



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 75 за 2022 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

П.А. Бахвалов

О точности квадратурных
формул для вычисления
решения задачи о распаде
гауссового импульса

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бахвалов П.А. О точности квадратурных формул для вычисления решения задачи о распаде гауссового импульса // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 75. 44 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-75>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-75>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук

П. А. Бахвалов

**О точности квадратурных формул
для вычисления решения задачи
о распаде гауссового импульса**

Москва — 2022

Бахвалов П. А.

О точности квадратурных формул для вычисления решения задачи о распаде гауссового импульса

В статье рассматривается задача о распространении волны в свободном пространстве от начального импульса в форме гауссиана для двумерного волнового уравнения. Решение этой задачи выражается в интегральном виде. Ранее предложенный алгоритм вычисления интегралов оптимизируется за счёт использования более точных оценок погрешности квадратурных формул.

Ключевые слова: численное интегрирование, квадратура Гаусса

Pavel Alexeevich Bakhvalov

On evaluation of the solution of Gaussian impulse propagation

We consider the solution of the 2D wave equation with the initial data prescribing a Gaussian pulse. This solution has integral representations. Previously proposed algorithm of its evaluation is optimized by the use of more precise error bounds of numerical quadratures.

Key words: numerical integration, Gaussian quadrature

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 22-11-00199.

Оглавление

1	Введение	3
2	Оценки погрешности квадратурных формул	4
3	Решение задачи и его аппроксимация	18
4	Иные способы интегрирования	38
	Список литературы	43

1. Введение

Рассматривается задача о распространении волны в свободном двумерном пространстве от начального импульса в форме гауссиана:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \left(r \frac{\partial W}{\partial r} \right) = 0, \quad t > 0, \quad r > 0, \quad (1.1)$$

$$W|_{t=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial W}{\partial t} \right|_{t=0} = -p_0(r) = -\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right). \quad (1.2)$$

Целью настоящей работы является создание алгоритма для быстрого вычисления пульсаций физических переменных

$$p'(t, r) = -\frac{\partial W}{\partial t}, \quad u'_r(t, r) = \frac{\partial W}{\partial r}$$

для заданных $t, r \geq 0$ с заданной точностью 2ε . Величина W имеет смысл волнового потенциала, p' – пульсации давления, u'_r – пульсации радиальной скорости. Всюду в настоящей работе предполагается, что $\varepsilon \leq 10^{-16}$.

Автор уже рассматривал задачу (1.1)–(1.2) в своей предыдущей работе [1]. Предложенный в ней алгоритм основывается на трёх интегральных представлениях для решения, каждое из которых используется в своём диапазоне t и r . Для этого алгоритма была доказана оценка требуемого числа узлов квадратуры $O((-\ln \varepsilon)^{3/2})$ с константой, равномерной по t и r .

В настоящей работе будет построен алгоритм, использующий не более $O(-\ln \varepsilon)$ узлов квадратуры. Константа в этой оценке также не зависит от t и r . Этот результат достигается за счёт использования более точных оценок погрешности квадратурных формул Гаусса, квадратурных формул с равномерным шагом, а также представления решения в виде асимптотического ряда при больших t . Также уделяется внимание тому, как избежать накопления арифметической погрешности.

Разработанный алгоритм внедрён в библиотеку точных решений ColESo (Collection of Exact Solutions for verification of numerical algorithms for simulation of compressible flows) [2]. Для рассматриваемого решения допускается использование арифметики двойной, четверной и восьмерной точности. Библиотека ColESo имеет открытый исходный код и доступна для скачивания.

2. Оценки погрешности квадратурных формул

В этом разделе мы приведём некоторые известные методы оценки погрешности квадратурных формул, при необходимости адаптируя их к интересующим нас случаям.

2.1. Некоторые сведения об ортогональных многочленах. Пусть $-\infty \leq a < b \leq \infty$, а $w(x)$ – почти всюду положительная функция из $L_1(a, b)$. Через p_n обозначим n -й элемент последовательности многочленов с единичным старшим коэффициентом, ортогональных в смысле скалярного произведения

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b fgwdx.$$

Пусть

$$\gamma_n = \langle p_n, p_n \rangle = \int_a^b p_n^2(x)w(x)dx. \quad (2.1)$$

В этом разделе ограничимся многочленами Якоби и их частным случаем – многочленами Лежандра. Другие многочлены будут рассмотрены в разделе 4. В [3], §22.2, для многочленов $P_n(x) = k_n p_n(x)$ даны значения $h_n = \langle P_n, P_n \rangle$ (значения k_n также приведены), откуда $\gamma_n = h_n/k_n^2$.

Многочлены Якоби $P^{(\alpha, \beta)}(x)$ имеют два параметра (α и β) и являются ортогональными в смысле скалярного произведения

$$\int_{-1}^1 f(x)g(x)(1-x)^\alpha(1+x)^\beta dx.$$

Для многочленов Якоби с $\alpha = 0$, нормированных условием $P_n^{(0, \beta)}(1) = 1$, справедливо¹

$$h_n = \frac{2^{\beta+1}}{2n + \beta + 1}, \quad k_n = 2^{-n} \frac{\Gamma(2n + 1 + \beta)}{n! \Gamma(n + 1 + \beta)},$$

откуда

$$\gamma_n = \frac{2^{\beta+1}}{2n + \beta + 1} \frac{2^{2n} (n!)^2 (\Gamma(n + 1 + \beta))^2}{(\Gamma(2n + 1 + \beta))^2}.$$

¹То, что под $\binom{z}{w}$ в [3] понимается $\Gamma(z + 1)/\Gamma(w + 1)/\Gamma(z - w + 1)$, следует из формулы 6.1.21.

В частности, при $\beta = -1/2$ имеем

$$\gamma_n = \frac{\sqrt{2}}{2n + 1/2} \frac{2^{2n}(n!)^2(\Gamma(n + 1/2))^2}{(\Gamma(2n + 1/2))^2} = \frac{\sqrt{2}}{2n + 1/2} \left(\frac{4^n ((2n)!)^2}{(4n)!} \right)^2.$$

Многочлены Лежандра являются частным случаем многочленов Якоби при $\alpha = \beta = 0$. Отсюда получаем

$$\gamma_n = \frac{2}{2n + 1} \frac{2^{2n}(n!)^2(\Gamma(n + 1))^2}{(\Gamma(2n + 1))^2} = \frac{2}{2n + 1} \left(\frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} \right)^2.$$

2.2. Оценка точности квадратур Гаусса через старшие производные.

Пусть $-\infty \leq a < b \leq \infty$, $f(x)$ – достаточно гладкая функция, а $p(x)$ – почти всюду положительная функция из $L_1(a, b)$. Рассмотрим интеграл

$$\int_a^b f(x)w(x)dx.$$

Для погрешности n -точечной квадратурной формулы Гаусса, записанной для вычисления этого интеграла, справедливо представление [4]

$$R_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \gamma_n, \quad \eta \in (a, b), \quad (2.2)$$

где γ_n определено (2.1).

Оценку погрешности можно получить, оценив производную в (2.2) через максимум её модуля. В частности, для формулы Гаусса – Лежандра при $a = -1$, $b = 1$ получаем

$$E_n(f) = \frac{2^{2n+1}}{2n + 1} \frac{(n!)^4}{(2n!)^3} \sup_{-1 < x < 1} \left| \frac{d^{2n} f(x)}{dx^{2n}} \right|. \quad (2.3)$$

Проанализируем эффективность этой оценки на двух примерах. Для функции $f(x) = e^x$ выполняется $E_{10}(f) \approx 1.216 \cdot 10^{-24}$. Оценка (2.3) даёт $E_{10}(f) \leq 3.27 \cdot 10^{-24}$, что является достаточно хорошим приближением. В то же время для функции $f(x) = (x + 1.25)^{-1}$ выполняется $E_{10}(f) \approx 2.879 \cdot 10^{-6}$, тогда как оценка (2.3) приобретает вид

$$E_n(f) \leq \frac{2^{2n+1}}{2n + 1} \frac{n!^4}{(2n!)^3} 4^{2n+1} (2n)! = \frac{8^{2n+1}}{2n + 1} \frac{n!^4}{(2n)!^2}.$$

Это неравенство верное, но бессмысленное: правая часть растёт с ростом n и, в частности, при $n = 10$ равна $1.287 \cdot 10^7$.

2.3. Оценки на основе разложения по полиномам Чебышева. Историю вопроса об оценках точности квадратурных формул Гаусса и большой обзор литературы можно найти в [5]. Мы рассмотрим один из методов получения оценок, которые обычно оказываются точнее, чем оценки, основанные на представлении (2.2). Он применим только в случае, когда отрезок интегрирования конечен, поэтому без ограничения общности будем рассматривать интегралы вида

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x)w(x)dx.$$

Пусть $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$, $x \in [-1,1]$, – полиномы Чебышева. Достаточно гладкая функция f (в частности, $f \in C^2[-1,1]$) может быть представлена рядом, равномерно сходящимся на $[-1,1]$:

$$f(x) = \sum'_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x), \quad (2.4)$$

где штрих означает, что нулевой член суммы берётся с коэффициентом $1/2$. Коэффициенты ряда выражаются формулой

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(\cos y) \cos(ny) dy. \quad (2.5)$$

Введём обозначение

$$\mu_0 = \int_{-1}^1 w(x)dx. \quad (2.6)$$

При $f = T_n$ погрешность квадратурной формулы не превосходит $2\mu_0$, поскольку точное и численное значения интеграла от него не превосходят μ_0 . А если $n \leq 2m - 1$, где m – число узлов квадратуры, то квадратурная формула точна. Отсюда сразу следует оценка

$$E_m(f) \leq 2\mu_0 \sum_{n=2m}^{\infty} |a_n|. \quad (2.7)$$

Пусть f является бесконечно дифференцируемой на $[a, b] = [-1,1]$. Тогда, пользуясь представлением

$$T_n(x) = (-1)^n \frac{2^n n!}{(2n)!} \sqrt{1-x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left[(1-x^2)^{n-1/2} \right], \quad n > 0,$$

коэффициенты a_n можно оценить путём интегрирования (2.5) по частям n раз. В результате получается оценка [6]

$$|a_n| \leq \frac{1}{2^{n-1}n!} \max_{-1 \leq x \leq 1} |f^{(n)}(x)|.$$

Как было замечено в [7], для функции $f(x) = (x + 1.25)^{-1}$ эта оценка даёт $|a_n| \leq 2^{n+3}$ и в результате (2.7) оказывается столь же бесполезной, что и (2.3). Таким образом, требуется более точная оценка коэффициентов a_n .

Рассмотрим случай $[a, b] = [-1, 1]$. Пусть $f(x)$ является регулярной в некоторой области на комплексной плоскости, содержащей отрезок $[-1, 1]$. В [7] предложен следующий способ оценки коэффициентов a_n . Воспользуемся интегральной формулой Коши:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{f(z)}{z - x} dz,$$

где Γ – любой контур, содержащий отрезок $[-1, 1]$ и такой, что внутри него функция f регулярная. Подстановка в (2.5) даёт

$$a_n = \frac{1}{i\pi^2} \oint_{\Gamma} f(z) K_n(z) dz, \quad (2.8)$$

$$K_n(z) = \int_0^{\pi} \frac{\cos(ny)}{z - \cos y} dy.$$

Последний интеграл вычисляется аналитически.

Утверждение 1. *Справедливо равенство*

$$K_n(z) = \frac{\pi}{\sqrt{z^2 - 1}(z + \sqrt{z^2 - 1})^n}, \quad (2.9)$$

причём знак корня выбирается таким образом, чтобы $|z + \sqrt{z^2 - 1}| > 1$.

В [7] доказательство этого утверждения оставлено читателю; мы это доказательство приведём.

Доказательство. Вначале воспользуемся симметрией:

$$K_n(z) = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(ny)}{z - \cos y} dy.$$

Сделаем замену переменных $\xi = \exp(iy)$. Имеем $d\xi = i\xi dy$,

$$K_n(z) = \frac{1}{2} \oint_{|\xi|=1} \frac{\xi^n + \xi^{-n}}{2} \frac{1}{z - (\xi + \xi^{-1})/2} \frac{d\xi}{i\xi} = \frac{i}{2} \oint_{|\xi|=1} \frac{\xi^n + \xi^{-n}}{\xi^2 - 2z\xi + 1} d\xi,$$

причём контур обходится против часовой стрелки. Подынтегральная функция является мероморфной: она имеет полюс порядка n в точке $\xi = 0$ и полюса первого порядка в точках

$$\xi_{\pm} = z \pm \sqrt{z^2 - 1}.$$

Ровно один из этих двух полюсов лежит внутри единичного круга. Действительно, произведение $\xi_+ \xi_-$ равно единице, поэтому противное возможно только тогда, когда $\xi_{\pm} = \exp(\pm i\phi)$. Но в этом случае $z = (\xi_+ + \xi_-)/2 \in [-1, 1]$, что невозможно, так как $z \in \Gamma$. Далее предполагается, что знак корня выбран таким образом, что $|\xi_+| > 1$ и $|\xi_-| < 1$.

По теореме Коши о вычетах $K_n(z)$ равно сумме вычетов в $\xi = 0$ и $\xi = \xi_-$, умноженной на $-\pi$. Для вычисления вычета в ξ_- подынтегральная функция умножается на $(\xi - \xi_-)$, после чего берётся предельный переход при $\xi \rightarrow \xi_-$. Следовательно, этот вычет равен

$$\text{res}_{\xi_-} \left(\frac{\xi^n + \xi^{-n}}{\xi^2 - 2z\xi + 1} \right) = \frac{\xi_+^n + \xi_-^n}{\xi_- - \xi_+}.$$

Вычет в нуле вычисляется по формуле

$$\text{res}_0 \left(\frac{\xi^n + \xi^{-n}}{\xi^2 - 2z\xi + 1} \right) = \frac{1}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(\frac{1 + \xi^{2n}}{\xi^2 - 2z\xi + 1} \right) \Big|_{\xi=0}.$$

Очевидно, что слагаемое ξ^{2n} можно опустить. Далее,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi^2 - 2z\xi + 1} &= \frac{1}{\xi_+ - \xi_-} \left(\frac{1}{\xi - \xi_-} - \frac{1}{\xi - \xi_+} \right) = \\ &= -\frac{1}{\xi_+ - \xi_-} \left(\frac{1/\xi_-}{1 - \xi/\xi_-} - \frac{1/\xi_+}{1 - \xi/\xi_+} \right). \end{aligned}$$

Разлагая в ряд Тейлора в $\xi = 0$, получаем, что

$$\text{res}_0 \left(\frac{\xi^n + \xi^{-n}}{\xi^2 - 2z\xi + 1} \right) = -\frac{1}{\xi_+ - \xi_-} \left(\frac{1}{\xi_-^n} - \frac{1}{\xi_+^n} \right) = -\frac{\xi_+^n - \xi_-^n}{\xi_+ - \xi_-}.$$

После сложения вычетов растущее с n слагаемое сокращается, и в результате получаем

$$K_n(z) = (-\pi) \frac{2\xi_-^n}{\xi_- - \xi_+} = \frac{\pi}{\sqrt{z^2 - 1}} \frac{\xi_-^n}{\xi_+^n},$$

что совпадает с доказываемой формулой. □

Удобно выбрать контур Γ , задаваемый равенством

$$|z + \sqrt{z^2 - 1}| = \rho, \quad (2.10)$$

где $\rho > 1$. Этот контур является эллипсом с полуосями $(\rho \pm \rho^{-1})/2$ и фокусами в точках $z = \pm 1$. На этом контуре

$$|\sqrt{z^2 - 1}| \geq \rho - \frac{\rho + \rho^{-1}}{2} \geq \rho - 1.$$

Тогда, если подынтегральная функция регулярная внутри Γ , сделаем замену переменных $z = (\xi + \xi^{-1})/2$, тогда ξ будет пробегать окружность радиуса ρ с центром в начале координат. При этом

$$\int_{\Gamma} \frac{1}{|\sqrt{z^2 - 1}|} |dz| = \int \frac{2}{|\xi - \xi^{-1}|} \frac{1}{2} |1 - \xi^{-2}| |d\xi| = \frac{1}{\rho} 2\pi\rho = 2\pi$$

и

$$|a_n| \leq \frac{1}{\pi^2} \int_{\Gamma} |f(z)| |K_n(z)| dz \leq \frac{1}{\pi} \frac{\max_{\Gamma} |f(z)|}{\rho^n} \int_{\Gamma} \frac{1}{|\sqrt{z^2 - 1}|} |dz| \leq 2 \frac{\max_{\Gamma} |f(z)|}{\rho^n}.$$

Подставляя эту оценку в (2.7) и применяя формулу суммы геометрической прогрессии, получаем итоговую оценку

$$E_m(f) \leq 4\mu_0 \frac{\max_{\Gamma} |f(z)|}{\rho^{2m}} \frac{\rho}{\rho - 1}. \quad (2.11)$$

2.4. Случай точки ветвления на оси. Рассмотрим более сложный случай, когда подынтегральная функция имеет на действительной оси точку ветвления:

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) w(x) dx, \quad f(x) = \frac{g(x)}{\sqrt{x - c}}, \quad (2.12)$$

где $c \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$. Будем считать, что значение c заранее неизвестно, то есть мы не можем положить $w(x)(x - c)^{-1/2}$ в качестве веса. Оценим коэффициенты разложения функции f по полиномам Чебышёва.

Если c лежит вне контура и достаточно далеко от него, можно пользоваться оценкой (2.11) для функции f . Если c лежит внутри контура, оценку погрешности квадратурной формулы также можно получить. В [7] этот случай был рассмотрен в предположении, что интеграл по

эллиптическому контуру с полюсами $(\rho \pm \rho^{-1})/2$ стремится к нулю $\rho \rightarrow \infty$. В интересующих нас случаях последнее предположение не выполняется, поэтому мы будем рассматривать случай конечных значений ρ .

Пусть Γ – эллиптический контур, заданный (2.10). Вначале предположим, что точка c лежит вне этого контура. Перепишем (2.8) и (2.9):

$$a_n = \frac{1}{i\pi^2} \oint_{\Gamma} \frac{g(x)}{\sqrt{x-c}} K_n(z) dz, \quad K_n(z) = \frac{\pi}{\sqrt{z^2-1}(z+\sqrt{z^2-1})^n}. \quad (2.13)$$

Отсюда

$$|a_n| \leq \frac{1}{\pi\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)| \int_{\Gamma} \frac{1}{\sqrt{|z-c|}\sqrt{|z^2-1|}} |dz|.$$

Замена переменных $z = (\xi + \xi^{-1})/2$ переводит этот эллипс в окружность радиуса ρ с центром в начале координат, причём

$$\frac{1}{\sqrt{|z^2-1|}} |dz| = \frac{|d\xi|}{\rho}.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} |a_n| &\leq \frac{1}{\pi\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)| \int \frac{1}{\rho} \left| \frac{\xi + \xi^{-1}}{2} - c \right|^{-1/2} |d\xi| = \\ &= \frac{1}{\pi\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)| \int_0^{2\pi} \left| \frac{\rho e^{i\phi} + \rho^{-1} e^{-i\phi}}{2} - c \right|^{-1/2} d\phi. \end{aligned}$$

Нам важно показать, что интеграл в последнем выражении может быть оценен величиной, не зависящей от c . Для этого достаточно воспользоваться тем, что модуль больше или равен модулю мнимой части:

$$|a_n| \leq \left| \frac{\rho - \rho^{-1}}{2} \right|^{-1/2} \frac{1}{\pi\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)| \int_0^{2\pi} |\sin \phi|^{-1/2} d\phi.$$

$$|a_n| \leq |\rho - \rho^{-1}|^{-1/2} \frac{8K(1/2)}{\pi\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)|, \quad (2.14)$$

где $K(1/2) \approx 1.85407$ – полный эллиптический интеграл первого рода с параметром $1/2$.

Теперь рассмотрим случай, когда c лежит внутри эллиптического контура. Тогда выберем контур Γ , полученный объединением эллипса, разреза, соединяющего какую-либо точку эллипса с точкой c , и бесконечно

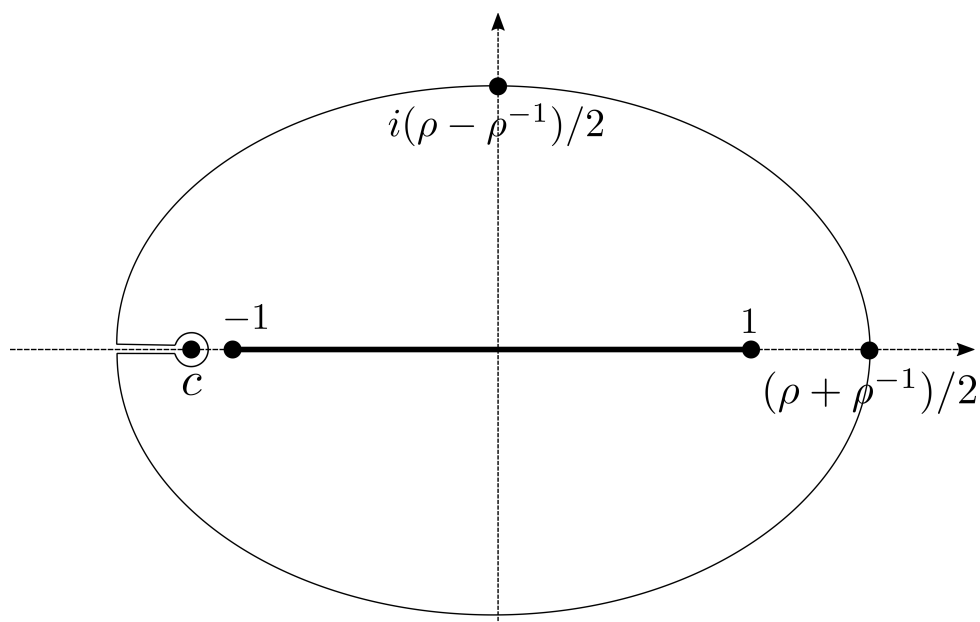


Рис. 1. Контур интегрирования при наличии точки ветвления на оси

малой окружности вокруг c , см. рис. 1. Формулы (2.13) при этом остаются справедливыми. Интегралы по окружности стремятся к нулю, а разность интегралов по двум сторонам разреза нужно учесть. Приближённое выражение для этой добавки даётся формулой (37) в [7], в которую нужно подставить $\phi = -1/2$ и $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$:

$$\tilde{a}_n \approx \frac{2(c^2 - 1)^{-1/4}}{\sqrt{\pi}\sqrt{n}(|c| + \sqrt{c^2 - 1})^n} g(c). \quad (2.15)$$

Суммирование модулей правых частей (2.14) и (2.15) даёт требуемую оценку на коэффициенты разложения по полиномам Чебышева.

2.5. Интегрирование функций, содержащих гауссиан. Всюду далее через 2ε будем обозначать требуемую точность вычисления интеграла. Также введём обозначение

$$H = \sqrt{-2 \ln \varepsilon}.$$

Начнём с интеграла вида

$$\int_a^b f(x) \exp\left(-\frac{(\alpha(x - x_0))^2}{2}\right) dx, \quad (2.16)$$

где $-\infty \leq a < b \leq \infty$, $\alpha > 0$, $x_0 \in \mathbb{R}$. Функция $f(x)$ предполагается аналитической на $[a, b]$ и удовлетворяющей $|f(x)| \leq c(1 + |x|^m)$, $m \in \mathbb{N}$.

Поскольку гауссиан быстро убывает при $x \rightarrow \pm\infty$, можно ограничить область интегрирования, так что интеграл по оставшейся части будет по модулю меньше ε . Положим

$$(\tilde{a}, \tilde{b}) = (x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H}, x_0 + \alpha^{-1}\tilde{H}) \cap (a, b),$$

где $\tilde{H} \geq \alpha \max\{\hat{a}, \hat{b}\}$, а \hat{a} и \hat{b} определяются из условий

$$\int_{-\infty}^{\hat{a}} \exp\left(-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\right) |f(x)| dx < \frac{\varepsilon}{2}, \quad \int_{\hat{b}}^{\infty} \exp\left(-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\right) |f(x)| dx < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Чаще всего $|f(x)| \lesssim 1$ и можно выбирать $\tilde{H} \approx H$. Интервал $(x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H}, x_0 + \alpha^{-1}\tilde{H})$, на котором с интересующей нас точностью гауссиан отличен от нуля, будем называть *эффективным носителем гауссиана*. Для вычисления интеграла по нему могут использоваться квадратурные формулы Гаусса – Лежандра либо, если эффективный носитель гауссиана лежит целиком внутри (a, b) , могут использоваться квадратуры с равномерным шагом, см. раздел 2.6.

Чуть сложнее обстоит дело в случае интегралов вида

$$\int_0^b f(x) \exp\left(-\frac{(\alpha(x-x_0))^2}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{x}} dx,$$

где $0 < b \leq \infty$, $\alpha > 0$. Функция $f(x)$ также предполагается аналитической на $[0, b]$ и такой, что $|f(x)| \leq c(1 + |x|^m)$, $m \in \mathbb{N}$. Как и в предыдущем случае, можно ограничиться аппроксимацией интеграла по области

$$(x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H}, x_0 + \alpha^{-1}\tilde{H}) \cap (0, b),$$

где \tilde{H} определяется аналогично.

Если $x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H} < 0$, то один конец этого интервала находится в начале координат. Линейным преобразованием $x = (\xi + 1) \min\{b, x_0 + \alpha^{-1}\tilde{H}\}$ интеграл приводится к виду

$$\int_{-1}^1 \frac{\tilde{f}(\xi)}{\sqrt{\xi + 1}} d\xi,$$

где \tilde{f} – аналитическая функция, и может быть вычислен по квадратурным формулам Гаусса – Якоби. Если же $x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H} > \delta$, то можно использовать квадратурные формулы Гаусса – Лежандра. Величину δ обычно можно выбрать, например, равной $1/H$. Если окажется так, что $0 < x_0 - \alpha^{-1}\tilde{H} < \delta$,

стоит расширить интервал интегрирования до $(0, \min\{x_0 + \alpha^{-1}\tilde{H}, b\})$ и воспользоваться квадратурными формулами Гаусса – Якоби. Опять же, если эффективный носитель гауссиана лежит целиком внутри (a, b) , то квадратуры Гаусса – Лежандра будут заменяться квадратурами с равномерным шагом, см. раздел 2.6.

Для оценки погрешности квадратурных формул Гаусса – Лежандра или Гаусса – Якоби будем пользоваться оценками на основе эллиптических контуров. Эти оценки зависят от ρ , то есть от выбора контура. Полезно заранее оценить значения ρ , которые будут использоваться. Для простоты будем рассматривать интегралы вида (2.16) и будем предполагать, что $|f(z)|$ растёт при $|z| \rightarrow \infty$ не слишком быстро (например, полиномиально). Тогда после масштабирования координат

$$x = \frac{\tilde{a} + \tilde{b}}{2} + \frac{\tilde{b} - \tilde{a}}{2}\xi$$

имеем

$$\begin{aligned} I &= \frac{\tilde{b} - \tilde{a}}{2} \int_{-1}^1 f(x(\xi)) \exp\left(-\frac{\alpha^2(x(\xi) - x_0)^2}{2}\right) d\xi = \\ &= \frac{\tilde{b} - \tilde{a}}{2} \int_{-1}^1 f(x(\xi)) \exp\left(-\frac{\beta^2(\xi - \xi_0)^2}{2}\right) d\xi, \end{aligned}$$

причём $\beta = \alpha(\tilde{b} - \tilde{a})/2 \leq \tilde{H}$.

Заметим, что

$$|\exp(-z^2)| = \exp((\operatorname{Im}z)^2 - (\operatorname{Re}z)^2), \quad (2.17)$$

Пренебрегая множителями порядка единицы и считая таковым $\max|f(z)|$, предполагая $\tilde{H} \approx H$, запишем оценку (2.11):

$$E_m(f) \lesssim \frac{1}{\rho^{2m}} \exp\left(\frac{1}{2}H^2 \left(\frac{\rho - \rho^{-1}}{2}\right)^2\right).$$

Эта оценка выполняется при любом $\rho > 1$. Приравнявая $E_m(f)$ к $\varepsilon \equiv \exp(-H^2/2)$, получаем

$$m \approx H^2 \min_{\rho > 1} \frac{(\rho + \rho^{-1})^2}{16 \ln \rho}.$$

Минимум достигается при $\rho \approx 2.16$ и равен $m \approx 0.558H^2$. Далее в оценках мы обычно будем использовать значение $\rho = 1 + \sqrt{2}$, тогда полуоси эллипса будут равны $\sqrt{2}$ и 1 соответственно. При этом $m \approx 0.57H^2$.

2.6. Квадратура с равномерным шагом.

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-x^2/2) dx. \quad (2.18)$$

Пусть эффективный носитель гауссиана лежит на отрезке $[-\tilde{H}, \tilde{H}]$ и на этом отрезке $f(x)$ является аналитической. В этом случае использование квадратурной формулы Гаусса – Лежандра на $[-\tilde{H}, \tilde{H}]$ возможно, но неэффективно, так как она даёт сгущение узлов к концам отрезка. Логично использовать квадратурные формулы Гаусса – Эрмита (т. е. выбрать $\exp(-x^2/2)$ в качестве весовой функции). У неё узлы сгущаются к центру гауссиана. Однако оценки на основе эллиптического контура невозможны ввиду бесконечной области интегрирования, а оценки на основе представления остаточного члена (2.2) могут быть слишком грубыми (например, когда подынтегральная функция содержит множитель ξ^α , $\alpha \notin \mathbb{N} \cup \{0\}$).

Промежуточным решением является аппроксимация интеграла квадратурой с равномерным шагом. Оценка её погрешности предложена в [8]. В этой работе функция $f(x)$ предполагается регулярной в некоторой полосе, содержащей действительную ось. Мы повторим этот анализ при более слабом предположении, допуская наличие интегрируемых особенностей у подынтегральной функции вне эффективного носителя гауссиана.

Утверждение 2. *Рассмотрим интеграл (2.18) и $(2n + 1)$ -точечную квадратурную формулу для его аппроксимации:*

$$\hat{J} = h \sum_{k=-n}^n \exp\left(-\frac{(kh)^2}{2}\right) f(kh),$$

где $h \leq \pi$. Обозначим $\hat{H} = (n + 1/2)h$. Пусть $f(z)$ является аналитической при $|\operatorname{Re}z| \leq \hat{H}$, $|\operatorname{Im}z| \leq 2\pi/h$; пусть

$$f_0 = \max_{|\operatorname{Re}z| \leq \hat{H}, |\operatorname{Im}z| = 2\pi/h} |f(z)|, \quad f_1 = \max_{|\operatorname{Re}z| = \hat{H}, |\operatorname{Im}z| \leq 2\pi/h} |f(z)|.$$

Тогда справедливо неравенство

$$\begin{aligned} |I - \hat{J}| \leq & \left| \left(\int_{-\infty}^{-\hat{H}} + \int_{\hat{H}}^{\infty} \right) f(x) \exp(-x^2/2) dx \right| + \\ & + \frac{4h}{\pi} \exp\left(-\frac{\hat{H}^2}{2}\right) f_1 + \frac{2\sqrt{2\pi}}{1 - \exp(-4)} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{h^2}\right) f_0. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Доказательство. Введём

$$J = \int_{-\hat{H}}^{\hat{H}} f(x) \exp(-x^2/2) dx.$$

Заметим, что J и \hat{J} не меняются при замене $f(x)$ на $g(x) = (f(x) + f(-x))/2$.

Пусть Γ – прямоугольный контур с вершинами $\pm \hat{H} \pm i\alpha/h$ (α выберем позже); Γ_+ и Γ_- – части этого контура, расположенные в верхней и нижней полуплоскости соответственно (обход каждой из них против часовой стрелки, глядя из начала координат). Тогда

$$\hat{J} = \oint_{\Gamma} g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz = \left(\int_{\Gamma_+} + \int_{\Gamma_-} \right) g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz.$$

Заметим, что

$$\left(\int_{\Gamma_+} - \int_{\Gamma_-} \right) g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz = \int_{\Gamma_+} g(z) \exp(-z^2/2) dz = -J.$$

Первое равенство в этой цепочке вытекает из того, что при отображении $z \rightarrow -z$ функция g не меняется, dz заменяется на $-dz$, и тождества

$$\frac{1}{1 - \exp(z)} + \frac{1}{1 - \exp(-z)} = \frac{1}{1 - \exp(z)} + \frac{\exp(z)}{\exp(z) - 1} = 1.$$

Второе равенство следует из голоморфности подынтегральной функции. Тогда погрешность вычисления интеграла равна

$$E = \hat{J} - J = \int_{\Gamma_+} 2g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz.$$

Интеграл по Γ_+ распадается на два интеграла по вертикальным отрезкам γ_+ , γ_- и одному горизонтальному γ_0 . Начнём с рассмотрения интеграла по γ_0 . При этом $z = x + i\alpha/h$, знаменатель равен

$$1 - \exp(-2\pi iz/h) = 1 - \exp(-2\pi ix/h) \exp(2\alpha\pi/h^2).$$

Тогда

$$\left| \int_{\gamma_0} 2g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz \right| \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \int_{-\hat{H}}^{\hat{H}} 2 \left| g(x + i\pi/h) \frac{\exp(-x^2/2) \exp(\alpha^2/h^2/2)}{\exp(2\pi\alpha/h^2) - 1} \right| dx \leq \\ &\leq 2 \exp\left(\frac{\alpha^2 - 4\pi\alpha}{2h^2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{2\pi\alpha}{h^2}\right)\right)^{-1} \int_{-\hat{H}}^{\hat{H}} |g(x + i\alpha/h)| \exp(-x^2/2) dx. \end{aligned}$$

Минимум первого множителя достигается при $\alpha = 2\pi$ и равен $\exp(-2\pi^2/h^2)$, поэтому выберем $\alpha = 2\pi$. По условию $h \leq \pi$, поэтому второй сомножитель не превосходит $(1 - \exp(-4))^{-1}$. Последний сомножитель не превосходит $f_0\sqrt{2\pi}$. Таким образом, интеграл по γ_0 не превосходит последнего слагаемого в (2.19).

На вертикальных отрезках $z = \pm\hat{H} + iy$, $0 \leq y \leq \alpha/h$, поэтому знаменатель равен

$$\begin{aligned} 1 - \exp(-2\pi iz/h) &= 1 - \exp(\mp 2\pi i\hat{H}/h) \exp(2\pi y/h) = \\ &= 1 - \exp(\mp 2\pi i(n + 1/2)) \exp(2\pi y/h) = 1 + \exp(2\pi y/h) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \left| \int_{\gamma_{\pm}} 2g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz \right| &\leq 2 \exp(-\hat{H}^2/2) \int_0^{\alpha/h} g(\pm\hat{H} + iy) \frac{\exp(y^2/2)}{\exp(2\pi y/h)} dy \leq \\ &\leq 2 \exp(-\hat{H}^2/2) f_1 \int_0^{\alpha/h} \frac{\exp(y^2/2)}{\exp(2\pi y/h)} dy. \end{aligned}$$

При $\alpha \leq 4\pi$ дробь в правой части последнего выражения меньше единицы. В частности, если $\alpha = 2\pi$, то

$$\begin{aligned} \int_0^{\alpha/h} \frac{\exp(y^2/2)}{\exp(2\pi y/h)} dy &\leq \int_0^{2\pi/h} \exp\left(-\frac{\pi y}{h}\right) \exp\left(\frac{y}{2} \left(y - \frac{2\pi}{h}\right)\right) dy \leq \\ &\leq \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi y}{h}\right) dy = \frac{h}{\pi}. \end{aligned}$$

Таким образом, при $\alpha = 2\pi$ имеем

$$\left| \int_{\gamma_{\pm}} 2g(z) \frac{\exp(-z^2/2)}{1 - \exp(-2\pi iz/h)} dz \right| \leq 2 \exp(-\hat{H}^2/2) f_1 \frac{h}{\pi}.$$

С учётом того, что таких отрезков два (γ_+ и γ_-), мы получили второе слагаемое в правой части (2.19). Наконец, учёт разницы между I и J даёт первое слагаемое в правой части (2.19). \square

В предположении $f_0, f_1 \lesssim 1$ и $\hat{H} \approx H$ оценим требуемое число узлов квадратуры $m = 2n + 1$ для достижения точности ε . Имеем $h = \hat{H}/(n + 1/2)$ и

$$\ln E_m(t, r) \sim -\frac{2\pi^2}{h^2} \sim -2\pi^2 \frac{(m/2)^2}{H^2} \sim -\frac{\pi^2 m^2}{2 H^2}.$$

Приравнивая к $H^2/2$, получаем

$$m \approx \frac{1}{\pi} H^2.$$

2.7. Построение квадратурных формул. Для вычисления узлов и весов квадратурных формул Гаусса – Лежандра и Гаусса – Якоби используется алгоритм G. Golub и H. Welsh [9], реализация которого приведена в [10]. Идея этого алгоритма заключается в следующем. Из коэффициентов рекуррентного соотношения, которому подчиняется ортонормированное (в смысле скалярного произведения $\langle f, g \rangle = \int fgwdx$) семейство многочленов, составляется симметрическая трёхдиагональная матрица. Собственные значения этой матрицы являются узлами квадратурной формулы, а первые компоненты собственных векторов – её весами. Для их нахождения используется итерационный метод из библиотеки EISPACK [11], на практике сходящийся быстро и требующий $O(n^2)$ арифметических операций.

Для квадратурных формул Гаусса – Лежандра узлы также могут определяться путём нахождения нулей многочлена Лежандра методом Ньютона. При этом используется начальное приближение [12]

$$x_j = \cos \left(\pi \frac{4j + 3}{4n + 2} \right),$$

а значения многочленов Лежандра находятся по рекурсивной формуле. Веса квадратурной формулы задаются формулой 25.4.29 из [3]: $w = 2(P'_n(x_j))^2/(1 - x_j^2)$.

Отметим также не использованную в настоящей работе возможность построения квадратурных формул для случая произвольной положительной весовой функции. Однако задача определения узлов и весов этой формулы намного сложнее, см., например, [13]. Описанным выше алгоритмом в этом случае воспользоваться не удаётся: коэффициенты рекуррентного соотношения для соответствующих ортогональных многочленов явным образом не выписываются, а вычислительно устойчивых алгоритмов их нахождения неизвестно.

3. Решение задачи и его аппроксимация

3.1. Решение задачи. Для решения задачи (1.1)–(1.2) будем использовать три интегральных представления. Вывод всех представлений приведён в [1].

Первое представление получается методом разделения переменных:

$$\begin{pmatrix} p'(t, r) \\ u'_r(t, r) \end{pmatrix} = \int_0^\infty \omega e^{-\omega^2/2} \begin{pmatrix} J_0(r\omega) \cos(t\omega) \\ J_1(r\omega) \sin(t\omega) \end{pmatrix} d\omega, \quad (3.1)$$

где $J_j(x)$ – функции Бесселя первого рода индекса j .

Второе представление таково:

$$p'(t, r) = \mathcal{J}_0(t, r) + \mathcal{J}_0(-t, r), \quad u'_r(t, r) = \mathcal{J}_1(t, r) - \mathcal{J}_1(-t, r), \quad (3.2)$$

$$\mathcal{J}_j(t, r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-(r-t+r\xi)^2/2)}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} (r-t+r\xi)(1+\xi)^j d\xi. \quad (3.3)$$

При $r = 0$ каждый из интегралов (3.3) расходится, значения p' и u'_r при $r = 0$ понимаются в смысле предела при $r \rightarrow +0$.

Третье представление получается применением формулы Кирхгоффа для решения задачи Коши для двумерного волнового уравнения:

$$\begin{aligned} p'(t, r) &= \mathcal{J}_{0,1}(t, r) - t^2 \mathcal{J}_{0,3}(t, r) + rt \mathcal{J}_{1,2}(t, r), \\ u'_r(t, r) &= -t^2 \mathcal{J}_{1,2}(t, r) + rt \mathcal{J}_{0,1}(t, r), \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\mathcal{J}_{j,n}(t, r) = \int_0^1 \exp\left(-\frac{(r-t+t\xi)^2}{2}\right) \tilde{I}_j(rt(1-\xi)) \frac{(1-\xi)^n}{\sqrt{\xi}\sqrt{2-\xi}} d\xi. \quad (3.5)$$

Здесь $\tilde{I}_j(x) = e^{-x} I_j(x)$, а $I_j(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода индекса j .

Ниже мы получим оценки погрешности квадратурных формул для этих интегралов, а также рассмотрим ещё одно представление решения – в виде асимптотического ряда при $t \rightarrow \infty$.

Зоны, в которых используется аппроксимация того или иного представления, изображены на рис. 2. Цифра 0 соответствует тому, что решение приближается нулём; 1 – представлению (3.1); 2 – асимптотическому ряду; 3 и 4 – представлению (3.2)–(3.3); 5 – представлению (3.4)–(3.5). Пороговые значения равны $R_1 = (15\varepsilon)^{1/6}$ и $R_2 = 5\varepsilon^{1/10}$. На этом рисунке не учтено, что при $t < \varepsilon$ мы будем использовать старший член разложения решения в ряд Тейлора в окрестности $t = 0$, чтобы ускорить задание начальных данных.

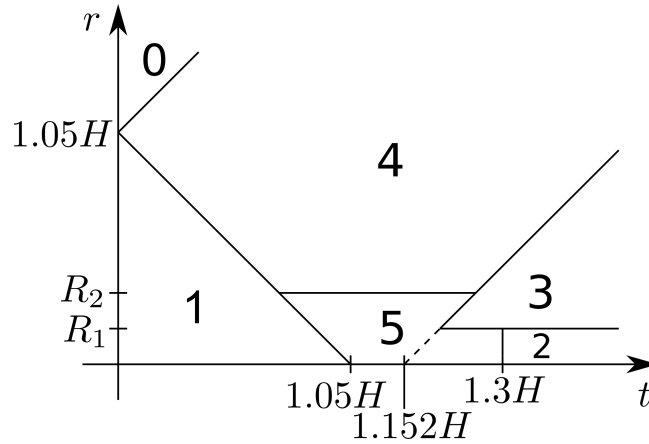


Рис. 2. Используемое представление решения в зависимости от t и r

3.2. Ряд при $r \rightarrow 0, t \rightarrow \infty$. В этом разделе мы будем использовать ряд Тейлора в окрестности $r = 0$ и асимптотический ряд в окрестности $t = \infty$ (не сходящийся ни при каком t). Причина, по которой мы выделяем отдельно случай малых r и больших t , будет понятна из следующих разделов.

Для $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ введём обозначение

$$\mathcal{I}_n(t) = \int_0^{\infty} He_n(\omega) e^{-\omega^2/2} \exp(it\omega) d\omega,$$

где через $He_n(\omega)$ обозначены полиномы Эрмита:

$$He_n(\omega) = (-1)^n e^{\omega^2/2} \frac{d^n}{d\omega^n} e^{-\omega^2/2}.$$

Пусть $a_n(r)$ и $b_n(r)$ – коэффициенты разложения функций $\omega J_0(r\omega)$ и $\omega J_1(r\omega)$ по полиномам Эрмита в окрестности $\omega = 0$, то есть

$$\omega J_0(r\omega) \sim \sum_{n=0}^{\infty} a_n(r) He_n(\omega), \quad \omega J_1(r\omega) \sim \sum_{n=0}^{\infty} b_n(r) He_n(\omega).$$

Тогда из (3.1) имеем

$$p'(t, r) \sim \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} a_n(r) \mathcal{I}_n(t), \quad u'_r(t, r) \sim \operatorname{Im} \sum_{n=0}^{\infty} b_n(r) \mathcal{I}_n(t).$$

Можно показать, что ряды в правых частях сходятся при всех r и t и равны значениям в левых частях, но мы не будем использовать этот факт.

При $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_n(t) &= \frac{1}{it} He_n(\omega) e^{-\omega^2/2} \exp(it\omega) \Big|_0^\infty - \frac{1}{it} \int_0^\infty \frac{d}{d\omega} \left(He_n(\omega) e^{-\omega^2/2} \right) \exp(it\omega) d\omega = \\ &= \frac{-1}{it} He_n(0) - \frac{-1}{it} \int_0^\infty He_{n+1}(\omega) e^{-\omega^2/2} \exp(it\omega) d\omega = \frac{1}{it} (\mathcal{I}_{n+1}(t) - He_n(0)), \end{aligned}$$

отсюда при любых $0 \leq n < M < \infty$ имеем

$$\mathcal{I}_n(t) = \frac{1}{(it)^{M-n}} \mathcal{I}_M(t) - \sum_{k=n}^{M-1} \frac{1}{(it)^{k-n+1}} He_k(0).$$

Полиномы Эрмита нечётного порядка в нуле равны нулю, а для полиномов чётного порядка справедливо

$$He_k(0) = (-1)^{k/2} (k-1)!! = (-1)^k \frac{k!}{(k/2)! 2^{k/2}}$$

(здесь и ниже полагается $(-1)!! = 1$). Таким образом,

$$\mathcal{I}_n(t) = \frac{1}{(it)^{M-n}} \mathcal{I}_M(t) - i^{n-1} \sum_{l=\lceil n/2 \rceil}^{\lfloor (M-1)/2 \rfloor} \frac{(2l-1)!!}{t^{2l-n+1}}. \quad (3.6)$$

Подставив бесконечность вместо M и отбросив $\mathcal{I}_M(t)$, получаем асимптотический ряд. Заметим, что этот ряд при чётных n будет содержать чисто мнимые члены, а при нечётных – чисто действительные; это связано с тем, что $\operatorname{Re} \mathcal{I}_{2n}(t)$ и $\operatorname{Im} \mathcal{I}_{2n-1}(t)$ при $t \rightarrow \infty$ убывают быстрее любой степени.

При чётных n старший член даёт $\mathcal{I}_n(t) \sim i(-1)^{n/2} t^{-1} (n-1)!!$, а при нечётных n имеем $\mathcal{I}_n(t) \sim (-1)^{(n+1)/2} t^{-2} n!!$.

Для оценки остаточного члена этого асимптотического ряда нужно оценить значение $\mathcal{I}_M(t)$. Воспользуемся представлением

$$He_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x + iy)^n \exp(-y^2/2) dy.$$

Тогда

$$|\mathcal{I}_n(t)| \leq \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |He_n(x)| \exp(-x^2/2) dx \leq$$

$$\begin{aligned}
 &\leq \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |x^2 + y^2|^{n/2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) dy dx = \\
 &= \frac{2\pi}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} r^{n+1} \exp(-r^2/2) dr = \frac{2\pi}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} (\sqrt{2x})^n \exp(-x) dx = \\
 &= \sqrt{\pi/2} 2^{n/2} \Gamma(1 + n/2),
 \end{aligned}$$

где Γ – Гамма-функция Эйлера. Таким образом, для остаточного члена

$$R_{n,M}(t) = \mathcal{I}_n(t) + i^{n-1} \sum_{k=n}^{M-1} \frac{1}{t^{k-n+1}} (k-1)!! \times \begin{cases} 1, & k/2 \in \mathbb{N} \cup \{0\}; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

получаем оценку

$$|R_{n,M}(t)| \leq \sqrt{\pi/2} \frac{1}{t^{M-n}} 2^{M/2} \Gamma(1 + M/2).$$

Перейдём к выбору числа членов асимптотического ряда, которое будет использоваться для вычисления $\mathcal{I}_n(t)$. Начнём с грубой оценки, сколько членов нужно взять, чтобы погрешность не превосходила ε , то есть $\ln |R_{n,M}(t)| \leq -H^2/2$. Будем предполагать, что $\varepsilon \ll 1$, $M \gg n$. Используем приближение $\ln \Gamma(z) \approx z \ln z - z$. Тогда получаем неравенство

$$-M \ln t + \frac{M}{2} \ln \frac{M}{e} \lesssim -\frac{H^2}{2}. \quad (3.7)$$

Минимум выражения в левой части достигается при $M = t^2$ и равен $-t^2/2$. Поэтому использование асимптотического ряда возможно, если $t \gtrsim H$. Поскольку выражение в левой части (3.7) монотонно возрастает по t при фиксированном M , при $M = H^2$ и любом $t \geq H$ неравенство (3.7) будет выполняться. Поэтому будем использовать

$$M = \lfloor H^2 \rfloor$$

членов асимптотического ряда.

Теперь займёмся более точными оценками. При выбранном M неравенство $|R_{n,M}(t)| \leq \varepsilon$ будет выполняться при

$$t \geq \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\varepsilon} 2^{M/2} \Gamma\left(1 + \frac{M}{2}\right) \right)^{1/(M-n)}. \quad (3.8)$$

Выражение в правой части (3.8) стремится к H при $\varepsilon \rightarrow 0$ и фиксированном n . При $\varepsilon \leq 2 \cdot 10^{-16}$ и $n \leq 6$ имеем

$$t \geq 1.3H. \quad (3.9)$$

Это и есть условие использования рассматриваемого асимптотического ряда.

Если t существенно больше выражения в правой части (3.8), то использовать M_0 членов ряда избыточно. Можно было бы оценить требуемое число членов ряда при заданном t , но это не требуется. Заметим, что чётные члены суммы в (3.6) положительные и имеют вид

$$a_l = \frac{(2l-1)!!}{t^{2l-n+1}}.$$

Поэтому $a_{l+2} = (2l+1)a_l/t^2$. Значит, при $l \leq (M_0 - 1)/2$ выполняется

$$a_{l+2} \leq M_0/t^2 \leq a_l,$$

то есть члены суммы не возрастают на всём множестве суммирования. Следовательно, если некоторый член суммы равен a_l , то сумма оставшихся членов, которые требуется вычислить, не будет превосходить $a_l \lceil (M_0 - 1)/2 - l \rceil$. Если последняя величина не превосходит ε (или ε/t), оставшиеся члены суммы можно не вычислять.

Вернёмся к выражениям (3.1), которые нам нужно вычислить:

$$\begin{pmatrix} p'(t, r) \\ u'_r(t, r) \end{pmatrix} = \int_0^\infty \omega e^{-\omega^2/2} \begin{pmatrix} J_0(r\omega) \cos(t\omega) \\ J_1(r\omega) \sin(t\omega) \end{pmatrix} d\omega. \quad (3.10)$$

Чтобы воспользоваться рассмотренным выше асимптотическим рядом, приблизим $\omega J_j(r\omega)$, $j = 0, 1$, полиномами и разложим эти по полиномы по полиномам Эрмита. Для функций Бесселя справедливо представление рядом

$$J_j(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (m+j)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+j}.$$

Из представления

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\phi - x \sin \phi) d\phi$$

следует, что производная любого порядка от функции Бесселя любого индекса не превосходит единицы. Поэтому ряд Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа даёт

$$J_0(r\omega) = 1 - \frac{(r\omega)^2}{4} + \frac{(r\omega)^4}{64} + c_0(r\omega) \frac{(r\omega)^6}{720},$$

$$J_1(r\omega) = \frac{r\omega}{2} - \frac{(r\omega)^3}{16} + \frac{(r\omega)^5}{384} + c_1(r\omega) \frac{(r\omega)^7}{5040},$$

где $|c_0(r\omega)| < 1$, $|c_1(r\omega)| < 1$. Домножим эти равенства на ω и перепишем в терминах полиномов Эрмита:

$$\begin{aligned} \omega J_0(r\omega) &= \left(\frac{15}{64}r^4 - \frac{3}{4}r^2 + 1 \right) He_1(\omega) + \left(\frac{5}{32}r^4 - \frac{1}{4}r^2 \right) He_3(\omega) + \\ &\quad + \frac{1}{64}r^4 He_5(\omega) + c_0(r\omega) \frac{\omega^7 r^6}{720}, \\ \omega J_1(r\omega) &= \left(\frac{5}{128}r^5 - \frac{3}{16}r^3 + \frac{1}{2}r \right) He_0(\omega) + \left(\frac{15}{128}r^5 - \frac{3}{8}r^3 + \frac{1}{2}r \right) He_2(\omega) + \\ &\quad + \left(\frac{5}{128}r^5 - \frac{1}{16}r^3 \right) He_4(\omega) + \frac{1}{384}r^5 He_6(\omega) + c_1(r\omega) \frac{\omega^8 r^7}{5040}. \end{aligned}$$

Формула (3.10) превращается в

$$\begin{aligned} p'(t, r) &= \operatorname{Re} \left[\left(\frac{15}{64}r^4 - \frac{3}{4}r^2 + 1 \right) \mathcal{I}_1(t) + \left(\frac{5}{32}r^4 - \frac{1}{4}r^2 \right) \mathcal{I}_3(t) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{64}r^4 \mathcal{I}_5(t) \right] + \operatorname{Re} E_0, \\ u'_r(t, r) &= \operatorname{Im} \left[\left(\frac{5}{128}r^5 - \frac{1}{16}r^3 + \frac{1}{2}r \right) \mathcal{I}_0(t) + \left(\frac{15}{128}r^5 - \frac{3}{8}r^3 + \frac{1}{2}r \right) \mathcal{I}_2(t) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{5}{128}r^5 - \frac{1}{16}r^3 \right) \mathcal{I}_4(t) + \frac{1}{384}r^5 \mathcal{I}_6(t) \right] + \operatorname{Im} E_1, \end{aligned}$$

где

$$E_j = \int_0^\infty e^{-\omega^2/2} \exp(it\omega) c_j(r\omega) \frac{(r\omega)^{6+j}}{(6+j)!} d\omega.$$

Величины E_j можно оценить как

$$|E_j| \leq \int_0^\infty e^{-\omega^2/2} \omega^{7+j} d\omega \frac{r^{6+j}}{(6+j)!} = \frac{r^{6+j}}{(6+j)!} 2^{3+j/2} \Gamma(4 + j/2).$$

Здесь Γ – гамма-функция Эйлера; $\Gamma(4) = 6$, $\Gamma(4.5) = 135\sqrt{\pi}/16 \approx 15$. Чтобы $|E_j|$ не превосходили ε , достаточно $r \leq (15\varepsilon)^{1/6}$ и $r \lesssim (29.79\varepsilon)^{1/7}$. При $\varepsilon < 1$ первое условие автоматически влечёт второе, то есть заданная точность достигается при

$$r \leq (15\varepsilon)^{1/6}, \quad (3.11)$$

что при $\varepsilon = 10^{-16}$ даёт $r \lesssim 0.0034$, а при $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-32}$ даёт $r \lesssim 8.1 \cdot 10^{-6}$.

Таким образом, если $t \geq 1.3H$ (см. (3.9)) и $r \leq (15\varepsilon)^{1/6}$ (см. (3.11)), то будем приближённо вычислять $\mathcal{I}_n(t)$ по формуле

$$\mathcal{I}_n(t) \approx -i^{n-1} \sum_{l=\lceil n/2 \rceil}^{\lfloor (M-1)/2 \rfloor} \frac{(2l-1)!!}{t^{2l-n+1}} \quad (3.12)$$

(см. (3.6)) с $M = \lfloor H^2 \rfloor$ или меньшим значением (см. выше). В противном случае будем использовать другие представления решения.

После суммирования по $n = 1, 3, 5$ получаем

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re}(a_1\mathcal{I}_1(t) + a_3\mathcal{I}_3(t) + a_5\mathcal{I}_5(t)) \approx \\ & \approx \frac{1}{t^2}(-a_1 + 3a_3 - 15a_5) + \frac{1}{t^4}(-3a_1 + 15a_3) + \frac{1}{t^6}(-15a_1) + \\ & + (-a_1 + a_3t^2 - a_5t^4) \sum_{l=4}^{\lfloor (M-1)/2 \rfloor} \frac{(2l-1)!!}{t^{2l}}. \end{aligned}$$

А после суммирования по $n = 0, 2, 4, 6$ получаем

$$\begin{aligned} & \operatorname{Im}(a_0\mathcal{I}_0(t) + a_2\mathcal{I}_2(t) + a_4\mathcal{I}_4(t) + a_6\mathcal{I}_6(t)) \approx \\ & \approx \frac{1}{t}(a_0 - a_2 + 3a_4 - 15a_6) + \frac{1}{t^3}(a_0 - 3a_2 + 15a_4) + \frac{1}{t^5}(3a_0 - 15a_2) + \frac{1}{t^7}(15a_0) + \\ & + (a_0 - a_2t^2 + a_4t^4 - a_6t^6) \frac{1}{t} \sum_{l=4}^{\lfloor (M-1)/2 \rfloor} \frac{(2l-1)!!}{t^{2l}}. \end{aligned}$$

3.3. Аппроксимация выражения (3.1). Интеграл (3.1) является частным случаем (2.16). Однако функции $J_0(r\omega)$, $J_1(r\omega)$, $\cos(t\omega)$, $\sin(t\omega)$ экспоненциально растут с ростом $|\operatorname{Im}\omega|$. Поэтому сделанное в разделе 2.5 предположение, что на используемом эллиптическом контуре $|f(z)| \sim 1$, к настоящему случаю неприменимо, и требуется более детальный анализ.

Так как на действительной оси синус, косинус и функции Бесселя не превосходят единицы, выбор интервала интегрирования не вызывает

проблемы и можно положить $\tilde{H} = H$. Тогда преобразование координат $\omega = H(1 + \xi)/2$ в (2.16) даёт

$$\begin{pmatrix} p'(t, r) \\ u'_r(t, r) \end{pmatrix} = \int_{-1}^1 \frac{H^2}{4} (1+\xi) e^{-\frac{H^2(1+\xi)^2}{8}} \begin{pmatrix} J_0(rH(1+\xi)/2) \cos(tH(1+\xi)/2) \\ J_1(rH(1+\xi)/2) \sin(tH(1+\xi)/2) \end{pmatrix} d\xi.$$

Выберем эллиптический контур Γ с параметром $\rho = 1 + \sqrt{2}$, тогда максимальное значение $|\operatorname{Im}\xi|$ на контуре равно 1. В силу равенства (2.17) и неравенств $|J_j(z)| \leq \exp(|\operatorname{Im}z|/2)$, $|\sin(z)| \leq \exp(|\operatorname{Im}z|/2)$, $|\cos(z)| \leq \exp(|\operatorname{Im}z|/2)$ обе подынтегральные функции на контуре не превосходят

$$\frac{H^2}{2} \exp\left(\frac{H^2}{8} + \frac{(r+t)H}{4}\right).$$

Поскольку это представление используется только при $t + r \leq 1.05H$, оценка (2.11) даёт

$$E_m(f) \leq 2(2 + \sqrt{2})H^2 \exp\left(\frac{3.1H^2}{8}\right) (1 + \sqrt{2})^{-2m}.$$

Приравнивая к $\exp(-H^2/2)$, получаем

$$m \geq \frac{\ln(4 + 2\sqrt{2}) + 2 \ln H + 7.1H^2/8}{2 \ln(1 + \sqrt{2})} \approx 1.09 + 1.13 \ln H + 0.503H^2.$$

В коде используется $m = \lceil 0.567H^2 \rceil$ узлов квадратуры, что для $\varepsilon \leq 10^{-16}$ удовлетворяет полученному неравенству.

Альтернативный способ аппроксимации (3.1), основанный на использовании квадратур Гаусса – Лагерра, рассмотрен в разделе 4.

3.4. Аппроксимация выражения (3.2)–(3.3). Основным преимуществом этого выражения является отсутствие цилиндрических функций под знаком интеграла, что делает процедуры на его основе более быстрыми при одинаковом числе узлов квадратурных формул. Однако число узлов квадратуры может расти при $r \rightarrow 0$, и отдельного анализа требует вопрос накопления арифметической ошибки. Мы будем рассматривать эти вопросы только для того диапазона t и r , в котором предполагается использование представления (3.2)–(3.3). В частности, будем предполагать

$$t + r > 1.05H, \quad r > R_1.$$

При этих условиях в выражении для $\mathcal{J}_j(t, r)$ эффективный носитель гауссиана имеет вид

$$[a, b] \equiv \left[\frac{t - H}{r} - 1, \frac{t + H}{r} - 1 \right]$$

и целиком лежит правее точки $\xi = -2$. В выражении для $\mathcal{J}_j(-t, r)$ эффективный носитель гауссиана имеет вид

$$[a, b] \equiv \left[\frac{-t - H}{r} - 1, \frac{-t + H}{r} - 1 \right].$$

и целиком лежит левее нуля.

3.4.1. Накопление арифметической погрешности при вычислении (3.2).

Интеграл (3.3) сходится при любых $t \in \mathbb{R}$ и $r > 0$, но расходится при $r = 0$. Отсюда ясно, что при малых r правые части (3.2) представляют собой сумму двух слагаемых, каждое из которых по модулю много больше их суммы.

При подстановке $-t$ вместо t выражение под знаком экспоненты в (3.3) по модулю больше H , то есть от суммы в (3.2) “должно” остаться только первое слагаемое. Оценим диапазон значений параметров t и r , при которых так и происходит. Имеем

$$\begin{aligned} |\mathcal{J}_1(-t, r)| &\leq \int_0^\infty \frac{\exp(-(r+t+r\xi)^2/2)}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} |r+t+r\xi| (1+\xi) d\xi = \\ &= \exp(-(r+t)^2/2) \int_0^\infty \frac{\exp(-(r+t)r\xi)}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} |r+t+r\xi| \exp(-(r\xi)^2/2) (1+\xi) d\xi. \end{aligned}$$

Заметим, что при $\xi \geq 1$ справедливо

$$\frac{1+\xi}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} = \left(1 + \frac{1}{\xi(\xi+2)}\right)^{1/2} \leq 1 + \frac{1}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} \leq 1 + \xi^{-1},$$

а при $\xi \leq 1$ подынтегральное выражение не превосходит $\sqrt{2}(2r+t)/\sqrt{\xi}$, поэтому

$$\begin{aligned} |\mathcal{J}_j(-t, r)| &\leq \exp(-(r+t)^2/2) \left[2\sqrt{2}(2r+t) + \right. \\ &\left. + \int_1^\infty \exp(-(r+t)r\xi) |r+t+r\xi| (1+\xi^{-1}) d\xi \right] \leq \end{aligned}$$

$$\leq \exp(-(r+t)^2/2) \left[2\sqrt{2}(2r+t) + \int_{r(r+t)}^{\infty} \exp(-\eta) \left(r+t + \frac{\eta}{r+t} \right) \left(\frac{1}{r(r+t)} + \frac{1}{\eta} \right) d\eta \right].$$

Оценка для $\mathcal{J}_0(t, r)$ может быть улучшена тем, что слагаемое $1/r/(r+t)$ в последнем множителе отсутствует, но поскольку это слагаемое присутствует в $\mathcal{J}_1(t, r)$, рассматривать этот случай отдельно не имеет смысла. Поскольку

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta} d\eta = \int_0^{\infty} \eta e^{-\eta} d\eta = 1, \quad \int_x^{\infty} \eta^{-1} e^{-\eta} d\eta \leq 1, \quad x > 1,$$

$$\int_x^{\infty} \eta^{-1} e^{-\eta} d\eta = \int_x^1 \eta^{-1} e^{-\eta} d\eta + \int_1^{\infty} \eta^{-1} e^{-\eta} d\eta \leq 1 - \ln x, \quad x < 1,$$

получаем $|\mathcal{J}_j(-t, r)| \leq \hat{\varepsilon}(t, r)$, где

$$\hat{\varepsilon}(t, r) = \exp\left(-\frac{(r+t)^2}{2}\right) \left[2\sqrt{2}(2r+t) + \frac{1}{r} + \frac{1}{r+t} + \frac{1}{r(r+t)^2} + (r+t)(1 + \max\{0, -\ln(r(r+t))\}) \right].$$

Основной вклад в выражение в квадратных скобках даёт $1/r$, поэтому $\hat{\varepsilon}(t, r) \approx \exp(-t^2/2)/r$. Приравнявая $t+r$ к $1.05H$ и $\hat{\varepsilon}(t, r)$ к ε , получаем $r \approx \varepsilon^{0.1}$. Чтобы учесть вклад остальных слагаемых, это значение было увеличено в 5 раз, что и дало формулу $R_2 = 5\varepsilon^{1/10}$.

Функция $\hat{\varepsilon}(t, r)$ при фиксированном t является выпуклой по r , а при фиксированном r монотонно убывает при $t \geq H - r$, если H не слишком мало (в частности, при $\varepsilon \leq 10^{-16}$). Поэтому для доказательства оценки $\hat{\varepsilon}(t, r) \leq \varepsilon$ в области, где используется представление (3.2)–(3.3) (см. рис. 2), достаточно показать, что выполняется

$$\hat{\varepsilon}(t_1, R_1) \leq \varepsilon, \quad \hat{\varepsilon}(t_2, R_2) \leq \varepsilon \tag{3.13}$$

при $t_1 = 1.152H + R_1$ и $t_2 = 1.05H - R_2$. Необходимые для этого данные сведены в таблицу 1.

Таблица 1. Данные для проверки условий (3.13)

Точность	ε	H	t_1	R_1	$\hat{\varepsilon}(t_1, R_1)$
Двойная	10^{-16}	8.584	9.892	$3.38 \cdot 10^{-3}$	$1.18 \cdot 10^{-19}$
Четверная	$2 \cdot 10^{-32}$	12.082	13.919	$8.18 \cdot 10^{-6}$	$8.53 \cdot 10^{-43}$
Восьмерная	$4 \cdot 10^{-64}$	17.087	19.684	$4.26 \cdot 10^{-11}$	$1.72 \cdot 10^{-74}$
Точность	ε	H	t_2	R_2	$\hat{\varepsilon}(t_2, R_2)$
Двойная	10^{-16}	8.584	8.899	0.126	$0.96 \cdot 10^{-16}$
Четверная	$2 \cdot 10^{-32}$	12.082	12.685	$3.4 \cdot 10^{-3}$	$0.41 \cdot 10^{-32}$
Восьмерная	$4 \cdot 10^{-64}$	17.087	17.941	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$0.55 \cdot 10^{-64}$

3.4.2. Случай $t < r - H$. В этом случае сигнал от начального импульса, носитель которого лежит в круге шириной H , ещё не достиг точки, удалённой на расстояние r . Пульсации давления и скорости не превосходят ε и могут быть приближены нулём.

3.4.3. Случай $t > r + H + \delta$. Условие $t > r + H$ равносильно $a > 0$, где a – левая граница эффективного носителя гауссиана. При $\delta > 0$ величина a отделена от нуля. Тогда на эффективном носителе гауссиана у подынтегральной функции нет особенностей. Положим $\delta = 0.136H$, этот выбор будет объяснён ниже. Будем аппроксимировать интеграл суммой с равномерным шагом и оценкой, рассмотренной в разделе (2.6).

Приведём интеграл (3.3) к виду (2.18) заменой $r - t + r\xi = \eta$:

$$I_j(t, r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\eta^2/2) f_j(\eta) d\eta, \quad f_j(\eta) = \eta \frac{(1 + \xi)^j}{\sqrt{\xi(\xi + 2)}} \Theta(\xi),$$

где Θ – функция Хевисайда и $\xi \equiv \xi(\eta) = (t + \eta)/r - 1$. Рассмотрим аппроксимацию этого интеграла вида

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{J}}_j(t, r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} h \sum_{k=-n}^n \exp\left(-\frac{(kh)^2}{2}\right) f_j(kh) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} h \sum_{k=1}^n \exp\left(-\frac{(kh)^2}{2}\right) (f_j(kh) + f_j(-kh)) \end{aligned} \quad (3.14)$$

(будем называть её $2n$ -точечной по числу точек, в которых вычисляется функция f). Для оценки точности этой аппроксимации будем пользоваться неравенством (2.19):

$$\begin{aligned} \sqrt{2\pi}r|I_j - \hat{\mathcal{J}}_j| \leq & \left| \left(\int_{-\infty}^{-\hat{H}} + \int_{\hat{H}}^{\infty} \right) f_j(\eta) \exp(-\eta^2/2) d\eta \right| + \\ & + \frac{4h}{\pi} \exp\left(-\frac{\hat{H}^2}{2}\right) f_{j,1} + \frac{2\sqrt{2\pi}}{1 - \exp(-4)} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{h^2}\right) f_{j,0}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Для оценки первого слагаемого заметим, что

$$|f_j(\eta)| \leq |\eta| \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\xi}}\right) \Theta(\xi) \leq 2|\eta| \Theta(\xi) \Theta(1 - \xi) + |\eta| \frac{\Theta(\xi - 1)}{\sqrt{\xi}}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \left| \left(\int_{-\infty}^{-\hat{H}} + \int_{\hat{H}}^{\infty} \right) f_j(\eta) \exp(-\eta^2/2) d\eta \right| \leq \\ & \leq \sup_{|\eta| \geq \hat{H}, \xi \in [0,1]} (2|\eta| \exp(-\eta^2/2)) \int_{|\eta| \geq \hat{H}} \Theta(\xi) \Theta(1 - \xi) d\eta + \\ & \quad + \int_{|\eta| \geq \hat{H}} |\eta| \exp(-\eta^2/2) d\eta \sup_{|\eta| \geq \hat{H}} \frac{\Theta(\xi - 1)}{\sqrt{\xi}} \leq \\ & \leq 2\hat{H} \exp(-\hat{H}^2/2)r + 2 \exp(-\hat{H}^2/2) = 2 \exp(-\hat{H}^2/2)(\hat{H}r + 1). \end{aligned}$$

Второе неравенство в этой цепочке написано в предположении $\hat{H} \geq 1$.

Для оценки второго и третьего слагаемого в правой части (3.15) заметим, что при $\operatorname{Re} \xi \geq \delta > 0$ меем

$$\left| \frac{1}{\sqrt{\xi(\xi + 2)}} \right| \leq \frac{1}{|\xi|} \leq \frac{1}{\delta}$$

и

$$\left| \frac{1 + \xi}{\sqrt{\xi(\xi + 2)}} \right| = \left| \frac{\xi^2 + 2\xi + 1}{\xi^2 + 2\xi} \right|^{1/2} = \left| 1 + \frac{1}{\xi(\xi + 2)} \right|^{1/2} \leq 1 + \left| \frac{1}{\xi(\xi + 2)} \right|^{1/2} \leq 1 + \frac{1}{\delta}.$$

В нашем случае $\delta = \xi(-\hat{H}) = (t - \hat{H} - r)/r$. Тогда для $j = 0,1$ и $l = 0,1$ имеем

$$f_{j,l} \leq \left(1 + \frac{r}{t - \hat{H} - r}\right) \left(\hat{H}^2 + \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2\right)^{1/2} \leq \left(1 + \frac{r}{t - \hat{H} - r}\right) \left(\hat{H} + \frac{2\pi}{h}\right).$$

Таким образом, (3.15) даёт

$$\sqrt{2\pi}|I_j - \hat{\mathcal{J}}_j| \leq 2 \exp\left(-\frac{\hat{H}^2}{2}\right) \left(\hat{H} + \frac{1}{r}\right) + \left[\frac{4h}{\pi} \exp\left(-\frac{\hat{H}^2}{2}\right) + \frac{2\sqrt{2\pi}}{1 - \exp(-4)} \exp\left(-\frac{2\pi^2}{h^2}\right)\right] \left(\hat{H} + \frac{2\pi}{h}\right) \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{t - \hat{H} - r}\right).$$

Выберем $h = 2\pi/\hat{H}$ и пусть $M \geq \max\{1/r, 1/(t - r - \hat{H})\}$. Тогда

$$\sqrt{2\pi}|I_j - \hat{\mathcal{J}}_j| \leq \exp\left(-\frac{\hat{H}^2}{2}\right) \left[2(\hat{H} + M) + 4\hat{H}M \left(\frac{8}{\hat{H}} + \frac{2\sqrt{2\pi}}{1 - \exp(-4)}\right)\right].$$

Приравнивая к $\varepsilon = \exp(-H^2/2)$ и логарифмируя, получаем

$$\hat{H}^2 = H^2 + 2 \ln \left[2(\hat{H} + M) + 4\hat{H}M \left(\frac{8}{\hat{H}} + \frac{2\sqrt{2\pi}}{1 - \exp(-4)}\right)\right].$$

Будем предполагать, что $\varepsilon \leq 2 \cdot 10^{-16}$, тогда $8/\hat{H} \leq 8/\sqrt{72.29} \leq 0.941$. Также предположим, что $M \geq \hat{H}$, тогда $2(\hat{H} + M) \leq 4M \leq 4\hat{H}M/8.5$. Тогда получаем, что \hat{H} можно выбрать из решения

$$\hat{H}^2 = H^2 + 2 \ln \left[\exp(6.411/2)\hat{H}M\right],$$

то есть

$$\hat{H}^2 = \ln \hat{H}^2 + y,$$

где $y = H^2 + 6.411 + \ln M^2$.

Выберем M из условия возможности использования асимптотического ряда при малых r , а именно, $M = R_1 = (15\varepsilon)^{1/6}$. Тогда $\ln M^2 = H^2/6 - \ln(15)/3$. Отсюда $y > 91$.

Нам понадобится следующее утверждение.

Утверждение 3. Пусть $y > 1$. Тогда решение уравнения $x - \ln x = y$ подчиняется неравенству

$$x \leq y + \frac{y}{y-1} \ln y.$$

Доказательство. Заметим, что x является пределом монотонно возрастающей последовательности

$$a_1 = \ln y, \quad a_{n+1} = y + \ln a_n.$$

Тогда

$$\ln a_{n+1} = \ln(y + \ln a_n) = \ln y + \ln \left(1 + \frac{\ln a_n}{y} \right) \leq \ln y + \frac{1}{y} \ln a_n.$$

Переходя пределу при $n \rightarrow \infty$, получаем $\ln x \leq \ln y / (1 - 1/y)$, и остаётся воспользоваться исходным уравнением. \square

Пользуясь утверждением 3, получаем

$$\hat{H}^2 \leq \frac{7}{6} H^2 + 4.22 + 1.011 \ln \left(\frac{7}{6} H^2 + 4.22 \right). \quad (3.16)$$

Например, при расчёте с двойной точностью $H^2 \approx 73.7$, $\hat{H}^2 \approx 94.8$; при расчёте с четверной точностью $H^2 \approx 146$, $\hat{H}^2 \approx 180$, с восьмерной точностью $H^2 \approx 292$, $\hat{H}^2 \approx 351$. Отношение \hat{H}/H при увеличении H уменьшается и стремится к $\sqrt{7/6}$ при $H \rightarrow \infty$, поэтому, основываясь на значениях для двойной точности, запишем $\hat{H} \leq 1.135H$. Поэтому выберем $\delta = 0.136H$, что заведомо больше $0.135H + M^{-1}$.

Число узлов квадратуры равно \hat{H}^2/π . Это наименьшее значение среди всех используемых в настоящей работе квадратурных формул.

Заметим, что в (3.14) при малых r величины $f_j(kh)$ и $f_j(-kh)$ могут быть по знаку противоположными и по модулю много большими модуля их суммы, поэтому вычисление их суммы требует регуляризации. Отсутствие этой регуляризации, равно как и прямое суммирование от $-n$ до n , ведёт к накоплению ошибок округления, в особенности для $j = 1$ (для выражения для пульсации скорости).

3.4.4. Случай $r - H < t < r + H + \delta$. Тогда в (3.3) точка $\xi = 0$ лежит внутри эффективного носителя гауссиана, и интервалом интегрирования является $(0, b)$, где

$$b = \frac{t + \hat{H}}{r} - 1.$$

Будем пользоваться квадратурными формулами Гаусса – Якоби, выбрав в качестве весовой функции $w(\xi) = 1/\sqrt{\xi}$. Заметим, что точка $\xi = -2$, в которой подынтегральная функция имеет особенность, лежит вне эффективного носителя гауссиана и поэтому (как будет видно ниже) не влияет на точность интегрирования.

Для удобства в (3.3) перемасштабируем интервал интегрирования на $(-1, 1)$, то есть сделаем замену

$$\xi(\eta) = b \frac{\eta + 1}{2}.$$

Тогда

$$\mathcal{J}_j(t, r) = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{\eta+1}} f(\eta) d\eta, \quad f(\eta) = \frac{g(\eta)}{\sqrt{\eta-c}},$$

где $c = -1 - 4/b$,

$$g(\eta) = \exp(-(r-t+r\xi)^2/2)(r-t+r\xi)(1+\xi)^j, \quad \xi \equiv \xi(\eta).$$

В качестве весовой функции выберем $w(\eta) = (\eta+1)^{-1/2}$. Поскольку b зависит от t и r , мы не можем включить $1/\sqrt{\eta-c}$ в весовую функцию. Таким образом, мы привели $\mathcal{J}_j(t, r)$ к виду (2.12).

В качестве контура Γ выберем эллипс с параметром $\rho = 1 + \sqrt{2}$. Допуская, что точка $\eta = c$ может попасть внутрь контура, запишем оценку на коэффициенты разложения $f(\eta)$ по полиномам Чебышева, складывающуюся из (2.14) и (2.15):

$$|a_n| \lesssim \frac{8K(1/2)}{\pi\sqrt{2}} \frac{1}{\rho^n} \max_{\Gamma} |g(z)| + \tilde{a}_n,$$

$$\tilde{a}_n = \frac{2}{\sqrt{\pi n}} (c^2 - 1)^{-1/4} (|c| + \sqrt{c^2 - 1})^{-n} |g(c)|.$$

Непосредственной подстановкой получаем

$$|g(c)| = \exp(-(t+r)^2/2)(t+r),$$

откуда по сделанному предположению

$$|g(c)| \leq 1.05H \exp(-(1.05H)^2/2) \leq 1.05H \exp(-0.05H^2)\varepsilon.$$

Будем также предполагать, что выполняются условия $t+r \geq H$, $r \geq R_2$. Тогда $b \leq (2H + \delta)/r$, поэтому

$$c \leq -1 - \frac{4r}{2H + \delta}.$$

Поскольку $\eta = c$ лежит вне эффективного носителя гауссиана, имеем $|g(c)| \leq \varepsilon$. Подстановкой можно убедиться, что при $r \leq R_2 = 5\varepsilon^{0.1}$ и n , использование которого будет предложено ниже, $\tilde{a}_n \ll \varepsilon$ и его можно не учитывать. Поэтому из (2.7) имеем

$$E_m(f) \leq 2 \sum_{n=2m}^{\infty} |a_n| \lesssim \frac{4K(1/2)(1+\sqrt{2})}{\pi} \frac{1}{\rho^{2m}} \max_{\Gamma} |g(z)|.$$

Теперь оценим максимум $|g(z)|$ на эллиптическом контуре. Поскольку малая полуось эллипса равна единице, из (2.17) получаем

$$\max_{\Gamma} |g(z)| \leq \exp\left(\frac{r^2 b^2}{8}\right) \max_{\Gamma} \left(\exp(-(r-t+r\operatorname{Re}\xi)^2/2) |r-t+r\xi| |1+\xi|^j\right).$$

Первый множитель не превосходит $\exp(H^2/2)$, второй является величиной порядка не больше единицы.

В итоге

$$E_m(f) \lesssim c \exp(H^2/2) (1 + \sqrt{2})^{-2m}.$$

Приравнивая к $\exp(-H^2/2)$, получаем

$$\exp(H^2) (1 + \sqrt{2})^{-2m} \lesssim 1,$$

то есть $m \gtrsim (2 \ln(1 + \sqrt{2}))^{-1} H^2 \approx 0.567 H^2$.

Как и в предыдущем случае, при малых r непосредственное использование квадратурной формулы приводит к накоплению ошибок округления в выражении для скоростей (при $j = 1$). В отличие от предыдущего случая, полностью избежать этого эффекта не удаётся, но можно существенно снизить его.

Представим

$$\frac{\xi + 1}{\sqrt{\xi(\xi + 2)}} = \frac{1}{(\xi + 1)\sqrt{\xi(\xi + 2)}} + \frac{\sqrt{\xi(\xi + 2)}}{\xi + 1},$$

тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1(t, r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-(r-t+r\xi)^2/2)}{(\xi + 1)\sqrt{\xi(\xi + 2)}} (r-t+r\xi) d\xi + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \exp(-(r-t+r\xi)^2/2) (r-t+r\xi) \frac{\sqrt{\xi(\xi + 2)}}{\xi + 1} d\xi. \end{aligned}$$

Второе слагаемое проинтегрируем по частям. Для этого заметим, что

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\sqrt{\xi(\xi + 2)}}{\xi + 1} \right) = \frac{(\xi + 1)^2 / \sqrt{\xi(\xi + 2)} - \sqrt{\xi(\xi + 2)}}{(\xi + 1)^2} = \frac{1}{(\xi + 1)^2 \sqrt{\xi(\xi + 2)}}.$$

Тогда

$$\mathcal{J}_1(t, r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-(r-t+r\xi)^2/2)}{(\xi + 1)\sqrt{\xi(\xi + 2)}} (r-t+r\xi) d\xi +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} \int_0^\infty \exp(-(r-t+r\xi)^2/2) \frac{1}{(\xi+1)^2 \sqrt{\xi(\xi+2)}} d\xi = \\
 & = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \exp(-(r-t+r\xi)^2/2) \frac{(\xi+1)(r-t+r\xi) + r^{-1}}{(\xi+1)^2 \sqrt{\xi(\xi+2)}} d\xi.
 \end{aligned}$$

Примечание. Заманчивым выглядит представление

$$\frac{1+\xi}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} = 1 + \frac{1+\xi - \sqrt{\xi(\xi+2)}}{\sqrt{\xi(\xi+2)}} = 1 + \frac{1}{\sqrt{\xi(\xi+2)}(1+\xi + \sqrt{\xi(\xi+2)})}.$$

Тогда интеграл от первого слагаемого берётся аналитически. Но во втором слагаемом подынтегральная функция имеет точку ветвления в $\xi = 0$ (на границе области интегрирования), и сходимость гауссовых квадратур из экспоненциальной превращается в степенную. Также можно пользоваться представлением

$$\mathcal{J}_1(t, r) = \mathcal{J}_0(t, r) + (\mathcal{J}_1(t, r) - \mathcal{J}_0(t, r)) \quad (3.17)$$

с последующим интегрированием выражения для разности по частям (как и в случае, выбранном в качестве основного). Но скорость стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, и поэтому сложение в (3.17) влечёт накопление ошибок округления.

3.5. Аппроксимация выражения (3.4)–(3.5). Рассмотрим семейство интегралов $\mathcal{J}_{j,n}(t, r)$, $j \in \{0,1\}$, $n \in \{1,2,3\}$, вида

$$\mathcal{J}_{j,n}(t, r) = \int_0^1 \exp\left(-\frac{(r-t+t\xi)^2}{2}\right) \tilde{I}_j(rt(1-\xi)) \frac{(1-\xi)^n}{\sqrt{\xi(2-\xi)}} d\xi.$$

Здесь $\tilde{I}_j(x) = e^{-x} I_j(x)$, а $I_j(x)$ – модифицированная функция Бесселя.

Эффективный носитель гауссиана имеет вид

$$\xi \in [a, b] \equiv \left[1 - \frac{r+H}{t}, 1 - \frac{r-H}{t}\right].$$

Подынтегральное выражение в $\mathcal{J}_{j,n}$ содержит модифицированную функцию Бесселя, вычисление значений которой может быть затратным. Поэтому мы ограничимся более узким случаем, а именно, будем предполагать, что $t+r \geq 1.05H$, $r \leq R_2 \ll 1$. В этом случае

модифицированная функция Бесселя легко вычисляется при помощи своего ряда Тейлора в нуле.

При наложенных условиях на t и r точка $\xi = 0$ лежит вне существенного носителя гауссиана, но конец области интегрирования $\xi = 1$ – внутри него. Таким образом, пересечение эффективного носителя гауссиана с $(0,1)$ даёт

$$(a, b) \cap (0,1) = (\tilde{a}, 1), \quad \tilde{a} = 1 - \frac{r + H}{t}.$$

Интегралы $\mathcal{J}_{j,n}(t, r)$ будем вычислять по квадратурным формулам Гаусса – Лежандра.

Для удобства отобразим интервал интегрирования на $(-1,1)$ заменой

$$\xi \equiv \xi(\eta) = \frac{1 + \tilde{a}}{2} + \frac{1 - \tilde{a}}{2}\eta,$$

тогда

$$\mathcal{J}_{j,n}(t, r) = \frac{1 - \tilde{a}}{2} \int_{-1}^1 \frac{g(\eta)}{\sqrt{\xi(\eta)}} d\eta = \left(\frac{1 - \tilde{a}}{2}\right)^{1/2} \int_{-1}^1 \frac{g(\eta)}{\sqrt{\eta + \frac{1+\tilde{a}}{1-\tilde{a}}}} d\eta,$$

$$g(\eta) = h(\xi(\eta)) \frac{(1 - \xi(\eta))^n}{\sqrt{2 - \xi(\eta)}},$$

$$h(\xi) = \exp\left(-\frac{(r - t + t\xi)^2}{2}\right) \tilde{I}_j(rt(1 - \xi)).$$

Мы привели выражение для $\mathcal{J}_{j,n}(t, r)$ к виду (2.12) с весовой функцией $w(\eta) \equiv 1$ и

$$c = -\frac{1 + \tilde{a}}{1 - \tilde{a}} = 1 - \frac{2t}{r + H} = -1 - 2 \frac{(t - r) - H}{r + H}.$$

Поскольку $t - r > 1.05H$, имеем $|c| - 1 \geq 0.1/(1 + R_2/H)$.

Утверждение 4. При всех $\xi \in \mathbb{C}$ выполняется $|h(\xi)| \leq \exp((t\text{Im}\xi)^2/2)$.

Доказательство. Интегральное представление

$$\tilde{I}_n(x) \equiv e^{-x} I_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \exp(x(\cos(\phi) - 1)) \cos(n\phi) d\phi$$

позволяет дать оценку $\tilde{I}_j(z) \leq \exp(-\operatorname{Re} z)$ при $\operatorname{Re} z < 0$ и $\tilde{I}_j(z) \leq 1$ при $\operatorname{Re} z \geq 0$. Тогда

$$\begin{aligned} & \left| \exp\left(-\frac{(r-t+t\xi)^2}{2}\right) \tilde{I}_j(rt(1-\xi)) \right| = \\ & = \left| \exp\left(-\frac{(r-t+t\operatorname{Re}\xi + it\operatorname{Im}\xi)^2}{2}\right) \tilde{I}_j(rt(1-\xi)) \right| \leq \\ & \leq \exp\left(-\frac{(r-t+t\operatorname{Re}\xi)^2 - (t\operatorname{Im}\xi)^2}{2}\right) \max\{1, \exp(-rt(1-\operatorname{Re}\xi))\} \leq \\ & \leq \exp\left(\frac{(t\operatorname{Im}\xi)^2}{2}\right) \max\left\{1, \exp\left(-\frac{(r-t(1-\operatorname{Re}\xi))^2}{2}\right) \exp(-rt(1-\operatorname{Re}\xi))\right\} = \\ & = \exp\left(\frac{(t\operatorname{Im}\xi)^2}{2}\right) \max\left\{1, \exp\left(-\frac{r^2 + t^2(1-\operatorname{Re}\xi)^2}{2}\right)\right\} \leq \exp\left(\frac{(t\operatorname{Im}\xi)^2}{2}\right). \end{aligned}$$

Искомое неравенство доказано. \square

Для оценки погрешности квадратурной формулы Гаусса – Лежандра воспользуемся оценкой, основанной на эллиптическом контуре Γ с параметром $\rho = 1 + \sqrt{2}$. Тогда точка, соответствующая $\xi = 0$, может лежать как вне, так и внутри контура, а точка соответствующая $\xi = 2$, лежит заведомо вне его (максимальное значение $\operatorname{Re}\xi$ на контуре равно $(1 + \sqrt{2})/2$). Как и в предыдущем случае, оценку на коэффициенты разложения $f(\eta)$ по полиномам Чебышева складывается из (2.14) и (2.15), но второе слагаемое заведомо много меньше ε . Поэтому

$$E_m(f) \lesssim \frac{4K(1/2)(1 + \sqrt{2})}{\pi} \frac{1}{\rho^{2m}} \max_{\Gamma} |g(z)|.$$

Имеем

$$\max_{\Gamma} |t \operatorname{Im}\xi| = t \frac{1 - \tilde{a}}{2} \max_{\Gamma} |\operatorname{Im}\eta| = t \frac{1 - \tilde{a}}{2} = \frac{r + H}{2},$$

отсюда

$$\max_{\Gamma} |g(z)| \leq \frac{1}{2 - (1 + \sqrt{2})/2} \exp\left(\frac{(R_2 + H)^2}{8}\right).$$

В итоге, как и в предыдущем случае, имеем

$$E_m(f) \lesssim c \exp(H^2/2)(1 + \sqrt{2})^{-2m}$$

и, приравнивая к $\exp(-H^2/2)$, получаем $m \gtrsim 0.567H^2$.

3.6. Описание алгоритма в целом. Были получены оценки точности квадратурных формул, доказывающие, что для вычисления решения с точностью $2\varepsilon \leq 2 \cdot 10^{-16}$ можно пользоваться следующим алгоритмом. Положим $R_1 = (15\varepsilon)^{1/6}$, $R_2 = 5\varepsilon^{1/10}$. Метод вычисления решения выберем в зависимости от t и r (см. рис. 2).

1. Если $t - r > 1.152H$, то:

- (a) если $r > R_1$, будем пользоваться представлением (3.2), (3.3) и вычислять последний интеграл по квадратурной формуле с равномерным шагом, числом узлов $m = \lceil \hat{H}^2/\pi \rceil$ и \hat{H} , определённым правой частью (3.16).
- (b) если $r \leq R_1$ и $t \geq 1.3H$, будем пользоваться асимптотическим рядом.
- (c) если $r \leq R_1$ и $t < 1.3H$, будем пользоваться представлением (3.4)–(3.5), вычисляя интегралы по квадратурным формулам Гаусса – Лежандра.

2. Если $t - r \leq 1.152H$, то:

- (a) если $t < \varepsilon$, положим $p'(t, r) = \exp(-r^2/2)$ и $u'_r(t, r) = -tr \exp(-r^2/2)$;
- (b) если $t < r - 1.05H$, положим $p'(t, r) = u'_r(t, r) = 0$;
- (c) если $t + r < 1.05H$, будем пользоваться квадратурами Гаусса – Лежандра для представления (3.1).
- (d) если $t + r \geq 1.05H$ и $r \leq R_2$, будем пользоваться представлением (3.4)–(3.5), вычисляя интегралы по квадратурным формулам Гаусса – Лежандра;
- (e) если все предыдущие условия не выполняются, будем пользоваться представлением (3.2), (3.3) и вычислять последний интеграл по квадратурной формуле Гаусса – Якоби.

Для всех квадратурных формул Гаусса будем использовать число узлов $n = \lceil 0.578H^2 \rceil + 1$. Определение узлов и весов этих квадратурных формул проводится на этапе инициализации. Если требуется вычислить решение в большом числе точек или моментов времени, затраты на инициализацию квадратурных формул пренебрежимо малы.

Численный эксперимент, проведённый в арифметике двойной точности, показывает, что для всех t и r абсолютная ошибка вычисления решения не превосходит $2.6 \cdot 10^{-15}$. Эта ошибка достигается при использовании представления (3.1) и $t + r \approx H$. В качестве эталонного результата брались значения, вычисленные с четверной точностью.

4. Иные способы интегрирования

4.1. Обобщённые многочлены Лагерра и Эрмита. Будем пользоваться обозначениями из раздела 2.1.

Обобщённые многочлены Лагерра с параметром α и являются ортогональными в смысле скалярного произведения

$$\int_0^{\infty} f(x)g(x)x^{\alpha} \exp(-x)dx.$$

При нормировке условием $k_n = (-1)^n/(n!)$ имеем $h_n = \Gamma(n+1+\alpha)/n!$, отсюда

$$\gamma_n = \Gamma(n+1+\alpha) n!.$$

Обобщённые многочлены Эрмита с параметром α являются ортогональными в смысле скалярного произведения

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)|x|^{\alpha} \exp(-x^2/2)dx,$$

то есть $a = -\infty$, $b = \infty$, $w(x) = |x|^{\alpha} \exp(-x^2/2)$. Обобщённые многочлены Эрмита чётного индекса являются чётными, а многочлены нечётного индекса – нечётными. Нам будет достаточно значений γ при чётном индексе.

Пусть $p_n(x)$, $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ – обобщённые многочлены Эрмита с индексом α и единичным старшим коэффициентом. Тогда

$$2 \int_0^{\infty} p_{2n}(x)p_{2m}(x)x^{\alpha} \exp(-x^2/2)dx = \gamma_{2n}\delta_{mn}.$$

Заменой $x = \sqrt{2y}$ получаем

$$2 \int_0^{\infty} p_{2n}(\sqrt{2y})p_{2m}(\sqrt{2y})(2y)^{\alpha/2} \exp(-y) \frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{y}}dy = \gamma_{2n}\delta_{mn}.$$

Перепишем это равенство в виде

$$\int_0^{\infty} \frac{p_{2n}(\sqrt{2y})}{2^n} \frac{p_{2m}(\sqrt{2y})}{2^n} y^{(\alpha-1)/2} \exp(-y)dy = \gamma_{2n}\delta_{mn} \frac{1}{2^{2n+(\alpha+1)/2}}.$$

Функции $p_{2n}(\sqrt{2y})/2^n$ и $p_{2m}(\sqrt{2y})/2^b$ являются многочленами порядка n и m соответственно, причём их старшие коэффициенты равны единице. В силу ортогональности они совпадают с обобщёнными многочленами Лагерра с показателем $(\alpha - 1)/2$. Отсюда

$$\gamma_{2n} = 2^{2n+(\alpha+1)/2} \Gamma\left(n + 1 + \frac{\alpha - 1}{2}\right) n!. \quad (4.1)$$

В частности, при $\alpha = 0$ по с использованием тождества Лежандра

$$\Gamma(z)\Gamma(z + 1/2) = 2^{1-2z} \sqrt{\pi} \Gamma(2z)$$

для $z = n + 1/2$ имеем $\gamma_{2n} = \sqrt{2\pi}(2n)!$, что является классическим результатом.

4.2. Квадратурные формулы Гаусса – Лагерра и Гаусса – Эрмита. Можно переписать (3.1) в виде

$$\begin{pmatrix} p'(t, r) \\ u'_r(t, r) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\omega| e^{-\omega^2/2} \begin{pmatrix} J_0(r\omega) \cos(t\omega) \\ J_1(r\omega) \sin(t\omega) \end{pmatrix} d\omega \quad (4.2)$$

или, сделав замену $\omega = \sqrt{2\xi}$, привести его к виду

$$\begin{pmatrix} p'(t, r) \\ u'_r(t, r) \end{pmatrix} = \int_0^{\infty} e^{-\xi} \begin{pmatrix} J_0(r\sqrt{2\xi}) \cos(t\sqrt{2\xi}) \\ J_1(r\sqrt{2\xi}) \sin(t\sqrt{2\xi}) \end{pmatrix} d\xi. \quad (4.3)$$

В качестве весовой функции можно выбрать $|\omega|e^{-\omega^2/2}$ в (4.2) и $e^{-\xi}$ в (4.3). Получающиеся при этом гауссовы квадратурные формулы называются, соответственно, обобщённой квадратурой Гаусса – Эрмита (с показателем $\alpha = 1$) и квадратурой Гаусса – Лагерра. Для вычисления узлов и весов этих квадратур также подходит алгоритм G. Golub и H. Welsh [9].

Узлами этих квадратурных формул являются нули соответствующих ортогональных полиномов. Обозначим эти полиномы, полагая для определённости их старший коэффициент равным единице, через $H_n^{(1)}(\omega)$ и $L_n^{(0)}(\xi)$, а их нули, соответственно, через $\omega_{n,j}$ и $\xi_{n,j}$. Верхний индекс соответствует показателю степенного множителя. Поскольку

$$H_{2n}^{(1)}(\omega) = 2^n L_n^{(0)}\left(\frac{\omega^2}{2}\right), \quad (4.4)$$

с точностью до переупорядочивания нулей выполняется $\omega_{2n,j} = \sqrt{2\xi_{n,j}}$, $j = 0, \dots, n - 1$, и оставшиеся n нулей расположены симметрично

относительно начала координат. Таким образом, обобщённая квадратурная формула Гаусса – Эрмита с $\alpha = 1$ и чётным числом узлов для (4.2) совпадает с квадратурной формулой Гаусса – Лагерра для (4.3). Тем не менее оценки погрешности, основанные на представлении остаточного члена (2.2), для них оказываются разными.

4.3. Оценка погрешности квадратуры для вычисления интеграла (4.2). Оценим производные от выражений в больших круглых скобках в (4.2).

Утверждение 5. Для $f(x) = \cos(tx)J_0(rx)$, $g(x) = \sin(tx)J_1(rx)$ при всех $x \in \mathbb{R}$ и $m \in \mathbb{N}$ справедливы неравенства

$$\left| \frac{d^m f(x)}{dx^m} \right| \leq (t+r)^m, \quad \left| \frac{d^m g(x)}{dx^m} \right| \leq (t+r)^m.$$

Доказательство. Из представления

$$J_n(x) = \pi^{-1} \int_0^\pi \cos(n\phi - x \sin \phi) d\phi$$

следует $|d^m J_n(x)/dx^m| \leq 1$. Также очевидно $|d^m \cos(x)/dx^m| \leq 1$. Остаётся применить формулу для старших производных от произведения. \square

Для обобщённой квадратуры Гаусса – Эрмита, использующей значения в n положительных точках, справедливо представление остаточного члена (2.2), (4.1):

$$E_{2n}(f) = f^{(4n)}(\eta) \frac{2^{2n+1}(n!)^2}{(4n)!}. \quad (4.5)$$

Подставляя оценку на производные, даваемую утверждением 5, в (4.5), получаем

$$E_{2n}(f) = (t+r)^{4n} \frac{2^{2n+1}(n!)^2}{(4n)!}.$$

Приближая факториалы по формуле Стирлинга,

$$\ln E_{2n}(f) \approx \ln \left[(t+r)^{4n} 2^{2n+1} \frac{2\pi n(n/e)^{2n}}{\sqrt{2\pi 4n}(4n/e)^{4n}} \right] = \frac{1}{2} \ln(2\pi n) + 2n \ln \left[\frac{e(t+r)^2}{8n} \right].$$

Очевидно, что требуемое число узлов для квадратурных формул, аппроксимирующих интеграл (4.2), будет расти с ростом t и r . Поэтому мы будем пользоваться ими только при $t+r \leq \alpha H$. Выберем $\alpha = 1.05$; смысл

такого ограничения объясним ниже. Чтобы оценить требуемое число узлов квадратуры, приравняем $E_{2n}(f) = \varepsilon = \exp(-H^2/2)$.

Рассмотрим случай $H \rightarrow \infty$ (когда допустимая погрешность аппроксимации стремится к нулю). При этом n/H^2 имеет конечный предел, который обозначим через X . Он удовлетворяет равенству $1/2 = 2X \ln(8X/(e\alpha^2))$. При $\alpha = 1.05$ имеем $X \approx 0.578$. То есть требуется вычислять значения подынтегральной функции в $n \approx [0.578H^2]$ точках. Более точный анализ показывает, что при $\varepsilon \leq 10^{-16}$ достаточно положить

$$n = [0.578H^2] + 1.$$

Если результат нужен с точностью, более грубой чем $2 \cdot 10^{-16}$, эта оценка нуждается в уточнении.

Хотя при малых $t + r$ использование квадратурных формул Гаусса – Лагерра позволяет использовать меньше узлов, чем квадратурная формула Гаусса – Лежандра, при $t + r \approx H$ используемые оценки дают близкое число узлов. Численные эксперименты показывают, что при использовании арифметики двойной точности результат интегрирования получается с точностью $2.6 \cdot 10^{-15}$, тогда как при использовании квадратурных формул Гаусса – Лагерра – на 1-2 порядка хуже. Основной вклад в ошибку вносит арифметическая погрешность при определении узлов и весов самих квадратурных формул. Разница в арифметической погрешности и обосновывает выбор в пользу квадратурных формул Гаусса – Лежандра.

Если оценивать требуемое число квадратурных точек, напрямую применяя (2.2) к интегралу (4.3), то оценка требуемого числа узлов квадратурной формулы получается примерно вдвое больше. Приведём её.

4.4. Оценка погрешности квадратуры для вычисления интеграла (4.3).

Утверждение 6. Для $f(x) = \cos(t\sqrt{2x})J_0(r\sqrt{2x})$, $g(x) = \sin(t\sqrt{2x})J_1(r\sqrt{2x})$ при всех $x \in (0, \infty)$ и $m \in \mathbb{N}$ справедливы неравенства

$$\left| \frac{d^m f(x)}{dx^m} \right| \leq \frac{m! e^{2m}(t+r)^{2m}}{2^m m^{2m}}, \quad \left| \frac{d^m g(x)}{dx^m} \right| \leq \frac{m! e^{2m}(t+r)^{2m}}{2^m m^{2m}}.$$

Доказательство. Воспользуемся формулой

$$\frac{d^m}{dz^m} f(z) = \frac{m!}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{m+1}} d\xi,$$

где Γ – окружность радиуса R с центром в точке z . Тогда

$$\left| \frac{d^m f(x)}{dx^m} \right| \leq \frac{m!}{R^m} \max_{\Gamma} |f(\xi)|.$$

Заметим, что для всех $\xi \in \mathbb{Z}$ верно $|\cos \sqrt{\xi}| \leq \exp(|\operatorname{Im} \sqrt{\xi}|)$ и

$$|J_0(\sqrt{\xi})| = \left| \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(\sqrt{\xi} \sin \phi) d\phi \right| \leq \max_{0 \leq \eta \leq 1} |\cos(\eta \sqrt{\xi})| \leq \exp(|\operatorname{Im} \sqrt{\xi}|).$$

Поэтому

$$|f(\xi)| \leq \exp((t+r)|\operatorname{Im} \sqrt{2\xi}|).$$

Рассмотрим на комплексной плоскости кривые вида $\operatorname{Im} \sqrt{\xi} = a$, $a > 0$. Это равенство равносильно $\sqrt{\xi} = t + ia$ для некоторого $t \in \mathbb{R}$. Возводя в квадрат, получаем

$$\xi = (t^2 - a^2) + 2iat, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (4.6)$$

Эта кривая является параболой с действительной осью и вершиной в точке $\xi = -a^2$. Максимум $|\operatorname{Im} \sqrt{\xi}|$ достигается в точке касания. Таким образом, получаем

$$\left| \frac{d^m f(x)}{dx^m} \right| \leq \frac{m!}{R^m} \exp((t+r)|\operatorname{Im} \sqrt{2\xi}|),$$

где ξ – точка касания окружности радиуса R с центром в z с параболой вида (4.6). Если зафиксировать параметр параболы a , становится видно, что чем меньше z , тем меньший радиус R будет у окружности, помещающейся между ветвями этой параболы. При $z = 0$ окружность будет касаться параболы в точке $\xi = -a^2$ (радиус кривизны параболы равен $2a^2$, что больше a^2). Таким образом, при $z = 0$ имеем $a = \sqrt{R}$ и

$$\left| \frac{d^m f(x)}{dx^m} \right| \leq \frac{m!}{R^m} \exp((t+r)\sqrt{2R}).$$

Минимум этого выражения по R достигается при $R = 2m^2/(t+r)^2$. Выбор в качестве Γ окружности этого радиуса с центром в z значения даёт искомую оценку. Доказательство второго неравенства аналогично. \square

Подставим, например, $t = 1/\sqrt{2}$, $r = 0$, тогда $f(x) = \cos \sqrt{x}$. Заметим, что ряд Тейлора функции $\cos(\sqrt{z})$ в нуле имеет вид

$$\cos(\sqrt{z}) = \operatorname{Re} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^j \sqrt{z}^j}{j!} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j z^j}{(2j)!},$$

поэтому её m -я производная в нуле по модулю равна $m!/(2m)!$, что с точностью до множителя $\sqrt{2\pi m}$ асимптотически совпадает с доказанной оценкой.

Воспользуемся оценкой погрешности квадратурной формулы Гаусса – Лагерра на основе представления остаточного члена (2.2), где $\gamma_m = (m!)^2 / (2m)!$:

$$E_m(f) = \frac{(m!)^2}{(2m)!} \left| \frac{d^{2m}}{dz^{2m}} f(z) \right|,$$

где $z \in (0, \infty)$. В нашем случае

$$E_m(f) \leq \frac{(m!)^2 (2m)! e^{4m} (t+r)^{4m}}{(2m)! 2^{2m} m^{4m}} \approx 2\pi m \left(\frac{e(t+r)^2}{2m} \right)^{2m}.$$

Оценим число узлов, требуемых для вычисления интеграла с точностью $\varepsilon = \exp(-H^2/2)$, в предположении что $t+r \leq 1.05H$. Приравнявая $E_m(f) = \varepsilon$ и логарифмируя,

$$\ln(2\pi m) + 2m \ln \left(\frac{e(1.05H)^2}{2m} \right) \leq -\frac{H^2}{2}.$$

Пренебрегая первым слагаемым, получаем $m \approx e(1.05H)^2 / (2X) \approx 1.5H^2$, где $X \approx 0.868$ – корень уравнения $\ln X = -X / (2e \cdot 1.05^2)$.

Список литературы

1. Бахвалов П. А. Численное вычисление решений задач о распаде гауссового импульса и дифракции на углу $2\pi/n$ // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 3. С. 1–36.
2. Bakhvalov P. CoLESo: collection of exact solutions for verification of numerical algorithms for simulation of compressible flows // Computer Physics Communications. 2023. Vol. 282. p. 108542.
3. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. с. 832.
4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Наука, 1987. с. 600.
5. Gautschi Walter. A Survey of Gauss-Christoffel Quadrature Formulae // E. B. Christoffel: The Influence of His Work on Mathematics and the Physical Sciences / под ред. P. L. Butzer, F. Fehér. Basel: Birkhäuser Basel, 1981. С. 72–147.
6. Elliott D. Chebyshev series method for the numerical solution of Fredholm integral equations // Computer J. 1963. Vol. 6. P. 102–112.

7. Elliott D. The evaluation and estimation of the coefficients in the Chebyshev series expansion // Math. Comp. 1966. Vol. 18. P. 274–284.
8. Goodwin E. T. The evaluation of integrals of the form $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2} dx$ // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1949. Vol. 45. P. 241–245.
9. Golub G., Welsh H. Calculation of Gauss quadrature rules // Math. Comp. 1968. Vol. 23. P. 221–230.
10. Elhay S., Kautsky J. ALGORITHM 655. IQPACK. FORTRAN subroutines for the weights of interpolatory quadratures // ACM Transactions on Mathematical Software. 1987. Vol. 13. P. 274–284.
11. Matrix Eigensystem Routines – EISPACK Guide / Smith B. T., Boyle J., Garbow B. et al. Lecture Notes in Computer Science, vol. 6., Springer Verlag, 1976.
12. Цимринг Ш. Е. Специальные функции и определенные интегралы. Алгоритмы. Программы для микрокалькуляторов: Справочник. М.: Радио и связь, 1988. с. 272.
13. Gautschi W. Construction of Gauss-Christoffel Quadrature Formulas // Math. Comp. 1968. Vol. 22. P. 251–270.