9/IV-84

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

11-83-876

Л.Александров, Д.Бакалов

КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ С ОСОБЕННОСТЯМИ

Направлено в "Журнал вычислительной математики и математической физики"

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

Во многих задачах квантовой механики возникает необходимость вычислить интегралы типа

$$I(f) = \int_0^1 dx\, f(x) \qquad /1/$$

от функций с интегрируемыми особенностями в точках $0 \le x_1 < \ldots < x_S \le 1$, $1 \le S < \infty$, то есть таких, что в окрестности этих точек $f(x)$ или ее производные некоторого порядка неограниченно возрастают. В качестве примера можно упомянуть матричные элементы операторов спинового взаимодействия в атомах и молекулах.

В случае, когда особенности подынтегральных функций $f(x)$ факторизуемы, то есть когда $f(x)$ могут быть представлены в виде

$$f(x) = w(x)\,\phi(x)\,, \qquad /2/$$

где $w(x)$ - общая для данного класса подынтегральных функций весовая функция [1,2] с особенностями, а $\phi(x)$ - достаточно гладкая функция /например $\phi \in C^{2N}[0,1]$/, весьма эффективным методом вычисления /1/ являются квадратурные формулы Гаусса-Кристоффеля /КФГК/ с весом $w(x)$ [1,2] :

$$I(f) = I(w\phi) = I_N^{(w)}(\phi) + R_N^{(w)}(\phi)\,; \qquad /3а/$$

$$I_N^{(w)}(\phi) = \sum_{i=1}^{N} w_i\, \phi(x_i)\,; \qquad /3б/$$

$$R_N^{(w)}(\phi) = a_N^{(w)} \cdot \phi^{(2N)}(\zeta)/(2N)!\,, \quad 0 < \zeta < 1\,; \qquad /3в/$$

$$a_N^{(w)} = \int_0^1 dx \cdot w(x)\, P_N^2(x) \Big/ \frac{1}{N!}\,\frac{d^N P_N(x)}{dx^N}\,. \qquad /3г/$$

Здесь $P_N(x)$ - многочлен степени N из семейства многочленов, ортогональных на сегменте $[0,1]$ с весом $w(x)$ [1,2]. Как видно из оценки остаточного члена $R_N^{(w)}$ /3в/, точность КФГК можно существенно улучшить в результате подходящего выбора веса $w(x)$. В ряде случаев этот подход приводит к использованию неклассических весов; например, в задачах квантовой хромодинамики встречаются интегралы от функций с особенностью

$$w(x) = 1/(\ln^2(x(x+2)) + \pi^2) \qquad \text{при} \quad x \to 0. \qquad /4/$$

В разделе 2 приведены два общих алгоритма для построения ортогональных многочленов и КФГК с произвольным весом.

С другой стороны, особый интерес представляет численное интегрирование функций с нефакторизуемыми особенностями

$$f(x) = w(x)\,\phi(x) + w_1(x)\,\phi_1(x)\,, \qquad /5/$$

где $w(x)$, $w_1(x), \ldots$ - весовые функции с несовпадающими особенностями, а $\phi(x)$, $\phi_1(x)$, ... - достаточно гладкие функции. Подобные интегралы возникают в ряде задач молекулярной физики [3,4]. Простейшим примером служит задача о вычислении интеграла

$$I = \int_0^1 dx\cdot E_1(px)\,\phi(x)\,, \quad E_1(x) = \int_x^\infty \frac{dt}{t} e^{-t} \underset{x\to 0}{\sim} -\ln x + \mathrm{const} + x + \ \ldots\ .$$

К интегралам от функций типа /5/ КФГК с весом $w(x)$ или $w_1(x)$ одинаково неприменимы. В разделе 3 предложен метод построения расширенных квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля /РКФГК/, предназначенных для интегрирования сингулярных функций более общего вида /5/. Метод состоит в многопараметрической "деформации" исходной КФГК с весом $w(x)$ и сводится к решению систем нелинейных уравнений для параметров деформации. Численные результаты, полученные нами в следующих важных для практики случаях [3,4]:

$$w(x) = 1, \quad w_1(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{x}, \\ -\ln x, \\ -\ln x\, e^{-px}, \quad p = 8 \quad \text{или} \quad p = 20, \end{cases}$$

приведены в разделе 4. Для решения возникающих систем нелинейных уравнений был использован авторегуляризованный метод Гаусса-Ньютона [5,6] и программная система REGN [7]. Рассматриваемые РКФГК порядка $N = 6,8,12$ являются подходящими для численного интегрирования в случаях, когда нахождение значений подынтегральной функции [5] связано со значительным объемом вычислений.

2. ЧИСЛЕННОЕ ПОСТРОЕНИЕ СЕМЕЙСТВА ОРТОГОНАЛЬНЫХ МНОГОЧЛЕНОВ И КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ ГАУССА-КРИСТОФФЕЛЯ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ВЕСОМ

Пусть $w(x)$ - весовая функция [1,2]; обозначим через a_k, $k = 0, 1, \ldots$ ее степенные моменты:

$$a_k = \int_0^1 dx\cdot w(x)\cdot x^k\ . \qquad /6/$$

Как известно /см., например, [1,2] /:

а/ существует единственное семейство многочленов

$$P_N(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n^{(N)} x^n\ , \quad N = 0,1,2,\ldots, \qquad /7а/$$

ортогональных на сегменте $[0,1]$ с весом $w(x)$:

$$\int_0^1 dx\, w(x)\, P_N(x)\, P_M(x) = h_N\cdot \delta_{NM}\,; \qquad /7б/$$

б/ узлы x_i и веса w_i, $i = 1,2,\ldots,N$, в КФГК /3/ удовлетворяют нелинейной системе уравнений

$$I_N^{(w)}(x^m) = a_m\,, \quad m = 0,1,\ldots,2N-1\ . \qquad /8/$$

Прямое решение системы /8/ связано с большими трудностями даже при малых $N = 3,4$ [2];

в/ прямое решение /8/ обходят, учитывая, что

$$P_N(x_i) = 0, \quad i = 1,\ldots,N, \qquad /9а/$$

$$w_i = \int_0^1 dx\, w(x) \prod_{j\neq i} (x - x_j) / \prod_{j\neq i} (x_i - x_j)\,, \qquad /9б/$$

и, таким образом, вычисление x_i и w_i сводится к построению семейства ортогональных многочленов $P_N(x)$ [7];

г/ коэффициенты $c_n^{(N)}$ многочлена $P_N(x)$ /7а/ удовлетворяют системе линейных уравнений

$$\sum_{n=0}^{N-1} c_n^{(N)} a_{n+m} = -a_{N+m} c_N^{(N)}\,, \quad m = 0,1,\ldots,N-1\,. \qquad /10/$$

С точностью до общего нормировочного множителя коэффициенты $c_n^{(N)}$ могут быть вычислены на основе /10/; однако системы /10/ плохо обусловлены. Вместо /10/ целесообразно использовать следующую цепочку треугольных систем линейных уравнений для $c_n^{(N)}$:

$$\sum_{n=M}^{N-1} b_n^{(M)}\cdot c_n^{(N)} = d^{(M)}\,, \quad M = 0,1,\ldots,N-1\,, \qquad /11/$$

где

$$b_n^{(M)} = \sum_{m=0}^{M} c_m^{(M)} a_{m+n}\,, \quad d^{(M)} = -\sum_{m=0}^{M} c_m^{(M)} a_{m+N}\,.$$

Система /11/ позволяет вычислить $c_n^{(N)}$, $0 \le n \le N$, при уже известных $c_m^{(M)}$, $b \le m \le M$, $M \le N-1$:

$$c_{N-1}^{(N)} = d^{(N-1)}/b_{N-1}^{(N-1)},$$

$$c_{N-n}^{(N)} = \Big(d^{(N-n)} - \sum_{k=1}^{n-1} b_{N-k}^{(N-n)} c_{N-k}^{(N)}\Big)/b_{N-n}^{(N-n)}, \quad 2 \le n \le N.$$

Недостатком алгоритма /11/ является накопление ошибок округления. Несмотря на это в случае весовых функций $w(x) = -\ln x$: $w(x) = 1/(p+x)^m$, $10^{-4} \le p \le 1$, $1 \le m \le 6$; $w(x) = 1/(\ln^2(x(x+2)) + \pi^2)$ и т.д., он имеет преимущество по сравнению с нахождением коэффициентов ортогональных многочленов на основе системы /10/. Так, например, на ЭВМ типа ЕС при использовании двойной точности удается вычислить ортогональные многочлены степени $N \le 13$. В частности, таким образом были построены КФГК с весом /4/ для вычисления матричных элементов операторов спинового взаимодействия в системе кварк-антикварк[8].

3. КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ С НЕФАКТОРИЗУЕМЫМИ ОСОБЕННОСТЯМИ

Ограничимся для простоты двумя слагаемыми в правой части /5/. Пусть требуется определить зависящие от $L \le N$ параметров z_ℓ, $1 \le \ell \le L$, узлы $x_i = x_i(z)$ и веса $w_i = w_i(z)$ расширенной квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля порядка N:

$$I^{(w)}_{N,L}(\psi(x)\,|\,z) = \sum_{i=1}^{N} w_i(z)\,\psi(x_i(z)), \qquad /12а/$$

так, чтобы РКФГК /12а/ была точной для функций f - типа /5/, если $\phi(x)$ и $\phi_1(x)$ - многочлены степени не выше $2N-L-1$ и $L-1$ соответственно:

$$R^{(w)}_{N,L}\left(\frac{f}{w}\Big|z\right) = 0, \quad R^{(w)}_{N,L}\left(\frac{f}{w}\Big|z\right) \overset{\mathrm{def}}{=} I(f) - I^{(w)}_{N,L}\left(\frac{f}{w}\Big|z\right). \qquad /12б/$$

В предположении, что $\int_0^1 dx\, w_1(x)$ существует, обозначим через β_k интегралы

$$\beta_k = \int_0^1 dx \cdot w_1^{\circ}(x) \cdot x_1^k, \quad k = 0, 1, \dots, L-1. \qquad /13/$$

Узлы x_i и веса w_i в /12а/ удовлетворяют нелинейной системе уравнений, аналогичной системе /8/:

$$I^{(w)}_{N,L}(x^\ell\,|\,z) = \alpha_\ell, \quad \ell = 0, 1, \dots, 2N-L-1, \qquad /14а/$$

$$I^{(w)}_{N,L}\left(x^\ell \cdot \frac{w_1(x)}{w(x)}\Big|z\right) = \beta_\ell, \quad \ell = 0, 1, \dots, L-1. \qquad /14б/$$

Решение системы /14/ связано с такими же трудностями, что и решение /9/; возникает также вопрос о совместимости /14а/ и /14б/. Оказывается возможным, однако, обобщить изложенный в пункте "в" раздела 2 метод решения[9] и так же обойти прямое решение /14/. Определим $Q_N(x) = \prod_{i=1}^{N}(x - x_i) \cdot \mathrm{const}$. Из того факта, что РКФГК

/12/ точна для многочленов ϕ степени $2N-L-1$ при $\phi_1 = 0$ /см. /5//, следует, что $I(wQ_N P_M) = I^{(w)}_{N,L}(Q_N P_M|z) = 0$, $M = 0, 1, \dots, N-L-1$, то есть многочлен $Q_N(x)$ ортогонален с весом $w(x)$ всем $P_M(x)$, $0 \le M \le N-L-1$, и, следовательно,

$$Q_N(x) = P_N(x) + \sum_{\ell=1}^{L} z_\ell P_{N-\ell}(x). \qquad /15/$$

Обозначим нули $Q(x)$ /15/ через $x_i = x_i(z)$, $i \le N$, и $w_i(z)$ - через $x_i(z)$, как в /9б/. Очевидно, что при этом равенства /14а/ автоматически выполняются, в то время как /14б/ превращается в систему нелинейных уравнений для введенных равенством /15/ параметров z_ℓ, $\ell = 1, 2 \dots, L$. И наоборот: если $z = (z_1, \dots, z_L)$ есть решение нелинейной системы /14б/, РКФГК /12/ с узлами $x_i(z)$, являющимися корнями многочлена $Q_N(x)$ /15/, и весами $w_i(z)$, заданными равенствами /9б/, будет точной для функций $f(x)$ типа /5/, если $\phi(x)$ и $\phi_1(x)$ - многочлены степени $2N-L-1$ и $L-1$ соответственно.

Для оценки остаточного члена $R^{(w)}_{N,L}$ /12б/ РКФГК рассмотрим последовательно следующие случаи:

А. $f(x)$ имеет вид /5/ с $\phi_1(x) = 0$. Аналогично /3в,г/ имеем

$$R^{(w)}_{N,L}(\phi\,|\,z) = \frac{z_L h_L}{c_N^{(N)}\, c_{N-L}^{(N-L)}} \cdot \frac{1}{(2N-L)!} \cdot \phi^{(2N-L)}(\xi), \quad 0 < \xi < 1. \qquad /16/$$

Б. $f(x)$ имеет вид /5/ с $\phi(x) = 0$. Тогда

$$\left|R^{(w)}_{N,L}\left(\frac{w_1}{w}x^L\Big|z\right)\right| = \left|\int_0^1 dx\, w_1(x)\, x^L - \sum_{i=1}^{N} w_i \frac{w_1(x_i)}{w(x_i)} x_i^L\right| \le$$

$$\le \left|\int_0^1 dx \cdot w_1(x) \cdot x^L\right| + \sum_{i=1}^{N} w_i \frac{w_1(x_i)}{w(x_i)} x_i^{L-1} = \beta_L + \beta_{L-1}, \qquad /17а/$$

откуда следует

$$\left|R^{(w)}_{N,L}\left(\frac{w_1}{w}\phi_1\Big|z\right)\right| \le (\beta_L + \beta_{L-1})\,\phi_1^{(L)}(\theta)/L!, \quad 0 < \theta < 1. \qquad /17б/$$

Оценки /17/ довольно грубые. Комбинируя /16/ и /17/, для функций f типа /5/ в общем случае получаем

$$\left|R^{(w)}_{N,L}\left(\frac{f}{w}\Big|z\right)\right| \le \frac{z_L h_L}{c_N^{(N)}\, c_{N-L}^{(N-L)}} \cdot \frac{\phi^{(2N-1)}(\zeta)}{(2N-L)!} + \frac{\beta_L + \beta_{L-1}}{L!}\,\phi_1^{(L)}(\theta). \qquad /18/$$

При $L<N$ РКФГК /12/ несимметрична по отношению к "основной" и к "дополнительным" весовым функциям $w(x)$ и $w_1(x)$, ... /5/:

для функций вида $f(x) = w(x)\phi(x)$ остаточный член /16/ убывает быстро с ростом порядка N, в то время как точность вычисления интегралов от функций f вида $f(x) = w_1(x)\phi_1(x)$ улучшается при этом медленно /согласно оценке /17/ остаточный член $R^{(w)}_{N,L}(\frac{w_1}{w}x^{\ell}|z)$ даже не зависит от N /. В этом смысле РКФГК /12/ является лишь деформацией КФГК с весом $w(x)$, вызванной наложением дополнительных условий /14б/. Тем не менее РКФГК является эффективным средством численного интегрирования функций с нефакторизуемыми особенностями типа /5/. Достаточным условием высокой эффективности применения РКФГК /в частном случае весовой функции $w_1(x)$ с единственной особенностью в точке x^* /является быстрое убывание последовательности остаточных членов $R^{(w)}_N(\frac{w_1}{w}(x-x^*)^{\ell})$ /3в/ при $\ell = 0,1,\ldots$.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Изложенный в разделе 3 метод был применен при построении РКФГК в следующих важных для практических задач [3,4] случаях:

$$w(x) = 1, \quad w_1(x) = 1/\sqrt{x}, \qquad /19а/$$

$$w(x) = 1, \quad w_1(x) = -\ln x, \qquad /19б/$$

$$w(x) = 1, \quad w_1(x) = -\ln x \cdot e^{-px}, \quad p \geq 0, \qquad /19в/$$

$$w(x) = 1/(x+p_0)^2, \quad w_1(x) = 1/(x+p_1)^2, \quad 0 < p_0 < p_1 \leq 1. \qquad /19г/$$

Вычисление интегралов от функций типа /5/ с $w(x)$ и $w_1(x)$, заданными /19а/, возможно /после замены переменной интегрирования $x = t^2$/ и с помощью обычной КФГК с весом $w(t) = 1$; при этом, однако, для достижения точности РКФГК порядка N необходима КФГК порядка $N' \sim 2N$.

В табл.1а для весовых функций /19а/ приведены решения z_ℓ, $\ell = 1,\ldots,L$, системы нелинейных уравнений /14б/ с $1 \leq L \leq 4$, $N = 8,12$. Табл.1б содержит значения узлов x_i и весов w_i, $i = 1,\ldots, N$, РКФГК с функциями /19а/ при $N = 8$, $L = 4$ и $N = 12$, $L = 4$. Решения z_ℓ, $1 \leq \ell \leq L$, $L \leq 6$ нелинейной системы /14б/ для весовых функций $w(x) = 1$ и $w_1(x) = -\ln x\, e^{-px}$, $p = 0,\ 8,\ 20$; $N = 6,\ 8,\ 12$ даны в табл. 2, которая иллюстрирует зависимость параметров деформации $z_\ell = z_\ell(L, N, p, \ldots)$ от размерности системы /14б/ L, порядка РКФГК /12/ N и значений параметров весовых функций /типа p в /19в//. В табл.3 приведены значения узлов x_i и весов w_i, $i \leq N$, РКФГК порядка $N = 6,8,12$ для функций /19б/ /являющихся частным случаем /19в/ при $p = 0$/. Табл.4 содержит значения узлов x_i и весов w_i, $i \leq N$, РКФГК порядка $N = 12$, $L = 5$ и $L = 6$ для

Таблица 1а

Решения $z = (z_1, \ldots, z_L)$ системы нелинейных уравнений /14б/ с весовыми функциями $w(x) = 1$ и $w_1(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$

L	ℓ	z_ℓ, N = 8	z_ℓ, N = 12
I	1	0,9169915436433	0,9438629114583
2	1	1,705549491817	1,799980976862
	2	0,716623934933	0,804949599493
3	1	2,379521301488	2,577889035048
	2	1,848622927618	2,196111576155
	3	0,466804416342	0,617556080782
4	1	2,939916132772	3,322222044006
	2	3,154317795721	4,098962666807
	3	1,455477103818	2,223298112751
	4	0,241746845807	0,446651386995

Таблица 1б

Значения узлов x_i и весов w_i, $i = 1,\ldots,N$, РКФГК порядка $N = 8$ и $N = 12$ с функциями $w(x) = 1$ и $w_1(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$

N = 8

i	x_i	w_i
1	0,6974094564687-3	0,3529298846847-2
2	0,1721516608741-1	0,3626480565257-1
3	0,8518988606243-1	0,1035387311747+0
4	0,2257906151648+0	0,1753329892083+0
5	0,4262811584480+0	0,2189725996263+0
6	0,6482873480879+0	0,2167845649147+0
7	0,8436985415181+0	0,1665709710987+0
8	0,9688622397690+0	0,7900603927788-1

N = 12

i	x_i	w_i
1	0,2384022355512-3	0,1214913276116-2
2	0,6172637267326-2	0,1333916434544-1
3	0,3226340648659-1	0,4096695694313-1
4	0,9045258231112-1	0,7564953519260-1
5	0,1826128087752+0	0,1076459185415+0
6	0,3029538300719+0	0,1313523589349+0
7	0,4415559547221+0	0,1438236926252+0
8	0,5863849363330+0	0,1436887071538+0
9	0,7246905974198+0	0,1308650294959+0
10	0,8442406567686+0	0,1064537243980+0
11	0,9344441547349+0	0,7260990456514-1
12	0,9873234126983+0	0,3239009432824-1

Таблица 2

Решения z_ℓ, $\ell = 1, \ldots, L$, нелинейной системы уравнений /14б/ с весовыми функциями $w(x) = 1$ и $w_1(x) = -\ln x \cdot \exp(-px)$

L	ℓ	z_ℓ, N=6, p=0	z_ℓ, N=8, p=0	z_ℓ, N=12, p=0	z_ℓ, N=12, p=8	z_ℓ, N=12, p=20
I	1	0,811903067046	0,855393955150	0,901146418739	0,899920059719	0,897850959878
2	1	1,473088825692	1,593779641177	1,721501681684	1,714275617373	1,700118124636
	2	0,522756440193	0,622577245461	0,734701113832	0,728176186192	0,715419387952
3	1	1,989244840401	2,219768644229	2,464419483997	2,440355943657	2,374978745125
	2	1,254871231123	1,600319314409	2,002758723111	1,961445767183	1,850074217936
	3	0,247248723674	0,372699959409	0,535981987125	0,518409691679	0,471449539827
4	1	2,359411819967	2,733410211202	3,141629386213	3,067169591455	2,935171625026
	2	1,955023159026	2,710934446382	3,653812815648	3,471860775570	3,154545244162
	3	0,660756244060	1,148365831968	1,861542713550	1,715119927243	1,464452067668
	4	0,074373388191	0,173663895229	0,349872271709	0,311134279534	0,246204190653
5	1		3,137433354859	4,041898935168	3,564667522439	3,087920075359
	2		3,779177367843	6,458279840049	4,970503310264	3,600360555533
	3		2,166159657717	5,091363682055	3,376991803959	1,940698771670
	4		0,583912544832	1,976563661123	1,112893527399	0,465872973866
	5		0,058206902808	0,301575273708	0,141475927237	0,036679174354
6	1		3,443835672584			3,662294977880
	2		4,700915311061			5,422421727899
	3		3,221438553010			4,161592809623
	4		1,151885073307			1,757323294183
	5		0,199435019019			0,392467735964
	6		0,012621315333			0,036990638749

Таблица 3

Значения узлов и весов x_i, w_i, $i = 1, \ldots, N$, РКФГК порядка $N = 6, 8, 12$ для функций $w(x) = 1$ и $w_1(x) = -\ln x$

N = 6

i	x_i	w_i
1	0,4629451468112-2	0,1710607148764-1
2	0,5803850103762-1	0,1010432398842+0
3	0,2180638698428+0	0,2173239851307+0
4	0,4755269907537+0	0,2836505480359+0
5	0,7522431389487+0	0,2524235874676+0
6	0,9489767278397+0	0,1284525677939+0

N = 8

i	x_i	w_i
1	0,1730263038853-2	0,6477694678936-2
2	0,2323490783983-1	0,4248872816083-1
3	0,9672775742220-1	0,1075702283078+0
4	0,2391799768348+0	0,1750434137001+0
5	0,4377202081256+0	0,2156941073203+0
6	0,6557915028649+0	0,2125087650649+0
7	0,8471464848567+0	0,1629743717831+0
8	0,9695595093633+0	0,7724269078392-1

N = 12

i	x_i	w_i
1	0,6485817620484-3	0,2436325078629-2
2	0,8865664427414-2	0,1641575470766-1
3	0,3797397840890-1	0,4354105967996-1
4	0,9792935775722-1	0,7660483507417-1
5	0,1903818394194+0	0,1073721843811+0
6	0,3100547355373+0	0,1303603804431+0
7	0,4474565540463+0	0,1424629526309+0
8	0,5908472501067+0	0,1422093641097+0
9	0,7276981980190+0	0,1294645705511+0
10	0,8459553262521+0	0,1052919487523+0
11	0,9351691040750+0	0,7180934981934-1
12	0,9874639179514+0	0,3203127457196-1

Таблица 4

Значения узлов x_i и весов w_i, $i = 1,\dots,N$, РКФГК порядка $N = 12$ с функциями $w(x) = 1$ и $w_1(x) = -\ln x\, e^{-px}$, $p = 8{,}20$

$p = 8$

i	x_i	w_i
1	0,5846925486066-3	0,2191662475181-2
2	0,7935495806874-2	0,1465784260309-1
3	0,3401547935538-1	0,3922024434022-1
4	0,8872539186308-1	0,7078189853620-1
5	0,1755753220668+0	0,1023698897543+0
6	0,2914357146787+0	0,1279297072689+0
7	0,4279652224889+0	0,1431425259524+0
8	0,5734226342933+0	0,1455186845327+0
9	0,7144524122349+0	0,1342971021443+0
10	0,8377411781806+0	0,1102947708758+0
11	0,9315012157296+0	0,7570783816951-1
12	0,9867319743265+0	0,3388783314726-1

$p = 20$

i	x_i	w_i
1	0,7044598903016-3	0,2611461652455-2
2	0,9083277583517-2	0,1625490188244-1
3	0,3678809310154-1	0,4045823483217-1
4	0,9161994176291-1	0,6958155293886-1
5	0,1759900930544+0	0,9883970652008-1
6	0,2879543058014+0	0,1240449917249+0
7	0,4212501187182+0	0,1407864325066+0
8	0,5654631695992+0	0,1454001012936+0
9	0,7073657231746+0	0,1360304995335+0
10	0,8329124170197+0	0,1128879885498+0
11	0,9292226307032+0	0,7803801992184-1
12	0,9862644710136+0	0,3506610844380-1

функций /19в/ при $p = 8$ и $p = 20$. Эти РКФГК представляют интерес в связи с тем, что обеспечивают хорошую относительную точность вычисления интегралов

$$\int_0^1 dx \cdot x^k e^{-px}, \quad \int_0^1 dx \cdot x^k(-\ln x\, e^{-px}) \qquad /20/$$

в широкой области изменения параметров p и k. На рис.1а,б представлены области интегрирования на плоскости (P,k), в которых вычисление интегралов /20/ с помощью РКФГК из табл.4 дает указанное в кружках число верных значений цифр; для сравнения на рис.1в, г показано число верных цифр при вычислении интегра-

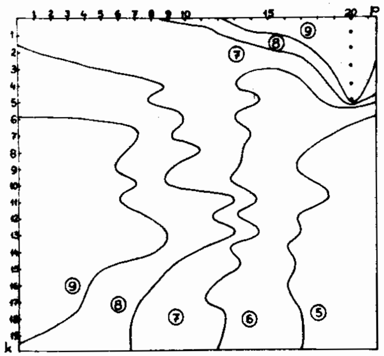

Рис.1а. Число верных знаков в численном значении интеграла $\int_0^1 dx\, e^{-px} x^k$, $0 \le p, k \le 20$, полученном с помощью приведенной в табл.4 РКФГК.

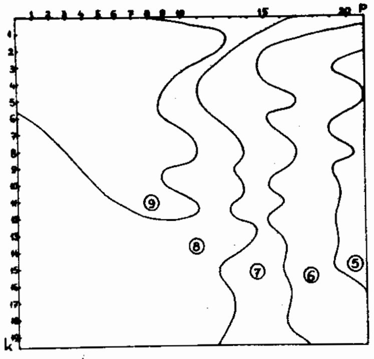

Рис.1б. Число верных знаков в численном значении интеграла $\int_0^1 dx(-\ln x\, e^{-px})x^k$, $0 \le p, k \le 20$, полученном с помощью приведенной в табл.4 РКФГК.

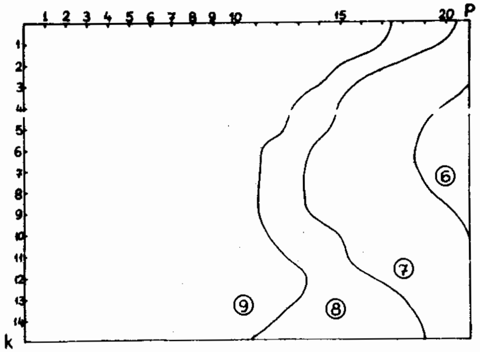

Рис.1в. Число верных знаков в численном значении интеграла $\int_0^1 dx\, e^{-px} x^k$, $0 \le p \le 20$, $k \le 15$, полученном с помощью недеформированной КФГК порядка 12 с весом $w(x) = 1$.

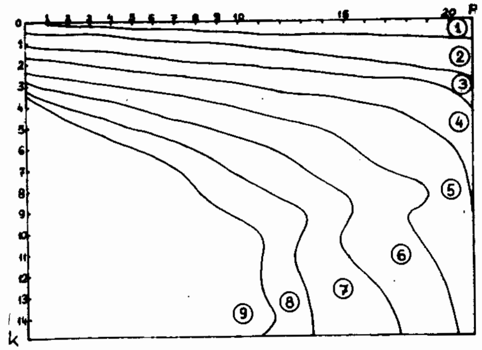

Рис.1г. Число верных знаков в численном значении интеграла $\int_0^1 dx(-\ln x\, e^{-px})\, x^k$, $0 \le p \le 20$, $k \le 15$, полученном с помощью недеформированной КФГК порядка 12 с весом $w(x) = 1$.

лов /20/ с помощью недеформированной КФГК с весом $w(x) = 1$ того же порядка $N = 12$.

При наложении подходящих дополнительных условий /14б/ можно добиться того, чтобы результирующая РКФГК обеспечивала удовлетворительную точность для более широкого класса подынтегральных функций.

РКФГК с весами /19г/ были использованы при вычислении матричных элементов сингулярных операторов в адиабатическом базисе /3,4/.

5. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Выбор конкретных задач, рассмотренных в разделах 2 и 3, в значительной мере основывался на возможности их использования при решении определенных физических проблем. Самостоятельный интерес представляет общее решение некоторых из затронутых вопросов, например численное построение ортогональных многочленов с произвольным весом с учетом плохой обусловленности системы /10/. Особенно важной является проблема совместимости уравнений /14б/, которой определяется область применимости расширенных квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля /12/.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность Д.Караджову за активное содействие на всех этапах работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. "Наука", М., 1966.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы. "Наука", М., 1978.
3. Бакалов Д.Д., Виницкий С.И., Мележик В.С. ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 1629.
4. Бакалов Д.Д. ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 1149.
5. Александров Л. ОИЯИ, Р5-5515, Дубна, 1970.
6. Александров Л. ОИЯИ, Р5-7258, Дубна, 1973.
7. Александров Л., Дренска М., Караджов Д. ОИЯИ, Б1-11-82-767, Дубна, 1982.
8. Alexandrov L. et al. J.Compt.Phys., 1982, vol. 45, No 2, p. 291.
9. Акишин П.Г., Жидков Е.П. ОИЯИ, 11-81-395, Дубна, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 декабря 1983 года.

Александров Л., Бакалов Д. 11-83-876

Квадратурные формулы для интегрирования функций с особенностями

Рассмотрены методы построения квадратурных формул для численного интегрирования функций с особенностями. Приведены алгоритмы численного построения ортогональных многочленов с произвольным весом и соответствующих квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля для интегрирования функций с факторизуемыми особенностями. Для классов функций с нефакторизуемыми особенностями разработан метод расширения квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля, сводящийся к решению системы нелинейных уравнений. Приведены таблицы со значениями узлов и весов расширенных квадратурных формул для функций с логарифмической особенностью, а также для некоторых других, часто встречающихся типов функций с особенностями.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Alexandrov L., Bakalov D. 11-83-876

Quadrature Formulas for Integrating Functions with Singularities

Methods for constructing a quadrature formulas for numerical integration of functions with singularities are considered. The algorithms for numerical construction of ortogonal polinomials with an arbitrary weight and suitable Gauss-Kristoffel quadrature formulas for integrating functions with factorable singularities are given. A method for expansion the quadrature formulas of Gauss-Kristoffel which reduces to solving a system of nonlinear equations, is developed for a class of functions with non-factorable singularities. Tables are presented which contain points and weights of expanded quadrature formulas for functions with logarithmic and some other singularities.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой