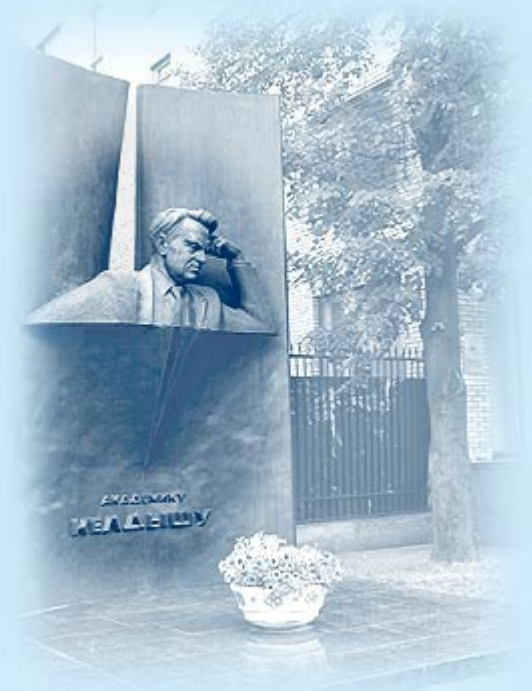




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 16 за 2025 г.



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

В.П. Варин

Спектральные методы и квadrатуры

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Варин В.П. Спектральные методы и квадратуры // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 16. 25 с. EDN: [YDSKON](https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-16)
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-16>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМЕНИ М.В. КЕЛДЫША

В.П. Варин

СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И КВАДРАТУРЫ

Москва, 2025

УДК 521.1+531.314

В.П. Варин. Спектральные методы и квадратуры. Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, 2025.

Классические интерполяционные квадратуры и, в частности, квадратуры Гаусса рассматриваются в контексте спектральных методов, т.е. методов решения краевых задач для линейных ОДУ путем разложения их в ряды по ортогональным (и не только) полиномам. Показано, что преобразования Фурье здесь играют ключевую роль и позволяют вычислить нужные квадратуры весьма просто. Даны явные формулы для некоторых квадратур и сравнение их эффективности для высокоточного вычисления интегралов. Приведена простая Maple процедура для квадратуры Кленшо–Куртиса и рассмотрено ее приложение к вычислению интеграла, дающего функцию сумма делителей натурального числа.

Ключевые слова. Спектральные методы, квадратуры, функция сумма делителей, гипотеза Римана.

V.P. Varin. Spectral methods and quadratures. Preprint of the Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, 2025.

Classical interpolatory quadratures and, in particular, Gauss' quadratures are considered in the context of spectral methods, i.e., the methods of solution of boundary value problems for linear ODEs by expanding them in series of orthogonal (but not only) polynomials. We demonstrate that Fourier transforms play here a key role and allow to compute the needed quadratures in a simple way. We give explicit formulas for some quadratures and compare their effectiveness for high-precision computation of integrals. We present a simple Maple procedure for the Clenshaw–Curtis quadrature and consider its application to the computation of an integral giving the sum of divisors function.

Key words. Spectral methods, quadratures, sum of divisors function, Riemann hypothesis.

© ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.
Москва, 2025 г.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вычисление квадратур, т.е. приближенное вычисление определенных интегралов, является старейшим и одним из наиболее разработанных разделов численного анализа, который развивался задолго до появления компьютеров.

С появлением компьютеров исследования здесь шли как в направлении эффективной реализации существующих алгоритмов, так и в направлении создания новых специализированных алгоритмов, предназначенных для вычисления определенных классов квадратур.

В настоящее время эта тема может показаться исчерпанной, так как определенные интегралы вычисляются в существующих пакетах программ по готовым процедурам, которые могут адаптироваться к типу квадратуры, т.е. учитывать особенности подынтегральной функции.

Однако высокоточное вычисление квадратур не является приоритетом или специализацией существующих алгоритмов, реализованных, например, в системах компьютерной алгебры (CAS), а скорее является темой отдельных исследований (см., например [1]).

Высокоточные вычисления находят приложения как в прикладных задачах, так и в достаточно абстрактных разделах математики (например, в теории чисел) и зачастую требуют определенной ревизии существующих методов.

Так, иногда встречаются интегралы, для которых существующие алгоритмы оказываются совершенно неадекватными. Один из таких примеров мы подробно разберем в разд. 5. Пока что отметим, что, например, встроенные процедуры численного интегрирования в Maple могут считать неоправданно долго либо зависать или давать отказ.

Приведем простой пример, который иллюстрирует существующие ограничения. Рассмотрим интеграл

$$P.V. \int_0^2 \frac{dx}{1-x^2} = \frac{1}{2} \ln 3.$$

Этот интеграл вычисляется в явном виде в системе Maple, однако Maple отказывается вычислять его численно. Это означает, что для более сложных подобных задач мы не получим ответа ни символьно, ни численно.

Между тем численное значение таких интегралов может быть получено с большой точностью, если выйти в комплексную область. В данном случае

$$\frac{1}{2} \ln 3 = \operatorname{Re} \left(\int_0^{1+i} \frac{dx}{1-x^2} + \int_{1+i}^2 \frac{dx}{1-x^2} \right).$$

И хотя Maple может успешно вычислять комплекснозначные интегралы, опыт показывает, что вычисление интегралов по комплексному пути не является приоритетом существующих алгоритмов.

Наш интерес к этой проблеме (высокоточного вычисления квадратур) вызван как практическими потребностями вычисления интегралов с высокой и контролируемой точностью, так и наблюдением, которое мы сделали в [2], о связи нашего спектрального метода решения краевых задач для голономных ОДУ (разложения по полиномам Лежандра) с обычными квадратурами Гаусса (с единичным весом).

В разд. 2 мы изучаем общие квадратуры Гаусса и их связь со спектральным методом (разложением функций по соответствующим ортогональным полиномам). Хотя эта теория может показаться завершённой, однако мы покажем, что это не так.

В разд. 3 мы рассматриваем обычные интерполяционные квадратуры, которые формально не опираются на свойства ортогональности полиномов, и поэтому не требуют весовой функции. В частности, это классические квадратуры Фежера (Fejér) и Кленшо–Куртиса (Clenshaw–Curtis), по которым существует огромная библиография.

Мы покажем, что наш «спектральный подход» к этим квадратурам обладает рядом преимуществ по сравнению с классической теорией. В частности, выбор узлов квадратуры и выбор полиномов, по которым раскладываются подынтегральные функции, формально независимы. Однако матрицы преобразований Фурье существенно зависят от этих выборов, поэтому узлы и полиномы Чебышева почти всегда являются естественным выбором.

В разд. 4 мы приводим явные формулы для квадратур Фежера и Кленшо–Куртиса, которые следуют из нашего спектрального метода (см. [2], [3]). А также даем одну готовую Maple-процедуру, которая может быть легко модифицирована для всех случаев этих квадратур.

Наконец, в разд. 5 мы приводим пример применения наших методов к интегралу, который дает значение функции сумма делителей натурального числа, $\sigma(n)$. Существование такого интеграла анонсировалось в работе [4], однако ранее он не приводился.

2. КВАДРАТУРЫ ГАУССА

Квадратурами Гаусса мы называем, следуя монографии [5], наибольшие по порядку точности квадратурные формулы типа

$$\int_a^b \omega(x) y(x) dx \approx \sum_{n=1}^N w_n y(x_n) = G_N(y(x)), \quad (1)$$

где $[a, b] \in \mathbb{R}$ – это конечный или бесконечный интервал; N – это порядок квадратуры; $\omega(x) \geq 0$, $x \in [a, b]$ – это весовая функция, такая, что все интегралы

$$\int_a^b \omega(x) x^n dx, \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

т.е. *моменты*, определены; а $x_n \in [a, b]$ и $w_n > 0$ – это, соответственно, узлы и веса квадратурной формулы.

Напомним, что порядок точности квадратурной формулы M – это наибольшая степень многочленов $y(x)$, для которых формула (1) точна. Для квадратур Гаусса $M = 2N - 1$.

Как показано в [5, р. 101], для того чтобы формула (1) была квадратурой Гаусса, необходимо и достаточно, чтобы квадратура (1) была интерполяционной, т.е. правая часть (1) была интегралом от интерполяционного полинома Лагранжа функции $y(x)$ с узлами x_n , а также чтобы

$$\int_a^b \omega(x) x^n p_N(x) dx = 0, \quad n = 0, \dots, N-1, \quad p_N(x) = \prod_{n=1}^N (x - x_n).$$

Согласно общей теории ортогональных многочленов (см. также [5]), все эти требования выполнены для системы многочленов

$$\{p_n(x), n \in \mathbb{N}_0\}, \quad (2)$$

ортогональных на отрезке $[a, b]$ с весом $\omega(x)$.

Только что изложенное – это примерно все, что можно найти в литературе об общих квадратурах Гаусса, если добавить сюда еще некоторые интегральные формулы для вычисления весов w_n в (1). Далее теория развивается по пути спецификации для конкретных наборов ортогональных полиномов.

Между тем спектральное представление функций и связанные с ним преобразования Фурье позволяют взглянуть на квадратуры Гаусса под другим углом.

Пусть задана система полиномов (2) и пусть $\{x_n \in (a, b), n = 1, \dots, N\}$ – это корни полинома $p_N(x)$. Никакой нормировки полиномов $p_n(x)$ при этом не предполагается. В частности, $p_0(x) = \text{const} \neq 0$.

Пусть размерность аппроксимации N фиксирована. Напомним (см. [3]), что *спектральным представлением функции $y(x)$* называется сопоставление этой функции ее разложения по полиномам (2). Мы пишем

$$y(x) = \sum_{n=0}^{N-1} a_n p_n(x), \quad (3)$$

имея в виду равенство в проективном смысле.

Иными словами, функция $y(x)$ в спектральном представлении – это таблица ее *коэффициентов Фурье*, которую мы записываем в виде вектора

$$y_a = \langle a_0, \dots, a_{N-1} \rangle^t \in \mathcal{A}_N,$$

где \mathcal{A}_N – это линейное пространство коэффициентов Фурье.

Но функцию можно также кодировать с помощью таблицы ее значений в выбранных узлах. Поэтому имеем также *коллокационное представление функции* $y(x)$: ее полином Лагранжа с узлами x_n . Мы пишем

$$y(x) = \sum_{n=1}^N \frac{p_N(x)}{(x - x_n) p'_N(x_n)} y(x_n), \quad (4)$$

где равенство понимается в том смысле, что эта запись эквивалентна формуле (3), т.е. представляет один и тот же объект.

Иными словами, функция $y(x)$ в коллокационном представлении – это таблица ее значений в корнях полинома $p_N(x)$, которую мы записываем в виде вектора

$$y = \langle y_1, \dots, y_N \rangle^t \in \mathcal{H}_N, \quad y_n = y(x_n),$$

где \mathcal{H}_N – это линейное пространство значений функций в узлах x_n .

Заметим, что для функций $y(x) \in \mathcal{P}_N$, т.е. для полиномов степени не выше $N - 1$ (и только для них), оба равенства, (3) и (4), являются точными.

Преобразования Фурье здесь появляются совершенно естественным образом, как преобразования представлений функции $y(x)$ из спектрального в коллокационное и наоборот.

Интерполяционная формула (3) – это не что иное, как аналог обратного (дискретного) преобразования Фурье (которое мы обозначаем F^{-1}), так как это линейный оператор, действующий в пространстве коэффициентов Фурье \mathcal{A}_N и восстанавливающий функцию $y(x)$, как таблицу ее значений в выбранных узлах. Поэтому матрица этого преобразования всегда известна в явном виде:

$$F^{-1} = [p_{k-1}(x_j)]_{1 \leq j, k \leq N}, \quad F^{-1}: \mathcal{A}_N \rightarrow \mathcal{H}_N. \quad (5)$$

Для ортогональных полиномов эта матрица всегда обратима и дает дискретное преобразование Фурье

$$F = (F^{-1})^{-1}: \mathcal{H}_N \rightarrow \mathcal{A}_N. \quad (6)$$

Преобразования F^{-1} и F , очевидно, точны на множестве функций $y(x) \in \mathcal{P}_N$, так как здесь полиномы просто преобразуются к другому виду.

Обращаем внимание на важный факт, который (насколько нам известно) не упоминается в литературе.

Как отмечалось, никакой нормировки ортогональных полиномов априори не требуется. Теоретически от нее ничего не зависит, так как при другой нормировке просто изменятся коэффициенты Фурье в формуле (3), а формула (4) вообще не изменится.

Однако можно проверить, что число обусловленности матрицы F существенно зависит от нормировки, и это важно при численных расчетах. В частности, нормировка $p_n(x) = x^n + \dots$ очень плоха. Какая нормировка наилучшая, т.е. минимизирующая число обусловленности, – это пока открытый вопрос.

Умножение функций в пространстве \mathcal{H}_N – это поэлементное перемножение векторов. В частности, умножение функции $y(x)$ на x – это линейный оператор в \mathcal{H}_N , который индуцирует линейный оператор X в пространстве \mathcal{A}_N :

$$X: \{a_n\} \rightarrow \{b_n\}, \quad x y(x) = \sum_{n=0}^{N-1} b_n p_n(x),$$

где равенство (как и ранее) в проективном смысле.

Оператор X , очевидно, как и любой оператор умножения функции $y(x)$ на функцию $v(x)$, может быть записан в виде

$$v(X) = F \text{Diag} [v(x_1), \dots, v(x_N)] F^{-1}: \mathcal{A}_N \rightarrow \mathcal{A}_N, \quad (7)$$

т.е. умножение на функцию $v(x)$ в \mathcal{H}_N – это линейный оператор, действующий в \mathcal{A}_N , матрица которого вычисляется по формуле (7). И эта матрица определена для любой функции, определенной в корнях полинома $p_N(x)$.

Определим *единичный вектор* $e \in \mathcal{A}_N$, который соответствует функции $e(x) \equiv 1$. Этот вектор всегда имеет вид

$$e = \langle 1/c, 0, \dots, 0 \rangle^t, \quad p_0(x) = c. \quad (8)$$

Для полиномов Лежандра $c = 1$, а для полиномов Чебышева обычно $c = 1/2$ (но это можно изменить).

Заметим теперь, что

$$y_a = \langle a_0, \dots, a_{N-1} \rangle^t = y(X) e,$$

при условии, что матрица $y(X)$ определена (т.е. функция $y(x)$ определена в корнях полинома $p_N(x)$). Тогда $a_0 = y(X) e[1]$, т.е. нулевой коэффициент в разложении (3) – это первый элемент вектора $y(X) e$. Поэтому всегда

$$G_N(y(x)) = q y(X) e[1], \quad q = \int_a^b \omega(x) p_0(x) dx. \quad (9)$$

Квадратуру Гаусса также можно записать как скалярное произведение двух векторов:

$$G_N(y(x)) = \langle w_1, \dots, w_N \rangle \langle y_1, \dots, y_N \rangle^t = w^t y,$$

где $y \in \mathcal{H}_N$. Совершенно эквивалентная запись получается в пространстве коэффициентов Фурье:

$$G_N(y(x)) = q \langle 1, 0, \dots, 0 \rangle \langle a_0, \dots, a_{N-1} \rangle^t = q c e^t y_a,$$

где $y_a \in \mathcal{A}_N$. Но $y_a = F y$, поэтому

$$q c e^t F y = w^t y.$$

Следовательно, веса w_n квадратурной формулы Гаусса (1) всегда даются первой строкой матрицы преобразования Фурье для данной системы ортогональных полиномов:

$$w_n = \int_a^b \frac{\omega(x) p_N(x)}{(x - x_n) p'_N(x_n)} dx = q F_{1,n}, \quad n = 1, \dots, N.$$

Оператор X играет ключевую роль в спектральных методах решения краевых задач для ОДУ (см. [2], [3]). Как показано в [2], матрица оператора X (которая вычисляется по формуле (7) для $v(x) = x$) является, на самом деле, транспонированной матрицей Якоби, ассоциированной с системой полиномов (2). Напомним, что тождество Якоби имеет вид (см. [6])

$$x p = J p + g \langle 0, 0, \dots, p_N(x) \rangle^t, \quad (10)$$

где вектор $p = \langle p_0(x), p_1(x), \dots, p_{N-1}(x) \rangle^t$, а g — это некоторая константа, зависящая от набора полиномов (2) и, возможно, от N .

Умножение любого вектора $y_a \in \mathcal{A}_N$ на x эквивалентно скалярному произведению этого вектора и левой части (10). Поэтому, транспонируя (10), получаем $X = J^t$.

Заметим, что матрица Якоби J была определена Якоби для вычисления ее спектра методом Якоби. Этот спектр, очевидно, совпадает с корнями полинома $p_N(x)$.

Тем не менее этот метод вычисления корней ортогональных полиномов получил название «the Golub–Welsch algorithm». И это несмотря на то, что сами авторы в [7] указали как источник монографию [6], где приоритет Якоби явно указан.

Матрица J дает еще один способ вычисления весов квадратурной формулы (1). Но для этого нормировка полиномов (2) должна быть такой, чтобы

(всегда трехдиагональная) матрица J была бы еще и симметричной. Отметим, что в этом случае коэффициенты полиномов (2), как правило, иррациональны. Тогда (см. [6])

$$w_n = q (v_n[1])^2, \quad n = 1, \dots, N,$$

где v_n – это собственный вектор с евклидовой нормой единица (симметричной) матрицы J , соответствующий корню x_n , а $v_n[1]$ – это его первый элемент.

До сих пор все необходимые расчеты в этом разделе могли быть выполнены только в плавающей арифметике, так как (почти) все упомянутые величины являются иррациональными числами. Этот факт настолько очевиден, что он никогда не отмечается в литературе (насколько нам известно).

Однако тождество Якоби позволяет, в принципе, проводить некоторые расчеты в рациональной арифметике, так как матрица Якоби J определяется из трехзвенного линейного соотношения для полиномов (2). Поэтому если коэффициенты полиномов (2) рациональны (а это часто именно так и, в частности, $c \in \mathbb{Q}$ в (8)), то матрица J , а значит, и $X = J^t$ будет содержать только рациональные элементы, т.е. будет иметь абсолютно точное представление.

Если еще потребовать, чтобы число q , определенное в формуле (9), было рациональным, то получаем

Следствие. *Квадратуры Гаусса любого порядка от любой рациональной функции с рациональными коэффициентами являются рациональными числами либо неопределенны (равны бесконечности).*

Доказательство, на самом деле, уже получено в формуле (9), так как для любой рациональной функции $y(x)$ матрица $y(X)$ получается формальной подстановкой матрицы X вместо переменной x (см. [8]). Поэтому матрица $y(X)$ имеет рациональные элементы. Ч.Т.Д.

Этот факт был обнаружен нами сперва эмпирически для смещенных полиномов Лежандра с помощью высокоточных расчетов в плавающей арифметике, а затем доказан (см. [2]).

3. ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ КВАДРАТУРЫ

Квадратуры Гаусса обладают существенным преимуществом по сравнению с обычными интерполяционными квадратурами. Они требуют примерно вдвое меньшего количества узлов для достижения того же порядка точности.

Однако за это преимущество приходится платить тем, что вычисляются на самом деле не произвольные интегралы от регулярной на отрезке функции, а интегралы с некоторым весом $\omega(x)$, от которого зависят ортогональные полиномы (2).

Это ограничение снимается для ортогональных полиномов Лежандра, так как здесь $\omega(x) = 1$. Так что эти квадратуры (Лежандра–Гаусса (LG)) наиболее популярны в численном анализе.

Однако они также обладают рядом существенных недостатков, которые особенно видны при высокоточных расчетах, когда требуется вычислять серию квадратур различного порядка.

Дело в том, что корни полиномов Лежандра известны только численно и каждый раз требуют перерасчета с нужным количеством десятичных разрядов. Для больших N (порядка 100 и более) это быстро становится непрактичным.

Существуют быстрые асимптотические методы расчета гауссовых узлов и весов (см. [9]), однако они очень сложны и громоздки и приспособлены для расчетов в обычной плавающей арифметике.

Для высокоточных расчетов в некоторых работах (см. [1]) предлагается один раз вычислить серию таблиц узлов и весов разной размерности (и точности), а затем использовать эти таблицы. Однако этот подход может быть эффективным (по нашему мнению) только в некоторых специальных случаях. Для целей быстрого и эффективного (и высокоточного) вычисления интегралов он не практичен.

В то же время известно, что чебышевские узлы асимптотически близки к оптимальному распределению узлов на интервале для приближения функции в равномерной метрике. Кроме того, чебышевские узлы известны в явном виде и не сильно отличаются от корней полиномов Лежандра. Так что эти узлы (или их модификацию) используют в качестве начального приближения узлов Лежандра для их вычисления методом Ньютона (см. [1]).

Эти эвристические соображения позволяют надеяться, что интерполяционные квадратуры типа

$$\int_a^b y(x) dx \approx \sum_{n=1}^N w_n y(x_n) = I_N(y(x)), \quad (11)$$

также будут эффективными. Здесь $x_n \in [a, b]$ теперь – это (как правило) масштабированные узлы полиномов Чебышева (первого или второго рода), а $w_n > 0$ – это соответствующие веса квадратурной формулы.

Заметим, что веса w_n однозначно определяются выбранным набором узлов:

$$w_n = \int_a^b \frac{p_N(x)}{(x - x_n) p'_N(x_n)} dx, \quad p_n(x) = c_n \prod_{k=1}^n (x - x_k), \quad n = 0, \dots, N, \quad (12)$$

где $c_n \neq 0$ – это некоторые константы. При этом полиномы $p_n(x)$ даже не обязаны быть ортогональными.

Разумеется, изложенные соображения уже неоднократно использовались для создания квадратур этого типа. Самые известные из них – это:

- 1) квадратуры Фежера первого и второго типа, использующие корни полиномов Чебышева, соответственно, первого и второго рода;
- 2) квадратура Кленшо–Куртиса, использующая корни полинома $(1 - x^2)U_{N-2}(x)$ (см. ниже).

Квадратуры Фежера (см. [10]) были практически забыты. Но после появления статьи [11] эта тема стала весьма популярной и квадратуры Фежера вновь включились в повестку.

Формула (12) наводит на мысль, что полиномы $p_n(x)$, определенные там, используются (неявно) для разложения функций $y(x)$ на отрезке $[a, b]$ по этим полиномам. В квадратурах 1) и 2) это действительно так.

Однако наш «спектральный» формализм, развитый в предыдущем разделе, показывает, что это не так. То есть узлы x_n и система полиномов (2) вообще никак не связаны, а интерполяционные квадратуры зависят только от выбранного набора узлов. При этом узлы x_n не обязаны принадлежать отрезку $[a, b]$ и могут быть комплексными.

Возможность использования комплексных узлов обсуждалась в [5] для интегрирования аналитических функций в комплексной области. Но в литературе мы не нашли ни одного примера такой квадратуры.

Итак, пусть $\{x_n, n = 1, \dots, N\}$ – это произвольный набор попарно различных комплексных чисел. И пусть задан произвольный набор полиномов

$$\{q_n(x), \deg(q_n(x)) = n, n = 0, 1, \dots, N - 1\}, \quad (13)$$

и N фиксировано.

Тогда определены обратное и прямое преобразования Фурье (5) и (6), где вектор y_a состоит из коэффициентов разложения (3), но теперь по полиномам (13). То есть матрица F^{-1} всегда обратима (так как эти преобразования переводят запись полинома $y(x) \in \mathcal{P}_N$ (3) в (4) и наоборот).

Определим вектор-строку

$$v_a = \langle v_1, \dots, v_N \rangle, \quad v_n = \int_a^b q_{n-1}(x) dx. \quad (14)$$

Тогда

$$I_N(y(x)) = v_a y_a,$$

А также (см. (4)),

$$I_N(y(x)) = \langle w_1, \dots, w_N \rangle y = v_a F y,$$

поэтому всегда

$$w_n = (v_a F)[n], \quad n = 1, \dots, N,$$

причем последняя формула не зависит от набора полиномов (13).

Таким образом, веса интерполяционных квадратур (на интервале $[a, b]$) (так же как и квадратур Гаусса) определяются однозначно выбранными узлами. Но если выбор узлов квадратур Гаусса целиком определяется весовой функцией и требованием максимального порядка точности квадратуры, то для узлов обычных интерполяционных квадратур формально не предъявляется никаких требований, так же как и для системы полиномов (13). Однако на практике это, конечно, не так.

Во-первых, узлы обычно выбирают в интервале $[a, b]$ из соображений удобства. В традиционных квадратурах 1) и 2) это действительно так. Причем корни полиномов Чебышева являются естественным выбором.

Во-вторых, от выбора полиномов (13) существенно зависит число обусловленности матрицы преобразования Фурье, а значит, и точность расчетов в плавающей арифметике с фиксированной разрядностью. В частности, выбор простейших полиномов $q_n(x) = x^n$ формально дает то же самое, что и любые другие, но число обусловленности здесь катастрофически велико.

Оказывается, полиномы Чебышева (или их модификации) здесь также наиболее удобны и дают близкие к минимальным числа обусловленности матриц F для размерности аппроксимации N . При этом узлы можно брать как, скажем, корни полиномов Чебышева второго рода, $U_n(x)$, а полиномы (13) – как полиномы Чебышева первого рода, $T_n(x)$ (см. ниже).

Хотя строгое утверждение здесь сформулировать затруднительно, так как (см. разд. 2) числа обусловленности матриц F зависят еще и от нормировки полиномов (13).

Часто упоминаемое преимущество квадратур Фежера и квадратуры Кленшо–Куртиса – это возможность использования быстрого преобразования Фурье (БПФ) и использования ранее вычисленных узлов и значений функции при увеличении N . Программы, которые можно найти в интернете, обычно устроены именно так (и поэтому весьма громоздки).

Однако, по нашему мнению, это означает просто применение этих квадратур не по назначению, так как большое число узлов (100, 1000 и более), где БПФ только и начинает быть эффективным, нужно только для интегрирования функций с особенностями по краям либо внутри интервала. Интегралы

от аналитических функций на интервале $[a, b]$ обычно требуют небольшого количества узлов.

Например, все интегралы от регулярных функций из статьи [1] считаются квадратурами 1), 2) с точностью 300–400 десятичных разрядов для количества узлов не более 1000. И эти квадратуры вполне заменяют квадратуру LG, которая использовалась в [1].

Другой аргумент, который приводится в пользу использования БПФ, – это контроль точности вычисления интеграла, которую предлагается оценивать, сравнивая квадратуры, скажем, порядка N и $2N$.

Однако такой функционал погрешности напоминает правило Рунге (которое имеет лишь исторический интерес) для метода Рунге–Кутты.

Преобразования Фурье F , которые известны в явном виде для квадратур 1), 2), дают (по нашему мнению) гораздо более эффективный функционал погрешности: последний элемент вектора y_a .

Вектор y_a содержит коэффициенты разложения аналитической функции по полиномам Чебышева. Поэтому величина $y_a[N]$ убывает экспоненциально быстро. Кроме того, такие ряды обычно близки к знакопеременным для фиксированных $x \in [a, b]$, поэтому величина $(b - a) |y_a[N]|$ для полиномов $T_n(x)$ или величина $(N + 1) (b - a) |y_a[N]|$ для полиномов $U_n(x)$ дают надежную (хотя и обычно завышенную) оценку погрешности.

4. СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И КВАДРАТУРЫ

Здесь мы приведем сводку формул для спектральных методов, соответствующих квадратурам Фежера и Кленшо–Куртиса. Формулы для весов этих квадратур получаются весьма просто по результатам предыдущих разделов.

В отличие от традиционного подхода, когда базовый интервал $[a, b] = [-1, 1]$, мы используем интервал $[a, b] = [0, 1]$ и, следовательно, смещенные полиномы Чебышева.

Формально в квадратурной формуле ничего не зависит от выбора интервала, кроме множителя, комперсирующего длину интервала. Однако спектральные методы, которые мы предъявляем, очевидно зависят от интервала, так как функции от матриц X зависят от спектра этих матриц.

В частности, на интервале $[0, 1]$ определены (и вещественны) матрицы \sqrt{X} и $\ln X$, а для интервала $[-1, 1]$ это не так.

Чтобы не умножать сущности, для каждого спектрального метода мы используем одни и те же обозначения. Это тем более удобно, что все наши методы формально взаимозаменяемы.

Квадратура Фежера первого типа (F-1) полностью соответствует спектральному методу, изложенному в [3]. То есть используется система полиномов

$$\{p_0(x) = 1/2, p_n(x) = T_n(2x - 1), n \in \mathbb{N}\}. \quad (15)$$

Спектр матрицы X размерности $N > 1$ – это корни полинома $p_N(x)$:

$$x_n = \cos^2\left(\frac{(2n-1)\pi}{4N}\right), \quad n = 1, \dots, N. \quad (16)$$

Поскольку матрица F здесь известна в явном виде (см. [3]), то осталось вычислить вектор-строку v_a (14). Имеем

$$v_a = \left\langle \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{3}, 0, -\frac{1}{15}, 0, -\frac{1}{35}, 0, -\frac{1}{63}, 0, \dots \right\rangle, \quad v_n = \int_0^1 p_{n-1}(x) dx,$$

где нечетные элементы (начиная с третьего) даются формулой

$$v_n = -\frac{1}{4[n/2]^2 - 1}, \quad n = 3, 5, \dots$$

Поэтому веса w_n (после некоторых упрощений) вычисляются по формуле

$$w_n = \frac{1}{N} \left(1 - 2 \sum_{k=1}^{[N/2]} \frac{1}{4k^2 - 1} \cos\left(\frac{k(2n-1)\pi}{N}\right) \right), \quad n \leq [N/2]; \quad w_{N+1-n} = w_n.$$

Для нечетного N нужна еще формула

$$w_{[N/2]+1} = \frac{1}{N} \left(1 - 2 \sum_{k=1}^{[N/2]} \frac{(-1)^k}{4k^2 - 1} \right).$$

Таким образом, интеграл от фундаментальных полиномов Лагранжа для узлов (16), т.е. веса квадратуры F-1, известны явно. Заметим, что Maple не может вычислить эти интегралы в явном виде.

Отметим один факт, который мы не нашли в литературе.

Поскольку квадратура F-1 интерполяционная, то она точна на полиномах степени не выше $N - 1$ (как и всякая другая). Однако можно проверить, что квадратура F-1, как и все квадратуры типа 1) и 2), точна на полиномах степени не выше N для нечетных N . Строгое доказательство этого факта можно получить из данных выше формул.

Перейдем к квадратуре Фежера второго типа (F-2), но сначала дадим формулы для спектрального метода, соответствующего смещенным полиномам

Чебышева второго рода, $U_n(2x-1)$. Как оказалось, этот спектральный метод наиболее «симметричен» из всех методов, использующих полиномы Чебышева. То есть никаких вспомогательных коэффициентов типа $p_0(x) = 1/2$ здесь не требуется (см. [3] для сравнения). В частности, единичный вектор e (см. разд. 2) – это обычный единичный вектор.

Здесь мы используем систему полиномов

$$\{p_n(x) = U_n(2x-1), n \in \mathbb{N}_0\}, \quad p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = 4x-2, \dots \quad (17)$$

Спектр матрицы X размерности $N > 1$ – это корни полинома $p_N(x)$:

$$x_n = \cos^2\left(\frac{n\pi}{2(N+1)}\right), \quad n = 1, \dots, N. \quad (18)$$

Напомним, что эти узлы являются экстремумами полинома $T_{N+1}(2x-1)$.

Матрица X – это, как и в общем случае, транспонированная матрица Якоби, ассоциированная с системой полиномов (17). А для матрицы D существует аналог тождества Якоби, из которого она легко находится:

$$\langle p_0(x), \dots, p_{N-1}(x) \rangle D = \langle p'_0(x), \dots, p'_{N-1}(x) \rangle.$$

Напомним, что операторы X и D действуют в пространстве коэффициентов Фурье, \mathcal{A}_N (см. [3]).

Дадим готовые формулы для X и D , которые легко проверяемы. Для размерности $N = 6$ эти матрицы имеют вид

$$X = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 4 & 0 & 4 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Векторы-строки начальных и краевых значений (см. [3]) здесь имеют вид

$$\begin{aligned} i_0 &= \langle 1, -2, 3, -4, \dots \rangle, & b_0 &= \langle 1, 2, 3, 4, \dots \rangle, \\ i_1 &= \langle 0, 4, -16, 40, -80, \dots \rangle, & b_1 &= \langle 0, 4, 16, 40, 80, \dots \rangle, \dots \end{aligned} \quad (19)$$

причем этот список может быть легко продолжен (с использованием CAS).

Этот спектральный метод идентичен в применении методу, описанному в [3]. В частности, он также дает иногда рациональные коэффициенты разложений точно, если они рациональны (см. [12]). Например, решая краевую

задачу $x y'(x) = 1$, $y(1) = 0$ спектральным методом в [3] и этим, получаем разложения для $x \in (0, 1]$:

$$\ln x = -2 \ln 2 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^n T_n(2x-1)}{n} = \frac{1}{2} - 2 \ln 2 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^n U_n(2x-1)}{n(n+2)},$$

причем скорость сходимости этих рядов примерно одинаковая, так как $U_n(1) = n + 1$.

Матрицы преобразований Фурье здесь (как и для всех полиномов Чебышева) известны в явном виде:

$$F^{-1} = \left[\sin \left(\frac{m n \pi}{N+1} \right) \left(\sin \left(\frac{m \pi}{N+1} \right) \right)^{-1} \right], \quad F = \frac{2}{N+1} \left[\sin \left(\frac{m n \pi}{N+1} \right) \sin \left(\frac{n \pi}{N+1} \right) \right],$$

где m и n нумеруют строки и столбцы соответственно.

Таким образом, осталось вычислить вектор-строку v_a (см. (14)). Имеем

$$v_a = \left\langle 1, 0, \frac{1}{3}, 0, \frac{1}{5}, 0, \frac{1}{7}, 0, \dots \right\rangle,$$

где закономерность очевидна. Поэтому веса w_n (после некоторых упрощений) вычисляются по формуле

$$w_n = \frac{2}{N+1} \left(\sin \left(\frac{n \pi}{N+1} \right) \sum_{k=1}^{[N/2]+1} \frac{1}{2k-1} \sin \left(\frac{n(2k-1)\pi}{N+1} \right) \right), \quad n \leq [N/2],$$

а также $w_{N+1-n} = w_n$, $n > [N/2]$. Для нечетного N нужна еще формула

$$w_{[N/2]+1} = \frac{1}{[N/2]+1} \sum_{k=1}^{[N/2]+1} \frac{(-1)^{k+1}}{2k-1}.$$

Замечания, которые мы сделали по поводу квадратуры F-1, целиком относятся и к квадратуре F-2.

Таким образом, знание преобразований Фурье F для квадратур Фежера F-1 и F-2 в явном виде позволяет вычислить их веса (см. разд. 3), не вычисляя самих матриц. Но для применения спектральных методов все четыре матрицы, X , D , F^{-1} и F , нужны (см. примеры в [3]).

Перейдем к изложению спектрального метода, соответствующего квадратуре Кленшо–Куртиса (СС). Эта квадратура является своеобразным гибридом двух предыдущих, но часто удобнее в использовании и (иногда) дает несколько лучшие результаты.

Здесь используется система полиномов (см. [11])

$$\{p_0(x) = \frac{1}{2}, p_n(x) = T_n(2x - 1), 1 \leq n \leq N - 2; p_{N-1}(x) = \frac{1}{2}T_{N-1}(2x - 1)\}, \quad (20)$$

т.е. функция $y(x)$, $x \in [0, 1]$ представлена линейной комбинацией этих полиномов для размерности аппроксимации N .

Это разложение отличается от полиномов квадратуры F-1 только дополнительным коэффициентом $1/2$ у последнего полинома в разложении. Поэтому матрица X для этого спектрального метода отличается от таковой в [3] только элементом $X[N, N - 1]$ ($1/4 \rightarrow 1/2$), а матрица D – только последним столбцом (деленным на 2). Для удобства читателя дадим эти матрицы для размерности $N = 6$:

$$X = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 4 & 0 & 12 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Здесь, как и в спектральном методе [3], соответствующем квадратуре F-1, единичный вектор имеет вид

$$e = \langle 2, 0, \dots \rangle.$$

Векторы-строки начальных и краевых значений

$$i_m = \langle p_{n-1}^{(m)}(0) \rangle, \quad b_m = \langle p_{n-1}^{(m)}(1) \rangle, \quad 0 \leq m, n = 1, \dots, N, \quad (21)$$

здесь отличаются только в последнем элементе от таковых в [3].

Хотя любой спектральный метод для голономных дифференциальных операторов целиком определяется выбором базисных функций, для общих линейных дифференциальных операторов требуется еще задание набора узлов. Формально такой выбор достаточно произволен, однако практически единственным удобным выбором является спектр матрицы Якоби (или матрицы X).

Система полиномов (20) не является ортогональной, так как полиномы меняются при изменении N , тем не менее тождество Якоби (10) здесь по-прежнему в силе. Только полином $p_N(x)$ в нем заменяется на полином $v_N(x) = x(1-x)U_{N-2}(x)$, и $g = -1$.

Иными словами спектр матрицы X размерности $N > 2$ – это корни полинома $v_N(x)$:

$$x_n = \cos^2\left(\frac{\pi(n-1)}{2(N-1)}\right), \quad n = 1, \dots, N, \quad (22)$$

т.е. концы интервала $[0, 1]$ всегда принадлежат спектру, что может быть удобно в приложениях.

Еще одно преимущество полиномов (20) – это самый простой вид преобразований Фурье:

$$F^{-1} = \left[\varkappa(n) \cos \left(\frac{(m-1)(n-1)\pi}{N-1} \right) \right], \quad F = \frac{2}{N-1} F^{-1},$$

где m и n нумеруют строки и столбцы соответственно, и

$$\varkappa(n) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & n = 1, N \\ 1, & 1 < n < N. \end{cases}$$

То есть здесь преобразования Фурье почти инволютивны.

Вместо того чтобы выписывать веса, дадим готовую Maple-процедуру и необходимые пояснения:

```
CCint:=proc(f,a,b,n) global x_4,w_4,ini_4: local y,p,j,m:
  if ini_4=n then goto (M) fi:
  ini_4:=n:
  w_4:=Vector[row](n):
  x_4:=Vector(n):
  m:=floor(n/2):
  p:=evalf[Digits+4](2*Pi/(n-1)):
  for j from 1 to m do
    x_4[j]:=cos((j-1)*p/2):
    x_4[n+1-j]:=-x_4[j]
  od:
  if type(n,odd) then x_4[m+1]:=0 fi:
  w_4[1]:=1/2/(n-1)-add(1/(2*k-1)/(2*k-3),k=2..m)/(n-1)
    -'if'(type(n,odd),1/2,0)/(n-2)/n/(n-1):
  w_4[n]:=w_4[1]:
  for j from 2 to m do
    w_4[j]:=1-2*add(cos((j-1)*k*p)/(4*k^2-1),k=1..m-1)
      +'if'(type(n,odd),1,0)*(-1)^j/(n-2)/n/(n-1):
    w_4[n+1-j]:=w_4[j]
  od:
  if type(n,odd) then w_4[m+1]:=1-2*add((-1)^k/(4*k^2-1),k=1..m-1)
    -(-1)^m/(4*m^2-1))/(2*m) fi:
  M: y:=Vector(n,j->evalf(f((b-a)*(x_4[j]+1)/2+a))):
    evalf(b-a)*w_4.y
end: ini_4:=0:
```

Для использования процедуры нужно задать функцию $f(x)$, интервал $[a, b] \in \mathbb{C}$ и число узлов $n > 3$.

Здесь дана минимальная реализация без контроля точности. Точность можно оценить либо традиционным способом, т.е. меняя число узлов, либо с помощью преобразования Фурье, как это описано выше.

Заметим, что процедура вычисляет узлы (здесь на интервале $[-1, 1]$ для простоты) и веса только один раз для каждого N . То есть последующие обращения к процедуре используют уже вычисленные величины до следующего изменения N . Для этого мы использовали незадокументированный в Maple оператор «goto».

Формулы, данные в этом разделе, позволяют легко модифицировать эту процедуру для квадратур Фежера F-1 и F-2.

Приведем пример использования этих квадратур, а также их сравнение с квадратурой LG.

Существует несколько работ (см., например, [13] и ссылки там), которые продвигают тезис о том, что квадратуры F-1, F-2 и CC почти не уступают квадратуре LG. Однако, по нашему мнению, эти выводы основаны на «нецелевом» использовании этих квадратур для интегрирования функций с особенностями внутри или по краям интервала. Для таких функций квадратуры F-1, F-2 и CC часто дают даже лучшие результаты.

В некоторых примерах, когда особенности функции в комплексной области близки к вещественному интервалу, эти квадратуры действительно дают близкие результаты (как для функции $f(x) = 1/(1 + 16x^2)$ в [13]). Вероятно, это связано с феноменом Рунге (см. [14]).

В задачах высокоточного вычисления интегралов от аналитических функций на интервале квадратура LG для каждого N (по нашим оценкам) дает почти вдвое больше значащих цифр в большинстве случаев.

Рассмотрим известный пример (см. [15]):

$$R = \int_0^1 \frac{\arctan(\sqrt{x^2 + 2})}{(x^2 + 1)\sqrt{x^2 + 2}} dx = \frac{5\pi^2}{96} \approx 0.51404,$$

и вычислим этот интеграл квадратурами F-1, F-2, CC и LG.

Для $N = 10$ в обычной плавающей арифметике (≈ 15 десятичных разрядов) получаем погрешности, соответственно,

$$\begin{aligned} R - R(\text{F-1}) &\approx -0.3629 \times 10^{-9}, & R - R(\text{F-2}) &\approx 0.1161 \times 10^{-8}, \\ R - R(\text{CC}) &\approx 0.2716 \times 10^{-9}, & R - R(\text{LG}) &\approx -0.9 \times 10^{-13}. \end{aligned}$$

Заметим, что квадратура F-1 почти всегда дает точность немного лучше, чем F-2, и немного хуже, чем CC. Причем квадратуры F-1 и CC имеют (как правило) противоположный знак погрешности. Но это пока эмпирический результат.

Для $N = 20$ в QD-арифметике (≈ 63 десятичных разрядов) получаем погрешности, соответственно,

$$\begin{aligned} R - R(F-1) &\approx 0.1387 \times 10^{-15}, & R - R(F-2) &\approx -0.1391 \times 10^{-14}, \\ R - R(CC) &\approx -0.3082 \times 10^{-16}, & R - R(LG) &\approx 0.6800 \times 10^{-27}. \end{aligned}$$

Аналогичные результаты получены нами для примеров из статьи [1]. Так что квадратура LG действительно (обычно) намного лучше. Однако и «цена вопроса» для нее растет значительно быстрее, чем для квадратур в этом разделе. Поэтому квадратура CC (по нашему мнению) вполне заменяет LG для высокоточных вычислений.

В заключение этого раздела приведем (весьма известный) пример решения спектральной задачи для уравнения Штурма–Лиувилля. Рассмотрим спектральную задачу для уравнения Матье (Mathieu)

$$y''(x) + (\lambda - 2q \cos(2x))y(x) = 0, \quad y'(0) = y'(\pi) = 0,$$

т.е. найдем значения λ и функции $y(x, \lambda)$ для $q = 5$.

Этот пример приводился в [16] как применение процедуры «brv4c» в системе MATLAB, а также в документации к известному пакету NAG (процедура D02KAF, см. [17]). Заметим, что в обоих случаях задача решается методом пристрелки для каждого значения λ и требует его оценочного приближения как параметра процедуры.

Согласно нашему спектральному методу (любому), масштабируем эту задачу на интервал $[0, 1]$, выберем размерность N и запишем дискретизацию дифференциального оператора:

$$A = -\frac{1}{\pi^2} D^2 + F \text{Diag}[2q \cos(2\pi x_1), \dots, 2q \cos(2\pi x_N)] F^{-1}.$$

Затем учитываем краевые условия, т.е. заменяем две последние строки матрицы A на векторы i_1 и b_1 (21). Для каждого спектрального метода, разумеется, свои i_1 и b_1 .

Получаем матрицу дифференциального оператора с учетом краевых условий. Далее решаем стандартную алгебраическую задачу на собственные значения (и векторы, если нужно):

$$A y = \lambda y.$$

Для $N = 30$ и для спектрального метода, соответствующего квадратуре CC, получаем (в Maple за доли секунды):

$$\lambda \in \{-5.80004602096689581, 1.85818754168553468, 7.44910973143327216, 11.5488320037169566, 17.0965818497927735, 25.5499723870701594, \dots\}$$

при расчетах в обычной плавающей арифметике.

Сравнение с точным решением этой спектральной задачи, которое в обозначениях Maple имеет вид

$$\text{MathieuCPrime}(\lambda, 5, \pi) = 0,$$

дает погрешности, соответственно

$$\{1.15 \times 10^{-10}, 1.38 \times 10^{-10}, 8.09 \times 10^{-9}, 3.26 \times 10^{-8}, 1.65 \times 10^{-7}, 6.37 \times 10^{-7}, \dots\}.$$

При увеличении N (и длины разрядной сетки) количество полученных собственных значений увеличивается, как и их точность.

Отметим, что спектральный метод в [3], соответствующий квадратуре F-1, дает немного лучшие результаты. И оба этих метода превосходят спектральный метод в [2], основанный на полиномах Лежандра.

5. СУММА ДЕЛИТЕЛЕЙ НАТУРАЛЬНОГО ЧИСЛА

Здесь мы приводим формулу для интеграла, дающего функцию Эйлера сумма делителей натурального числа, $\sigma(n)$.

Существование такой формулы анонсировалось в [4] как следствие полученных там результатов. Однако ранее (насколько нам известно) подобные формулы не публиковались. Имеем

$$\sigma(n) = \frac{i\pi}{12} \int_{\alpha}^{\beta} \left(\frac{\mathbf{K}(k)(k^2 - 2) + 3\mathbf{E}(k)}{k\mathbf{K}(k)(1 - k^2)} \right) \exp\left(\frac{2n\pi\mathbf{K}(k')}{\mathbf{K}(k)}\right) dk, \quad (23)$$

где \mathbf{K} и \mathbf{E} – это эллиптические интегралы первого и второго рода; k и $k' = \sqrt{1 - k^2}$ – это модуль и сопряженный модуль эллиптических функций; $\alpha = (\sqrt{3} - i)/2$, $\beta = \bar{\alpha} = (\sqrt{3} + i)/2$ – это концы интервала интегрирования, который является хордой единичной окружности.

Отметим, что подынтегральная функция в (23) является регулярной на замкнутом интервале $[\alpha, \beta]$. Путь интегрирования, разумеется, можно менять, но мы не будем этого делать.

Как отмечалось в [4], знание точной асимптотики этого интеграла при $n \rightarrow \infty$ эквивалентно верификации гипотезы Римана, поскольку скорость роста функции $\sigma(n)$ находится с ней в тесной связи. А именно, согласно [18] гипотеза Римана верна тогда и только тогда, когда

$$\sigma(n) < H_n + \log H_n \exp H_n, \quad 1 < n,$$

где H_n – это гармоническое число.

Однако здесь мы рассмотрим более прозаическую и практическую задачу вычисления интеграла (23) для различных n .

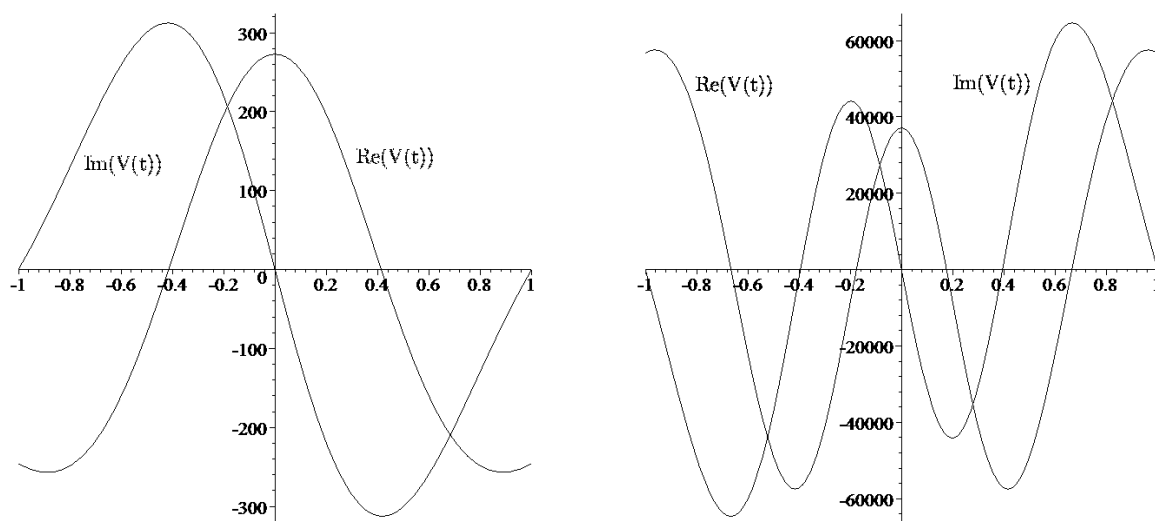
Первый же очевидный вопрос: не ошибся ли автор при выводе этой формулы?

Подставим в (23) $n = 1$ и применим Maple в обычной плавающей арифметике ($Digits = 14$). Однако Maple не может посчитать этот интеграл, видимо, переключившись на адаптивные методы интегрирования с измельчением сетки. Во всяком случае 1100 секунд счета оказалось недостаточно.

Если взять стандартную точность ($Digits = 10$), то для $n = 1$ и $n = 2$ получаем ответ за 1.5 секунды с этой точностью (на домашнем компьютере), но для $n = 3$ счет идет уже 150 сек., а далее Maple виснет.

Последнее обстоятельство легко объяснимо, если взглянуть на графики подынтегральной функции. Масштабируем отрезок $[\alpha, \beta] \rightarrow [-1, 1]$ и рассмотрим функцию $V(t)$, $t \in [-1, 1]$, которая получается подстановкой $k = (\sqrt{3} + it)/2$ в подынтегральную функцию.

На фиг. 1 показаны графики функций $\operatorname{Re}(V(t))$ и $\operatorname{Im}(V(t))$ для $n = 1$ (слева) и $n = 2$ (справа).



Фиг. 1. Функции $\operatorname{Re}(V(t))$ и $\operatorname{Im}(V(t))$ для $n = 1$ (слева) и $n = 2$ (справа)

Функция $\operatorname{Re}(V(t))$ всегда четная, а $\operatorname{Im}(V(t))$ – всегда нечетная для натуральных n . Кроме того, интеграл (23) должен быть натуральным числом, $\sigma(n)$. Поэтому мнимая и вещественная части интеграла (23) каждая отдельно дают оценку погрешности вычисления интеграла.

Интеграл (23) может служить тестовым примером для различных интеграторов.

Квадратура Кленшо–Куртиса (см. разд. 4) для размерности $N = 80$ в обычной плавающей арифметике для $n = \{1, 2, \dots, 6\}$ дает результат $\sigma(n) = \{1, 3, 4, 7, 6, 12\}$ с погрешностью вещественной части, соответственно,

$$\{0, 9.3 \times 10^{-11}, 8.5 \times 10^{-9}, 7.3 \times 10^{-6}, 4.5 \times 10^{-4}, 1.9 \times 10^{-2}\}.$$

Значения мнимой части интеграла (23) вычисляются с такой же погрешностью. При этом каждый интеграл вычисляется за время менее секунды.

Эти же расчеты, выполненные в QD-арифметике, дают пренебрежимо малую погрешность мнимой части интеграла (23), а для вещественной части получаем погрешности, соответственно,

$$\{1.4 \times 10^{-16}, 1.5 \times 10^{-15}, 1.0 \times 10^{-14}, 2.8 \times 10^{-14}, 2.6 \times 10^{-13}, 2.1 \times 10^{-12}\}.$$

При этом каждый интеграл вычисляется за время менее секунды.

Наконец, расчеты в QD-арифметике с применением LG квадратуры ($N = 80$) дают погрешности, соответственно,

$$\{8.2 \times 10^{-20}, 7.2 \times 10^{-19}, 4.9 \times 10^{-18}, 2.1 \times 10^{-17}, 2.2 \times 10^{-18}, 8.1 \times 10^{-16}\}.$$

При этом инициализация процедуры занимает примерно 8 сек., а каждый интеграл вычисляется за время менее секунды.

Таким образом, LG квадратура все же заметно лучше, чем квадратура Кленшо–Куртиса. Однако улучшение точности не столь драматично, как можно было бы ожидать. Поэтому, по нашему мнению, квадратура Кленшо–Куртиса, как и квадратуры Фежера, вполне заменяют квадратуру Гаусса для высокоточных расчетов.

Заметим также, что для $n = 0$ формула (23) дает $\sigma(0) = -1/24$, т.е. значение, предложенное Раманужаном. Это следствие того, что формула (23) выводится из модулярной формы (ряд Эйзенштейна):

$$E_2(x) = 1 - 24 \sum_{n=1}^{\infty} \sigma(n) x^n.$$

Для $n = -1, -2, \dots$ формула (23) дает нули.

Список литературы

- [1] *Bailey D.H. et. all.* A Comparison of Three High-Precision Quadrature Schemes // *Experimental Mathematics*, V. 14. № 3. p. 317-329 (2005).
- [2] *Варин В.П.* Аппроксимация дифференциальных операторов с учетом граничных условий // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* Т. 63. № 8. с. 1251-1271. (2023).
- [3] *Варин В.П.* Спектральные методы решения дифференциальных и функциональных уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* Т. 64. № 5. с. 713-728. (2024).

- [4] *Варин В.П.* Специальные решения уравнения Шази // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т. 57. № 2. с. 210-236. (2017).
- [5] *Krylov V.I.* Approximate calculation of integrals. (Macmillan. New-York, London. 1962).
- [6] *Wilf H.S.* Mathematics for the physical sciences. (Wiley. NewYork. 1962).
- [7] *Golub G.H., Welsch J.H.* Calculation of Gauss Quadrature Rules // Mathematics of Computation. V. 23. № 106. p. 221-230. (1969).
- [8] *Gantmacher F.R.* Application of the Theory of Matrices. (Chelsea Press. New-York. 1960).
- [9] *Bogaert I.* Iteration-Free Computation of Gauss-Legendre Quadrature Nodes and Weights // SIAM Journal on Scientific Computing. V. 36, p. A1008-A1026. (2014).
- [10] *Fejér L.* Mechanische Quadraturen mit positiven Cotesschen Zahlen // Math. Z. V. 37, p. 287-309. (1933).
- [11] *Clenshaw C.W., Curtis A.R.* A method for numerical integration on an automatic computer // Numerische Mathematik V. 2, p. 197-205. (1960).
- [12] *Варин В.П.* Рациональные коэффициенты ортогональных разложений некоторых функций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. (в печати) (2025).
- [13] *Trefethen L.N.* Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw-Curtis? // SIAM REVIEW. V. 50. № 1. p. 67-87. (2008).
- [14] *Варин В.П.* Спектральные методы полиномиальной интерполяции и аппроксимации // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т. 65. № 2. с. 221-232. (2025).
- [15] *Ahmed Z.* Definitely an Integral // Mathematical Monthly V. 109, № 7. p. 670-671. (2002).
- [16] *Shampine L.F. et. all.* Solving Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations in Matlab with bvp4c // (<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/3819-tutorial-on-solving-bvps-with-bvp4c>)
- [17] *Numerical Algorithms Group Inc.* NAG FORTRAN 77 Library Manual, Mark 17. (Oxford, UK, 1996).

- [18] Lagarias J.C. An elementary problem equivalent to the Riemann hypothesis
// Mathematical Monthly V. 109, № 6. p. 534-543. (2002).