сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р5-87-285

Р.С.Егикян*, Е.П.Жидков

КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ИНТЕГРАЛА ФУРЬЕ, ОСНОВАННЫЕ НА СПЛАЙН-ИНТЕРПОЛЯЦИИ

*Ереванский физический институт

1987

Пусть требуется вычислить интеграл Фурье

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{ikx}dx \,. \qquad (0\text{-}1)$$

Вычисление несобственного интеграла разбивается на два этапа: вычисление интеграла по конечному отрезку .

$$\int_{a}^{b} f(x)e^{ikx}dx \qquad (0\text{-}2)$$

и учет остаточной части с помощью информации об асимптотическом поведении функции $f(t)$ в окрестности бесконечности. Непосредственное вычисление интеграла от осциллирующей функции по квадратурным формулам Ньютона-Котеса является малоэффективным. При использовании таких формул подынтегральная функция, в данном случае $f(x)e^{ikx}$, аппроксимируется полиномом. Поэтому для получения хорошей аппроксимации нужно, чтобы шаг интегрирования был меньше характерного отрезка изменения подынтегральной функции, имеющего порядок $2\pi/x$.

Более выгодным может оказаться путь рассмотрения функции e^{ikx} как весовой. Обычный способ вычисления интеграла (0-2) состоит в следующем. Отрезок интегрирования разбивается на некоторые подотрезки $[c,d]$. На каждом из этих отрезков заданы узлы $x_0,\ldots,x_n$. Пусть $P_n(x)$ – интерполяционный полином Лагранжа для функции $f(x)$ с этими узлами. Интеграл $\int_c^d P_n(x)e^{ikx}dx$ может быть вычислен в явном виде, в результате чего получаем квадратурную формулу

$$\int_c^d f(x)e^{ikx}dx \approx \int_c^d P_n(x)e^{ikx}dx = \sum_{j=0}^{n} d_j(k)f(x_j)\,.$$

Для повышения точности интегрирования увеличивают число таких отрезков $[c,d]$. Формулы для коэффициентов $d_j(k)$ при $x_j=c+(d-c)j/n$, $n=1,2,3,4$, приведены в работе /1/. Способ вычисления интеграла (0-2), когда в качестве узлов интерполяции берутся узлы квадратурной формулы Гаусса, т.е. нули полиномов Лежандра, рассмотрен в /2/. Пусть на отрезке $[a,b]$ задана сетка с равномерным шагом h . Мы исходим из постановки задачи, когда значения функции f_j заданы в узлах сетки x_j, $x_j=a+jh$, $j=0,1,\ldots,n$. Эту сетку в дальнейшем будем считать фиксированной.

Известно, что сплайны обладают лучшими свойствами аппроксимации, чем многочлены Лагранжа, и лишены недостатков аппроксимирующих полиномов высокой степени, которые допускают патологические случаи при интерполяции на равномерной сетке даже для гладких функций. Поэтому целесообразным является использование сплайн-интерполяции вместо полиномиальной при вычислении интеграла (0-2).

В § I рассматриваются квадратурные формулы для интеграла Фурье на конечном отрезке. Нахождению остатка $\int_b^\infty f(x) e^{ikx} dx$ посвящен §2.

§ I. Пусть функция $f(x)$, определенная на отрезке $[a,b]$, принадлежит классу $C^{(5)}[a,b]$. Заданы значения в узлах $f_j = f(x_j)$, и требуется восстановить функцию на всем отрезке.

Кубический сплайн $S(x)$ есть функция на отрезке $[a,b]$, принимающая заданные значения в узлах сетки, равная в каждом интервале полиному третьей степени и дважды непрерывно дифференцируемая. Для построения сплайна требуется решить систему линейных уравнений относительно неизвестных $m_0, m_1, \ldots, m_n$:

$$m_0 = \mu_0, \qquad \text{(I-I)}$$

$$m_0 + 4m_1 + m_2 = 6\,\frac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2},$$

$$m_{n-2} + 4m_{n-1} + m_n = 6\,\frac{f_{n-2} - 2f_{n-1} + f_n}{h^2}, \qquad m_n = \mu_n.$$

Величины μ_0 и μ_n представляют собой граничные условия, задаваемые на основе априорной информации. Найденные значения m_j однозначно определяют сплайн, причем сами являются значениями его второй производной в узлах

$$S''(x_j) = m_j, \quad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Выбор граничных условий для определения сплайна зависит от особенностей решаемой задачи и является в определенном смысле произвольным. Удачный выбор может сильно повлиять на эффективность решения. Хорошими аппроксимационными свойствами обладает сплайн, для которого во всех узлах выполнено соотношение /3/:

$$m_j = f''(x_j) - \frac{f^{IV}(x_j)}{12} h^2 + O(h^3), \qquad \text{(I-2)}$$

$j = 0, 1, \ldots, n.$

При этом сохраняются свойства аппроксимации не только самой функции, но и ее производных вплоть до третьего порядка соответствующими производными сплайна. Имеет место неравенство

$$\left| f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x) \right| \leq c h^{4-k}, \qquad \text{(I-3)}$$

$k = 0, 1, 2, 3.$

Здесь c – положительная постоянная, не зависящая от шага сетки. Имеет место представление, дающее явный вид главной части погрешности аппроксимации функции сплайном /3/

$$f(x) = S(x) + \frac{h^4}{24} B\left(\frac{x - x_{j-1}}{h}\right) f^{IV}(x) + O(h^5) \qquad \text{(I-4)}$$

при $x_{j-1} \leq x \leq x_j$, $j = 1, 2, \ldots, n$.

Здесь $B(x) = x^4 - 2x^3 + x^2$ – четвертый полином Бернулли. Поэтому граничные условия μ_0 и μ_n выбираются с учетом (I-2). Интеграл $\int_a^b S(x) e^{ikx} dx$ выполняется в явном виде, в результате чего получаем квадратурную формулу

$$\int_a^b f(x) e^{ikx} dx \approx \int_a^b S(x) e^{ikx} dx = \sum_{j=0}^{n} \gamma_j(k) f_j = J(k). \qquad \text{(I-5)}$$

Известно следующее выражение для $J(k)$ /3/:

$$J(k) = \frac{1}{k^4 h}\Big[(m_1 - m_0) e^{ikx_0} + \sum_{j=1}^{n-1} (m_{j-1} - 2m_j + m_{j+1}) e^{ikx_j} +$$

$$+ (m_{n-1} - m_n) e^{ikx_n}\Big] + e^{ikx_0}(C_1 + iC_2) + e^{ikx_n}(D_1 + iD_2).$$

Использованы обозначения

$$C_1 = \frac{1}{k^2}\left[\frac{f_0 - f_1}{h} + \frac{h}{6}(2m_0 + m_1)\right],$$

$$D_1 = \frac{1}{k^2}\left[\frac{f_n - f_{n-1}}{h} + \frac{h}{6}(2m_n + m_{n-1})\right],$$

$$C_2 = \frac{1}{k}\left(f_0 - \frac{m_0}{k^2}\right),$$

$$D_2 = \frac{1}{k}\cdot\left(\frac{m_n}{k^2} - f_n\right).$$

Для использования формулы (I-5) нужно решить систему (I-I) и подставить полученные значения m_j в (I-5).

Заметим, что (I-5) не является квадратурной формулой в обычном смысле, т.к. коэффициенты $\gamma_j(k)$ зависят от всех значений интегрируемой функции f_j.

Формула (I-5) точна для полиномов третьей степени по способу построения. Покажем, что она точна при ненулевом k и для полиномов четвертой степени.

На основании (I-4) имеем

$$x^4=S(x)+h^4B\left(\frac{x-x_{j-1}}{h}\right), \tag{I-6}$$

$$x_{j-1}\le x\le x_j .$$

Отсюда получаем

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} x^4e^{ikx}dx = \int_{x_{j-1}}^{x_j} S(x)e^{ikx}dx + e^{ikx_{j-1}}h^5\int_0^1 B(x)e^{ik^hx}dx . \tag{I-7}$$

Суммируя (I-7) по $j=1,2,\ldots,n$ и учитывая, что

$$\sum_{j=1}^{n} e^{ikh_j}=0$$

при $k\ne 0$, получаем

$$\int_a^b x^4e^{ikx}dx = \int_a^b S(x)e^{ikx}dx . \tag{I-8}$$

При этом использовался тот факт, что сплайн рассматривается на равномерной сетке.

Из сказанного следует, что имеет место следующая оценка для погрешности квадратурной формулы (I-5):

$$\left| \int_a^b f(x)e^{ikx}dx - \int_a^b S(x)e^{ikx}dx \right| \le Ch^5 , \tag{I-9}$$

где C - положительная постоянная, не зависящая от h.

Как известно, имеет место соотношение

$$m_{j-1}-2m_j+m_{j+1} = h^2f^{iv}(x_j)+O(h^3)$$

во всех внутренних узлах сетки /3/. Таким образом, вычисления по формуле (I-5) содержат в себе, по существу, задачу численного дифференцирования, поэтому накопление погрешности при неточно заданных исходных данных может быть весьма значительно.

Нашей целью является построение квадратурной формулы, свободной от указанного недостатка и устойчивой по отношению к погрешности задания значений функции.

Будем исходить из формулы (I-5) и преобразуем ее.

Перейдем к матричным обозначениям. Систему (I-I) можно записать в виде

$$(4E+A-B)M = \frac{6}{h^2}(A-2E)F+g . \tag{I-10}$$

Здесь E - единичная матрица, матрицы A и B имеют вид

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix},$$

а векторы M, F и g определяются как

$$M=\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{pmatrix}, \quad F=\begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}, \quad g=\begin{pmatrix} 6\frac{f_0-f_1}{h}+\mu_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 6\frac{f_n-f_{n-1}}{h}+\mu_n \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим теперь векторы

$$U_k = \begin{pmatrix} 1 \\ \cos kh \\ \vdots \\ \cos(n-1)kh \\ \cos nkh \end{pmatrix}, \quad V_k=\begin{pmatrix} 0 \\ \sin kh \\ \vdots \\ \sin(n-1)kh \\ \sin nkh \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что имеют место соотношения

$$AU_k = \lambda_k U_k + P_k , \tag{I-11}$$

$$AV_k = \lambda_k V_k + Q_k . \tag{I-12}$$

Здесь число λ_k есть

$$\lambda_k = 2\cos kh\ ,$$

а векторы P_k и Q_k имеют вид

$$P_k = \begin{pmatrix} 1-\cos kn \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \cos kh-\cos(n+1)kh \end{pmatrix},$$

$$Q_k = \begin{pmatrix} \sin kh \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sin kh - \sin(n+1)kh \end{pmatrix}.$$

Основную роль при вычислении по квадратурной формуле (I-5) играет следующее выражение:

$$S_k = (m_1-m_0)e^{ikx_0} + \sum_{j=1}^{n-1}(m_{j-1}-2m_j+m_{j+1})e^{ikx_j} + \qquad \text{(I-I3)}$$

$$+(m_{n-1}-m_n)e^{ikx_n},$$

или в матричных обозначениях

$$S_k = ((A-2E)M,U_k) + i((A-2E)M,V_k) = R_k+iW_k\ .$$

Преобразуем отдельно вещественную и мнимую части:

$$R_k=((A-2E)M,U_k)=(M,(A-2E)U_k)=(\lambda_k-2)(M,U_k)/(M,P_k)\ , \qquad \text{(I-I4)}$$

$$W_k=((A-2E)M,V_k)=(M,(A-2E)V_k)=(\lambda_k-2)(M,V_k)+(M,Q_k)\ . \qquad \text{(I-I5)}$$

Определим теперь значения (M,U_k) и (M,V_k), исходя из данных задачи. Для этого используем равенство (I-I0). Умножим обе его части на U_k :

$$((4E+A-B)M,U_k)= \frac{G}{h^2}((B-2E)F,U_k)+(g,U_k)\ .$$

Преобразуем получившееся равенство, учитывая, что A есть симметрическая матрица

$$((4E+A-B)M,U_k)=(M,(4E+A)U_k)-(BM,U_k)=(\lambda_k+4)(M,U_k)+(M,P_k)-(BM,U_k)\ .$$

Для правой части получаем

$$\frac{6}{h^2}((A-2E)F,U_k)= \frac{6}{h^2}(F,(A-2E)U_k)= \frac{6(\lambda_k-2)}{h^2}(F,U_k)+ \frac{6}{h^2}(F,P_k)\ .$$

Отсюда получаем

$$(M,U_k)= \frac{6(\lambda_k-2)}{h^2(\lambda_k+4)}(F,U_k)+ \frac{1}{\lambda_k+4}E_k\ , \qquad \text{(I-I6)}$$

где

$$E_k=(BM,U_k)-(M,P_k)+ \frac{6}{h^2}(F,P_k)+(g,U_k)\ . \qquad \text{(I-I7)}$$

Точно так же рассматривается случай с вектором V_k . Умножаем выражение (I-I0)на V_k и проводим преобразования обеих частей равенства:

$$((4E+A-B)M,V_k)= \frac{6}{h^2}((A-2E)F,V_k)+(g,V_k)\ ,$$

$$((4E+A-B)M,V_k)=(M,(4E+A)V_k)-(BM,V_k)=(\lambda_k+4)(M,V_k)+(M,Q_k)-(BM,V_k)\ ,$$

$$\frac{6}{h^2}((A-2E)F,V_k)=\frac{6}{h^2}(F,(A-2E)V_k= \frac{6(\lambda_k-2)}{h^2}(F,V_k)+ \frac{6}{h^2}(F,Q_k)\ ,$$

$$(M,V_k) = \frac{6(\lambda_k-2)}{h^2(\lambda_k+4)}(F,V_k)+ \frac{1}{\lambda_k+4}I_k\ , \qquad \text{(I-I8)}$$

$$I_k= (BM,V_k)-(M,Q_k) + \frac{6}{h^2}(F,Q_k) + (g,V_k)\ . \qquad \text{(I-I9)}$$

Подставим теперь (I-I6), (I-I7), (I-I8), (I-I9) в (I-I4), (I-I5) и получим искомые формулы для $S_k = R_k+iW_k$:

$$R_k = \frac{6(\lambda_k-2)^2}{h^2(\lambda_k+4)}(F,U_k) + \frac{\lambda_k-2}{\lambda_k+4}E_k + (M,P_k), \qquad (I\text{-}20)$$

$$W_k = \frac{6(\lambda_k-2)}{h^2(\lambda_k+h)}(F,W_k) + \frac{\lambda_k-2}{\lambda_k+4}I_k + (M,Q_k). \qquad (I\text{-}2I)$$

Подставим теперь (I-20) и (I-2I) в формулу (I-5):

$$J(k) = \frac{6(\lambda_k-2)^2}{k^4h^3(\lambda_k+4)}\sum_{j=0}^{n} f_j e^{ikx_j} + \frac{\lambda_k-2}{k^4h(\lambda_k+4)}(E_k+iI_k) + \qquad (I\text{-}22)$$

$$+ \frac{1}{k^4h}(M,(P_k+iQ_k)) + e^{ikx_0}(C_1+iC_2) + e^{ikx_n}(D_1+iD_2).$$

Эта формула более удобна для вычислений, чем (I-5), хотя и эквивалентна ей. Выражение (I-22) уже не содержит операций вычитания близких чисел. Дискретное преобразование Фурье (ДПФ) совершается над вектором функции и не увеличивает ошибок, в нем содержащихся. Также отпадает необходимость решать систему (I-I). Все элементы сплайна, фигурирующие в (I-22), - это величины m_0, m_1, m_{n-1}, m_n. Их можно вычислить непосредственно по значениям функции с точностью $O(h^3)$:

$$m_0 = \frac{17f_0-50f_1+54f_2-26f_3+54f_4}{6h^2} + O(h^3),$$

$$m_n = \frac{17f_n-50f_{n-1}+54f_{n-2}-26f_{n-3}+54f_{n-4}}{6h^2} + O(h^3),$$

$$m_1 = \frac{5f_0-8f_1+4f_3-f_4}{6h^2} + O(h^3),$$

$$m_{n-1} = \frac{5f_n-8f_{n-1}+4f_{n-3}+f_{n-4}}{6h^2} + O(h^3).$$

§ 2. Будем предполагать, что функция $f(x)$ имеет следующее асимптотическое поведение при достаточно больших значениях x :

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\ell} \frac{a_j}{x^j} + O\left(\frac{1}{x^{\ell+1}}\right). \qquad (2\text{-}I)$$

Функция, удовлетворяющая этому условию, вообще говоря, не суммируема, но преобразование Фурье от нее существует при ненулевых значениях k. Поэтому в дальнейшем будем считать, что $k \neq 0$.

Остаток интеграла Фурье

$$\int_R^{\infty} f(x)\, e^{ikx} dx \qquad (2\text{-}2)$$

при больших R стремится к нулю, как $\frac{1}{R}$, и его необходимо учитывать для точного вычисления (0-I). Как было сделано выше, рассмотрим отдельно вещественную и мнимую части интеграла (2-2). Квадратурную формулу для остатка косинус-преобразования Фурье ищем в виде

$$\int_R^{\infty} f(x)\cos kx\, dx \approx \sum_{j=1}^{n} \alpha_j(R,k) f(x_j). \qquad (2\text{-}3)$$

Коэффициенты $\alpha_j(R,k)$ выбираются таким образом, чтобы квадратура (2-3) была точной для начальных членов разложения (2-I). Зафиксируем n различных чисел x_j, больших R и покажем, что при $n=\ell$ существуют числа $\alpha_j(R,k)$, такие, что учитываются n членов разложения (2-I). Подставляя в (2-3) поочередно функции $\frac{1}{x}$, $\frac{1}{x^2}, \dots,$ $\frac{1}{x^n}$ и требуя, чтобы квадратурная формула была точна, приходим к системе уравнений

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\alpha_j(R,k)}{t_j(k)} = S_1(R,k),$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\alpha_j(R,k)}{t_j^2(k)} = S_2(R,k), \qquad (2\text{-}4)$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\alpha_j(R,k)}{t_j^n(k)} = S_n(R,k).$$

Здесь в правой части стоит выражение

$$S_j(R,k) = \int_R^{\infty} \frac{\cos kx}{x^j}\, dx \quad , \qquad j=1,2,\dots,n \quad ,$$

которое после интегрирования по частям записывается через тригонометрические функции и интегральные синус и косинус и легко вычисляется. Определитель системы (2-4) есть определитель Вандермонда, следовательно, коэффициенты $\alpha_j(R,k)$ находятся единственным образом. Можно получить и аналитическое выражение для $\alpha_j(R,k)$, однако даже для малых n оно слишком громоздко, поэтому вычисление этих коэффициентов удобно проводить с помощью ЭВМ. Аналогично строится квадратурная формула для остатка синус-преобразования Фурье:

$$\int_R^{\infty} f(x)\sin kx\, dx \approx \sum_{j=1}^{n} \beta_j(R,k) f(x_j), \qquad (2\text{-}5)$$

сводящаяся к решению системы

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\beta_j(R,k)}{t_j(k)} = C_1(R,k),$$

$$\cdot \qquad (2\text{-}6)$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\beta_j(R,k)}{t_j^2(k)} = C_2(R,k),$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\beta_j(R,k)}{t_j^n(k)} = C_n(R,k).$$

В правой части стоит выражение

$$C_j(R,k) = \int_R^{\infty} \frac{\sin kx}{x^j}\, dx \quad , \qquad j=1,2,\dots,n$$

так же, как и $S_j(R,k)$, выражающееся через тригонометрические функции и интегральный синус и косинус. Построенные квадратурные формулы (2-3) и (2-5) являются аналогами обычных формул Ньютона-Котеча численного интегрирования. Можно показать, что квадратурная формула типа Гаусса в рассматриваемом случае не существует, поскольку получающиеся системы, подобные (2-4) и (2-6), в которых неизвестными являются не только $\alpha_j(R,k)$, но и t_j, уже при $n=2,3$ имеют комплексные корни.

Приведем пример вычисления с помощью описанных квадратурных формул. Вычислялся интеграл $J(k) = \int_0^{\infty} \frac{\cos kx}{1+x^2}\, dx$. Брались следующие значения $a=0$, $b=100$, $h=0{,}02$ и в остатке учитывались четыре первых члена разложения (2-I). Результаты счета приведены в таблице, причем все выписанные знаки верны.

k	J(k)
I,0	0,57786367
I,5	0,35049203
2,0	0,21258416
2,5	0,12893881
3,0	0,07820534
3,5	0,04743393
4,0	0,02877013
4,5	0,01744996
5,0	0,01058394

Авторы выражают благодарность П.Г.Акишину за стимулирующие дискуссии.

Литература

1. Крылов В.И., Шульгина Л.Т. Справочная книга по численному интегрированию. М., Наука, 1966.
2. Бахвалов Н.С., Васильева Л.Г. Вычисление интегралов от осциллирующих функций при помощи интерполяции по узлам квадратур Гаусса. ЖВМ и МФ, 1968, 8, № I, 175-181.
3. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. М., Наука, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 апреля 1987 года.