\gamma_3 &+& 4\gamma_4 &+& 5\gamma_5 &=& & & 1 & 0\\
\gamma_1 &+& 4\gamma_2 &+& 9\gamma_3 &+& 16\gamma_4 &+& 25\gamma_5 &=& & & 0 & 2\\
\gamma_1 &+& 8\gamma_2 &+& 27\gamma_3 &+& 64\gamma_4 &+& 125\gamma_5 &=& & & 0 & 0\\
\gamma_1 &+& 16\gamma_2 &+& 81\gamma_3 &+& 256\gamma_4 &+& 625\gamma_5 &=& & & 0 & 0\\
\gamma_1 &+& 32\gamma_2 &+& 243\gamma_3 &+& 1024\gamma_4 &+& 3125\gamma_5 &=& & & 0 & 0
\end{array} \qquad (3.1)$$

Достаточно рассмотреть систему (3.1), из которой отброшено первое уравнение. Неизвестную γ_1 исключим, вычитая каждое предшествующее уравнение из последующего:

$$\begin{array}{rcrcrcrl|c|c}
 & & & & & & & & q=1 & q=2\\ \hline
2\gamma_2 &+& 6\gamma_3 &+& 12\gamma_4 &+& 20\gamma_5 &= & -1 & 2\\
4\gamma_2 &+& 18\gamma_3 &+& 48\gamma_4 &+& 100\gamma_5 &= & 0 & -2\\
8\gamma_2 &+& 54\gamma_3 &+& 192\gamma_4 &+& 500\gamma_5 &= & 0 & 0\\
16\gamma_2 &+& 162\gamma_3 &+& 768\gamma_4 &+& 2500\gamma_5 &= & 0 & 0
\end{array} \qquad (3.2)$$

Введем новые неизвестные $\delta_2 = 2\gamma_2$, $\delta_3 = 6\gamma_3$, $\delta_4 = 12\gamma_4$, $\delta_5 = 20\gamma_5$. Система (3.2) перейдет в следующую систему с матрицей Вандермонда чисел 2, 3, 4, 5:

$$\begin{array}{rcrcrcrl|c|c}
 & & & & & & & & q=1 & q=2\\ \hline
\delta_2 &+& \delta_3 &+& \delta_4 &+& \delta_5 &= & -1 & 2\\
2\delta_2 &+& 3\delta_3 &+& 4\delta_4 &+& 5\delta_5 &= & 0 & -2\\
4\delta_2 &+& 9\delta_3 &+& 16\delta_4 &+& 25\delta_5 &= & 0 & 0\\
8\delta_2 &+& 27\delta_3 &+& 64\delta_4 &+& 125\delta_5 &= & 0 & 0
\end{array}$$

Неизвестную δ_2 исключим, как и выше, вычитая из каждого последующего уравнения предыдущее, умноженное на 2:

	$q=1$	$q=2$
$\delta_3 + 2\delta_4 + 3\delta_5 =$	2	-6
$3\delta_3 + 8\delta_4 + 15\delta_5 =$	0	4
$9\delta_3 + 32\delta_4 + 75\delta_5 =$	0	0

Положив тепер $\varkappa = \delta_3$, $\varkappa_4 = 2\delta_4$, $\varkappa_5 = \delta_5$, получим систему 3-го порядка с матрицей Вандермонда чисел 3, 4, 5:

	$q=1$	$q=2$
$\varkappa_3 + \varkappa_4 + \varkappa_5 =$	2	-6
$3\varkappa_3 + 4\varkappa_4 + 5\varkappa_5 =$	0	4
$9\varkappa_3 + 16\varkappa_4 + 25\varkappa_5 =$	0	0

Теперь исключаем неизвестную $\varkappa_3$, вычитая из каждого последующего уравнения предыдущее, умноженное на 3. Получаем системы

	$q=1$	$q=2$
$\varkappa_4 + 2\varkappa_5 =$	-6	22
$4\varkappa_4 + 10\varkappa_5 =$	0	-12

с решениями

	$q=1$	$q=2$
$\varkappa_4$	-30	122
$\varkappa_5$	12	-50

Выполним теперь обратный ход по Гауссу. Возвращаясь к старым неизвестным, получим следующие значения коэффициентов $c_{ql}^{(3)} = \gamma_l$:

$q \downarrow$ $l \rightarrow$	0	1	2	3	4	5
1	$-25/12$	3	-4	$10/3$	$-5/4$	$1/5$
2	$51/12$	$-40/3$	$107/6$	-13	$61/12$	$-5/6$

3. Применив тот же прием, получим следующую таблицу коэффициентов $c_{ql}^{(4)} = \gamma_l$:

$q \downarrow$ $l \rightarrow$	0	1	2	3	4	5	6	7
1	$-13/140$	7	$-21/2$	$35/3$	$-35/4$	$21/5$	$-7/6$	$1/7$
2	$237\frac{1}{3}$	$-501\frac{14}{15}$	$159\frac{41}{60}$	-2	82	-67	$33\frac{173}{180}$	$-\frac{41}{35}$
3	$-7\frac{271}{840}$	$40\frac{1}{30}$	$-14\frac{7}{8}$	$126\frac{1}{2}$	$-103\frac{1}{24}$	$51\frac{4}{5}$	$-14\frac{7}{8}$	$1\frac{181}{210}$

§ 4. Погрешность округления квадратурной формулы (2.6)

Погрешность аппроксимации формулы (2.6) оценена в § 1. Погрешность искажения здесь не возникает, потому что никаких искаженных уравнений здесь решать не приходится; коэффициенты α_{qs} и $c_{ql}^{(s)}$ определяются точно и представляют собой рациональные числа, машинные значения которых могут быть получены с любой степенью точности как частные двух целых чисел. Погрешность алгоритма для квадратурных формул равна нулю [2: § 1.5], и остается оценить только погрешность округления.

Допустим, что все действия, предписанные формулой (2.6), в частности, вычисление ординат $u(t_k)$, могут быть выполнены на электронной вычислительной машине („ЭВМ") с повышенной точностью. Тогда, как показано в [2: формула (1.1.9)], погрешность округления формулы (2.6) с точностью до малых высшего порядка не превосходит по абсолютному значению величины $\varepsilon_1 \left| \int_0^1 \tilde{u}^h(t)\, dt \right|$; здесь ε_1 — параметр ЭВМ, определяемый следующим образом: $1 + \varepsilon_1$ есть наименьшее машинное число, большее единицы. Как мы видели в § 1, разность $\int_0^1 u(t)\, dt - \int_0^1 \tilde{u}^h(t)\, dt$ есть малая величина. Отсюда следует, что погрешность округления формулы (2.6) с точностью до малых высших порядков не превосходит числа

$$\varepsilon_1 \int_0^1 |u(t)|\, dt \leqq M\varepsilon_1; \qquad M = \max_{0 \leq t \leq 1} |u(t)|. \tag{4.1}$$

Общая погрешность квадратурной формулы (2.6) не превосходит, с точностью до малых высшего порядка, суммы правых частей формул (1.10) и (4.1).

Глава II. Двустороннее продолжение подынтегральной функции

§ 5. Первоначальный вид квадратурной формулы и ее погрешность аппроксимации

Можно построить квадратурную формулу, основанную на той же системе кусочно полиномиальных исходных функций, что и в главе I, но использующей двустороннее продолжение подынтегральной функции. Попрежнему будем рассматривать интеграл $\int_0^1 u(t)\, dt$, $u \in C^{(2s)}[0, 1]$ и воспользоваться МКЭ-аппроксимацией (1.3), погрешность которой попрежнему оценивается неравенством (1.4), но исключение производных из формулы (1.3) произведем по-иному.

Найдем коэффициенты $b_{ql}^{(s)}$ такие, что $b_{ol}^{(s)} = \delta_{0l}$ и

$$h^q u^{(q)}(t) = \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} u(t + lh) + O(h^{2s}) \tag{5.1}$$

(штрих означает пропуск члена с $l = 0$). Разложив, как в § 2, $u(t + lh)$ по строке Тейлора, мы получим $s - 1$ систем порядка $2s$ для определения коэффициентов $b_{ql}^{(s)}$:

$$\sum_{l=-1}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} l^r = r!\delta_{qr}, \qquad r = 0, 1, \ldots, 2s - 1; \tag{5.2}$$

$q = 1, 2, \ldots, s-1$. Они имеют общую матрицу, которая является матрицей Вандермонда чисел $-s, \ldots, -1, 1, \ldots, s$. Остаточный член $O(h^{2s})$ в формуле (5.1) имеет оценку

$$(h^{2s}/(2s)!) \| u^{(2s)} \|_C \sum_{l=-s}^{s}{}' |b_{ql}^{(s)} l^{2s}|.$$

Если подставить в (1.3) вместо $h^q u^{(q)}$ главную часть выражения (5.1), то получим новую аппроксимирующую функцию ($h = 1/2n$)

$$\check{u}^h(t) = \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \sum_{j=0}^{2n} u\big((j+l)h\big)\, \omega_{qs}(t/h - j). \tag{5.3}$$

Как это видно из этого выражения и неравенства $|\omega_{qs}(t)| < 1/q!$, разность $u^h(t) - \check{u}^h(t)$ имеет оценку

$$|u^h(t) - \check{u}^h(t)| \leqq \frac{h^{2s}}{(2s)!} \|u^{2s}\|_C \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s}{}' |b_{ql}^{(s)} l^{2s}|.$$

Используя еще неравенство (1.5), получаем оценку погрешности аппроксимации для функции $\check{u}^h$:

$$|u(t) - \check{u}^h(t)| \leqq \frac{h^{2s}}{(2s)!} \|u^{(2s)}\|_C \left[\sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s} |b_{ql}^{(s)} l^{2s}| \,(1/q!) + 2^{2s-1} \right]. \tag{5.4}$$

Если теперь ввести в рассмотрение квадратурную формулу

$$\int_0^1 u(t)\, dt = \int_0^1 \check{u}^h(t)\, dt + R, \tag{5.5}$$

то ее погрешность аппроксимации оценивается правой частью формулы (5.4).

§ 6. Окончательный вид квадратурной формулы (5.5)

В уравнении (5.2) заменим обозначение l на $-l$, что даёт

$$\sum_{l=-s}^{s}{}' b_{q,-l}^{(s)} l^r = (-1)^r r!\, \delta_{qr}, \quad r = 0, 1, \ldots, 2s-1. \tag{6.1}$$

Системы (5.2) и (6.1) сложим и вычтем, а результаты поделим на 2, что даёт

$$\sum_{l=-s}^{s}{}' \frac{b_{ql}^{(s)} + b_{q,-l}^{(s)}}{2} l^r = \frac{1 + (-1)^r}{2} r!\delta_{qr}, \tag{6.2}$$

$$\sum_{l=-s}^{s}{}' \frac{b_{ql}^{(s)} - b_{q,-l}^{(s)}}{2} l^r = \frac{1 - (-1)^r}{2} r!\delta^{qr}. \tag{6.3}$$

При четном q системы (5.2) и (6.2) совпадают с точностью до обозначений неизвестных; так как решение системы (5.2) единственно, то $b_{q,-l}^{(s)} = b_{ql}^{(s)}$. Точно так же, при нечетном q будет $b_{q,-l}^{(s)} = -b_{ql}^{(s)}$. Последние два равенства можно объединить в тождество $b_{q,-l}^{(s)} = (-1)^q b_{ql}^{(s)}$.

Рассмотрим вытекающие отсюда следствия. Пусть s — любое натуральное число, и число q — нечетное. Рассмотрим уравнение (5.2) с четным номером r:

$$\sum_{l=1}^{s} b_{ql}^{(s)} l^r + \sum_{l=1}^{s} b_{q,-l}^{(s)}(-l)^r = 0.$$

В данном случае $b_{q,-l}^{(s)} = -b_{ql}^{(s)}$, и последнее уравнение принимает вид $\sum_{l=1}^{s} b_{ql}^{(s)}[1 + (-1)^{r+1}] \equiv 0$. Таким образом, уравнения (6.3) с четными r удовлетворяются тождественно. Если r — нечетное, то (6.3) преобразуется в уравнение

$$\sum_{l=1}^{s} b_{ql}^{(s)} l^r = 2^{-1}\delta_{qr} r!, \qquad r = 1, 3, \ldots, 2s - 1. \tag{6.4}$$

Таким образом, при нечетном q коэффициенты $b_{ql}^{(s)}$ определяются, если решена система s-го порядка (6.4). Аналогично, если q — четное, то коэффициенты $b_{ql}^{(s)}$ определяются из системы

$$\sum_{l=1}^{s} b_{ql}^{(s)} l^r = 2^{-1}\delta_{qr} r!, \qquad r = 0, 2, \ldots, 2[(s-1)/2].$$

Обратимся к формуле (5.3). Возьмем целое число j_0, $0 \leqq j_0 \leqq 2n - 1$, положим $t_0 = j_0 h$ и $t = t_0 + \tau h$, $0 \leqq \tau \leqq 1$, и проинтегрируем равенство (5.3) в пределах от $j_0 h$ до $(j_0 + 1)h$:

$$\int_{j_0 h}^{(j_0+1)h} \check{u}^h(t)\, d\tau = h \int_0^1 \check{u}^h(t_0 + \tau h)\, d\tau$$
$$= h \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \sum_{j=0}^{2n} u\big((j + l)h\big) \int_0^1 \omega_{qs}\big(\pi/2 - (j - j_0)\big)\, d\tau.$$

Функция $\omega_{qs}\big(\tau/h - (j - j_0)\big)$ отлична от тождественного нуля лишь при $j = j_0$ и $j = j_0 - 1$. Из этого замечания следует, что

$$\int_{j_0 h}^{(j_0+1)h} \check{u}^h(t)\, dt = h \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s} b_{ql}^{(s)}\big[u\big((j_0 + l)h\big)\alpha_{qs} + u\big((j_0 + l + 1)h\big)(-1)^q \alpha_{qs}\big];$$

α_{qs} определяется равенством (2.2). Равенство (6.1) просуммируем в пределах от $j_0 = 0$ до $j_0 = 2n - 1$, что приведет нас к квадратурной формуле

$$\int_0^1 u(t)\, dt \approx \int_0^1 \check{u}^h(t)\, dt$$
$$= h \sum_{j_0=0}^{2n-1} \sum_{q=0}^{s-1} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \alpha_{qs}\big[u\big((j_0 + l)h\big) + (-1)^q u\big((j_0 + l + 1)h\big)\big]. \tag{6.5}$$

Как уже было отмечено, погрешность этого приближённого равенства определяется правой частью формулы (5.4).

В правой части соотношения (6.5) выделим члены с $q = l = 0$. Это выделит сумму (мы здесь принимаем во внимание, что $\alpha_{0s} = 1/2$)

$$\frac{h}{2} \sum_{j_0=0}^{2n-1} \big[u(j_0 h) + u\big((j_0 + 1)h\big)\big] = h\left[\frac{u(0) + u(1)}{2} + \sum_{j=1}^{2n-1} u(jh)\right].$$

Эта величина есть правая часть формулы трапеций.

При $q = 0$, $l \neq 0$ будет $b_{0l}^{(s)} = 0$, поэтому в оставшейся части исчезнут все члены с $q = 0$, и оставшаяся часть принимает вид

$$
\begin{aligned}
&h \sum_{j_0=0}^{2k-1} \sum_{q=1}^{s-1} \alpha_{qs} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \left[u\big((j_0 + l)\,h\big) + (-1)^q\, u\big((j_0 + l + 1)\,h\big)\right] \\
&\quad = h \sum_{q=1}^{s-1} \alpha_{qs} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \sum_{j_0=0}^{2k-1} u\big((j_0 + l)\,h\big) \\
&\quad + h \sum_{q=1}^{s-1} \alpha_{qs} \sum_{l=-s}^{s}{}' (-1)^q b_{ql}^{(s)} \sum_{j_0=0}^{2n-1} u\big((j_0 + l + 1)\,h\big). \qquad (6.6)
\end{aligned}
$$

Во второй сумме (6.6) справа заменим обозначение j_0 на $j_0 - 1$, после чего правую часть равенства (6.6) можно преобразовать к виду

$$
\begin{aligned}
&h \sum_{q=1}^{s} [1 + (-1)^q]\, \alpha_{qs} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} [u(lh) + u(1 + lh)] \\
&+ h \sum_{q=1}^{s-1} [1 + (-1)^q] \alpha_{qs}' \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} \sum_{j_0=1}^{2n-1} u\big((j_0 + l)\,h\big).
\end{aligned}
$$

Далее, в тройной сумме здесь положим $j_0 + l = k$. При этом индекс k меняется от $+1 - s$ до $2n + S - 1$, а слагаемое $u(kh)$, вообще говоря, повторяется несколько, пусть λ_k, раз. Переставив в тройной сумме суммирование по k и по l и воспользовавшись уравнением (5.2) при $q > 0$, $l = 0$ найдем, что эта сумма равна нулю. Окончательно можно записать квадратурную формулу (6.5) в виде

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 u(t)\,dt \approx h \Bigg\{ &\frac{u(0) + u(1)}{2} + \sum_{j=1}^{2n-1} u(jh) \\
&+ \sum_{q=1}^{s-1} [1 + (-1)^q]\, \alpha_{qs} \sum_{l=-s}^{s}{}' b_{ql}^{(s)} [u(lh) + u(1 + lh)] \Bigg\}. \qquad (6.7)
\end{aligned}
$$

Аналогично формуле (2.6), правая часть этой формулы распадается на правую часть формулы трапеций и на пограничный слой. Погрешность формулы (6.7) оценивается правой частью формулы (5.4).

Приведем значения некоторых коэффициентов $b_{ql}^{(s)}$ ($1 \leqq q \leqq s - 1$, $1 \leqq l \leqq s$):

	$s = 2$		$s = 3$		
$q \downarrow$ $l \rightarrow$	1	2	1	2	3
1	2/3	−1/12	3/4	−3/20	1/60
2			11/24	−8/5	3/4

Далее, приведём ещё численные значения оценок погрешности аппроксимации квадратурной формулы (6.7), вытекающие из неравенства (5.4):

$s = 2$: $R \doteq 0{,}6h^4\|u^{(4)}\|_C$; $s = 3$: $R = 1{,}59h^6\,\|u^{(6)}\|_C$;

$s = 4$: $R = 3{,}8h^8\|u^{(8)}\|_C$.

§ 7. Продолжение подынтегральной функции

Как уже было отмечено, использование квадратурной формулы (6.7) требует продолжения, с сохранением класса, подынтегральной функции по обе стороны промежутка [0, 1]. Такое продолжение можно осуществить, построив полином, который в точках 0 и 1 совпадает, вместе со своими производными до порядка $2s$ включительно, с подынтегральной функцией и ее соответствующими производными. Такой полином можно искать в виде

$$Q(t) = \sum_{p=0}^{2s} [a_p(1-t)^p t^{4s-p} + b_p t^p (1-t)^{4s-p}];$$

коэффициенты a_p и b_p следует определить из условий

$$Q^{(r)}(0) = u^{(r)}(0),\ Q^{(r)}(1) = u^{(r)}(1); \quad r = 0, 1, \ldots, 2s. \tag{7.1}$$

По формуле Лейбница

$$Q^{(r)}(t) = \sum_{p=0}^{2s} \sum_{\nu=0}^{r} \binom{r}{\nu} \frac{p!(4s-p)!}{(p-\nu)!\,(4s-p-r+\nu)!} \times [a_p(1-t)]^{p-\nu} t^{4s-p-r+\nu} + b_p t^{p-\nu}(1-t)^{4s-p-r+\nu}].$$

В последней формуле положим $t = 0$ и $t = 1$ и заменим $Q^{(r)}(0)$ и $Q^{(r)}(1)$ их значениями (7.1). При $t = 0$ исчезнут все члены, содержащие a_p, а из членов, содержащих b_p, останутся только те, в которых $p = \nu$ Для коэффициентов b_p получается система линейных алгебраических уравнений с треугольной матрицей

$$\sum_{\nu=0}^{r} \binom{r}{\nu} (-1)^\nu \nu! \frac{(4s-\nu)!}{(4s-r)!} b_\nu = u^{(r)}(0) \qquad (r = 0, 1, \ldots, 2s).$$

Аналогично

$$\sum_{\nu=0}^{r} \binom{r}{\nu} (-1)^\nu \nu! \frac{(4s-\nu)!}{(4s-r)!} a_\nu = u^{(r)}(1) \qquad (r = 0, 1, \ldots, 2s).$$

Таким образом, коэффициенты a_p и b_p определяются из треугольных систем общей матрицей, но с различными столбцами свободных членов. После того, как эти системы решены, полином Q можно использовать двояко. Один способ состоит в том, что Q можно рассматривать как продолжение функции u за промежуток [0, 1] и использовать квадратурную формулу (6.7). По другому способу полагаем $u = Q + v$ и, следовательно,

$$\int_0^1 u(t)\,dt = \int_0^1 Q(t)\,dt + \int_0^1 v(t)\,dt.$$

Первый интеграл справа элементарно вычисляется как сумма бета-функций, умноженных соответственно на a_p или b_p. Во втором интеграле сделаем замену $t = 2\tau - 1/2$, $v(t) = w(\tau)$. При этом

$$\int_0^1 u(t)\,dt = 2\int_{1/4}^{3/4} w(\tau)\,d\tau.$$

Фунукция w определена на всей вещественной оси и равна нулю вне промежутка $[1/4, 3/4]$; при этом она принадлежит к классу $C^{(2s)}$. Ясно, что

$$\int_{1/4}^{3/4} w(\tau)\,d\tau = \int_0^1 w(\tau)\,d\tau. \tag{7.2}$$

Выберем n так, чтобы $h < 1/4s$; если применить к интегралу в (7.2) справа формулу (6.7), то пограничный слой исчезнет, и интеграл (7.2) вычисляется по формуле трапеций, которая в данном случае обладает высокой точностью.

Как и в § 4, мы обедимся, что, кроме исследованной в § 5 погрешности аппроксимации, с квадратурной формулой (6.7) связана еще только погрешность округления; если производить вычисления с повышенной точностью, то в данном случае погрешность округления по-прежнему оценивается по неравенству (4.1). Общая погрешность формулы (6.7) оценивается, с точностью до малых слагаемых высших порядков, суммой правых частей формул (4.1) и (5.4).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Michlin, S. G.: Approximation auf dem kubischen Gitter. Berlin: Akademie-Verlag 1976.
[2] Михлин, С. Г.: Некоторые вопросы теории погрешностей. Ленинград: Изд-во Лен. гос. унив. 1988.
[3] Соболев, С. Л.: Введение в теорию кубатурных формул. Москва: Изд-во Наука 1974.

Manuskripteingang: 26. 07. 1989

VERFASSER:

Проф. д-р Соломон Григорьевич Михлин †
Ehemals: Научно-исследовательский институт математики и механики ЛГУ
СССР — 198904 Петродворец — Ленинград, Библиотечная пл. 2