Кубатурные и квадратурные формулы высокого порядка аппроксимации

Д. А. СИЛАЕВ
Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
e-mail: dasilaev@mail.ru

УДК 519.6+517.9

Ключевые слова: полулокальный сглаживающий сплайн, квадратурная формула, существование и единственность S-сплайнов, устойчивость и сходимость S-сплайнов.

Аннотация

Данная работа посвящена использованию полулокальных сглаживающих сплайнов или S-сплайнов для построения кубатурных формул. Такие сплайны являются кусочно-полиномиальной функцией, первые коэффициенты каждого полинома определяются условиями гладкой склейки, а остальные — методом наименьших квадратов. Ранее рассматривались и применялись сплайны 3-й и 5-й степени. Настоящая работа посвящена использованию S-сплайнов степени n $(n = 9, 10)$. Особый интерес для вычисления интегралов представляют S-сплайны класса C^0 (только непрерывные). С помощью таких сплайнов строятся квадратурные и кубатурные формулы высокого порядка аппроксимации для вычисления одно-, двух- и трёхмерных интегралов в односвязной области 10-го и 11-го порядков аппроксимации. Предполагается, что интегрируемая функция принадлежит классу $C^{(n+1)}$ $(n = 9, 10)$ в несколько большей области, чем исходная область, по которой ведётся интегрирование. Предполагается также, что граница области задана параметрически, что позволяет с высокой степенью точности учесть границу области. Получены соответствующие оценки сходимости. Подобный подход возможен и для построения формул интегрирования гладких функций в многомерных областях.

Abstract

D. A. Silaev, Cubature and quadrature formulas of high order of approximation, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 18 (2013), no. 5, pp. 187—207.

This paper is concerned with the use of semilocal smoothing splines (or S-splines) for constructing cubature formulas. Such a spline is a piecewise-polynomial function, the first coefficients of each of the polynomials are determined by the smooth joint conditions, and the remaining ones, by the least-squares method. Previous studies were concerned with splines of degree 3 and 5. In the present paper, we consider S-splines of degree n $(n = 9, 10)$. Of special importance for calculation of integrals are the S-splines of class C^0 (the continuous ones). Such splines are employed in building quadrature and cubature formulas of high order of approximation for calculation of one-, two-, and three-dimensional integrals in a simply connected domain to 10th and 11th orders of approximation. The integrable function is assumed to lie in the class $C^{(n+1)}$ $(n = 9, 10)$ in a somewhat larger domain than the original one (in which the integration takes place). It is also assumed that the boundary of the domain is given parametrically. This makes it possible to take into account, with high order of accuracy, the boundary of the domain.

Фундаментальная и прикладная математика, 2013, том 18, № 5, с. 187—207.

The corresponding convergence rates are estimates. A similar approach is also capable of building formulas for integration of smooth functions in multidimensional domains.

Введение

Теория кубатурных формул направлена на получение приближённых формул для вычисления интеграла, максимально точных при наименьшем числе узлов [1, 4, 5, 7]. Составные квадратурные формулы (формулу трапеций, формулу Симпсона и т. п.) можно интерпретировать как формулы, полученные с помощью приближения интегрируемой функции локальными сплайнами. Использование глобальных сплайнов приводит к квадратурным формулам [2, 16]. Функции многих переменных могут быть приближены суммой произведений функций одной переменной. Существенным недостатком использования глобальных сплайнов является отсутствие удобных алгоритмов их построения для случая высоких степеней (выше 5). Остаётся трудной аппроксимация интегрируемой функции в окрестности границы области [3, 6, 8].

В пространстве $\mathbb{R}^3$ рассматривается ограниченная область V с границей $\Gamma = \partial V$. Пусть граница задана параметрически:

$$\Gamma = \big\{\big(\tilde{x}(u,v), \tilde{y}(u,v), \tilde{z}(u,v)\big), \quad (u,v) \in \Omega \in \mathbb{R}^2\big\},$$

где $\tilde{x}$, $\tilde{y}$, $\tilde{z}$ — заданные функции параметров u, v. В области рассматривается гладкая функция $f \in C^n(V_\delta)$, т. е. f имеет ограниченные частные производные n-го порядка в области $V_\delta \supset V$ (для простоты можно считать, что V_δ — шар достаточно большого радиуса). В работе предлагается метод построения кубатурной формулы

$$\iiint\limits_V f(x,y,z)dx\,dy\,dz = \sum_{k=1}^{N} c_k f(P_k) + O(h^n)$$

n-го порядка аппроксимации, где c_k — веса, $P_k = (x_k, y_k, z_k)$ — узлы квадратурной формулы, h — максимальное расстояние между соседними узлами. Кубатурная формула определена для достаточно широкого класса областей с границей Γ. Основой её построения является аппроксимация в пространстве гладкой функции $f(x,y,z)$ полулокальным сглаживающим сплайном, или S-сплайном класса C^p, состоящим из полиномов степени $n-1$. Мы сталкиваемся с проблемами унификации вычисления большого числа интегралов по заданной области и учёта с большой степенью вида границы области V. Здесь мы эти проблемы решаем, сводя с помощью формулы Гаусса—Остроградского интеграл по области V к соответствующему интегралу по границе области $\Gamma = \partial V$. Подобный подход возможен и для построения формул интегрирования гладких функций в многомерных областях.

1. Одномерный S-сплайн класса C^p

Рассмотрим на отрезке $[a,b]$ равномерную сетку $\{x_k\}_{k=0}^{k=K}$, $x_k = a + kh$, $h = (b-a)/K$ — шаг сетки. Разобьём отрезок $[a,b]$ на группы, для этого введём на $[a,b]$ ещё одну равномерную сетку $\{\xi_l^m\}_{l=0}^{l=L}$, $\xi_l^m = a + lH$, $H = mh$, $m \in \mathbb{N}$. Здесь m фиксировано, индекс m в обозначении ξ_l^m в дальнейшем будем опускать. Таким образом, переходя из одной группы в другую, мы осуществляем сдвиг системы координат и рассматриваем каждый l-й полином на отрезке $[0,H]$. Пусть $y = (y_0, y_1, \dots, y_K) \in \mathbb{R}^{K+1}$ — значения приближаемой функции на этой сетке. Обозначим через

$$P_S^n = \left\{u\colon u(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_p x^p + \sum_{i=p+1}^{n} a_i x^i\right\}$$

множество полиномов степени n с фиксированными коэффициентами $a_0, a_1, \dots, a_p$. Рассмотрим функционал

$$\Phi^l(u) = \sum_{k=0}^{M} (u(\xi_l + kh) - y_{ml+k})^2.$$

В классе P_S^n ищется полином g_l, минимизирующий функционал

$$\Phi^l(u) = \sum_{k=0}^{M} (u(\xi_l + kh) - y_{ml+k})^2 \longrightarrow \min(a_{p+1}, \dots, a_n)$$

и удовлетворяющий следующим условиям:

$$a_0^l = g_{l-1}(H),\ a_1^l = g'_{l-1}(H), \dots,\ a_p^l = \frac{1}{p!} g_{l-1}^{(p)}(H) \quad \text{при} \quad l = 0, 1, \dots, L-1. \tag{1.1}$$

В случае периодического S-сплайна здесь при $l = 0$ выполнено $g_{-1}(H) = g_{L-1}(H)$. Так как

$$a_0^l = g_l(0),\ a_1^l = g'_l(0), \dots,\ a_m^l = \frac{1}{m!} g_l^{(m)}(0) \quad \text{при} \quad m = 0, 1, \dots, p,$$

то условия (1.1) — это условия гладкой склейки двух последовательных полиномов. В непериодическом случае коэффициенты $a_0^0, a_1^0, \dots, a_p^0$ задаются начальными условиями $y_0, y'_0, \dots, y_0^{(p)}/p!$ (если функция задана таблицей, то $y_0, y'_0, \dots, y_0^{(p)}$ можно вычислить с помощью формул численного дифференцирования высокого порядка аппроксимации, см. [9]). Можно предполагать, что значения заданной функции y_k известны с некоторой точностью, например, это результаты каких-либо измерений. Будем предполагать тогда, что с уменьшением шага h будет увеличиваться точность измерения, а именно будем предполагать, что если функция $f \in C^{(n+1))}[a,b]$ задана в узлах равномерной сетки $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, K$, своими значениями y_k, то $|y_k - f(x_k)| \leqslant Ch^{(n+1)}$. Здесь L — число групп, на которые разбита исходная таблица значений приближаемой функции, или число полиномов, составляющих сплайн. Кроме того, здесь $M+1$ — количество точек осреднения, $m+1$ — количество точек, входящих в область определения l-го полинома g_l, ξ_l — точка привязки полинома g_l, $M-m+1$ — число точек, значения которых участвуют в определении двух соседних полиномов, составляющих S-сплайн, $M \geqslant m+1$ [9, 10, 12—15].

Определение 1. S-сплайном назовём функцию $S_{m,M}(x)$, которая совпадает с полиномом $g_l(x)$ на каждом отрезке $\xi_l \leqslant x < \xi_{l+1}$.

Система линейных алгебраических уравнений, которой должны удовлетворять коэффициенты полиномов S-сплайна, состоит из уравнений двух видов:

а) уравнений склейки для каждой пары последовательных полиномов (1.1);

б) уравнений для определения коэффициентов при старших степенях полиномов по коэффициентам при младших степенях.

Сделаем замену переменных $\tilde{a}_i = a_i h^i$, $i=0,1,\ldots,n$. Введём обозначения

$$S_j = \sum_{k=0}^{M} k^j, \quad P_j^l = \sum_{k=0}^{M} y_{ml+k} k^{p+j}, \quad j=1,\ldots,n-p, \quad C_n^p = \frac{n!}{p!\,(n-p)!}. \tag{1.2}$$

Здесь $l=0,\ldots,L-1$ — номер полинома, причём если $l=0$, то в периодическом случае выражение $\tilde{a}_k^{l-1}$ означает $\tilde{a}_k^{L-1}$. В дальнейшем, если это не вызовет путаницы, мы будем опускать волну над переменными a_k^l. Запишем систему для определения коэффициентов полиномов в матричной форме. Для этого обозначим

$$A_0 = \begin{Vmatrix} S_{p+1} & \ldots & S_{2p+1} \\ \ldots & \ddots & \ldots \\ S_n & \ldots & S_{n+p} \end{Vmatrix}, \quad A_1 = \begin{Vmatrix} S_{2p+2} & \ldots & S_{n+p+1} \\ \ldots & \ddots & \ldots \\ S_{n+p+1} & \ldots & S_{2n} \end{Vmatrix},$$

$$B_0 = \begin{Vmatrix} 1 & m & m^2 \ldots & m^p \\ 0 & 1 & 2m \ldots & pm^{p-1} \\ \ldots & \ldots & \ddots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 \;\ldots & 1 \end{Vmatrix},$$

$$B_1 = \begin{Vmatrix} m^{p+1} & m^{p+2} & \ldots & m^n \\ (p+1)m^p & (p+2)m^{p+1} & \ldots & nm^{n-1} \\ \ldots & \ldots & \ddots & \ldots \\ C_{p+1}^p m & C_{p+2}^p m^2 & \ldots & C_n^p m^{n-p} \end{Vmatrix}.$$

Здесь прямоугольные матрицы A_0 и B_1 имеют размерности $(n-p)\times(p+1)$ и $(p+1)\times(n-p)$ соответственно, размерности квадратных матриц A_1 и B_0 — $(n-p)\times(n-p)$ и $(p+1)\times(p+1)$. Пусть, кроме того,

$$P^l = \begin{pmatrix} P_1^l \\ P_2^l \\ \vdots \\ P_{n-p}^l \end{pmatrix} \text{ и } X_0^l = \begin{pmatrix} a_0^l \\ a_1^l \\ \vdots \\ a_p^l \end{pmatrix}\Bigg), \quad X_1^l = \begin{pmatrix} a_{p+1}^l \\ a_{p+2}^l \\ \vdots \\ a_n^l \end{pmatrix}, \text{ где } l=0,1,\ldots,L-1. \tag{1.3}$$

Тогда уравнения склейки для каждой пары последовательных полиномов (1.1) примут вид

$$B_0 X_0^l + B_1 X_1^l = X_0^{l+1}, \tag{1.4}$$

а уравнения для определения коэффициентов при старших степенях полиномов по коэффициентам при младших степенях — вид

$$A_0 X_0^l + A_1 X_1^l = P^l. \tag{1.5}$$

2. Существование и единственность S-сплайна класса C^p

Предположим, что m и M таковы, что матрица A_1 имеет обратную. Тогда из (1.5) получаем, что

$$X_1^l = A_1^{-1} P^l - A X_0^l, \tag{2.1}$$

где $A = A_1^{-1} A_0$. Подставим выражение для X_l^1 в (1.4). Тогда получим рекуррентное соотношение, связывающее $p+1$ младших коэффициентов $(l+1)$-го полинома через $p+1$ младших коэффициентов l-го полинома:

$$X_0^{l+1} = U X_0^l + \Psi^l, \tag{2.2}$$

где $\Psi^l = B_1 A_1^{-1} P^l$, матрица устойчивости $U = B_0 - B_1 A_1^{-1} A_0$ имеет размерность $(p+1) \times (p+1)$.

Рассмотрим сначала непериодический случай. Зададим начальный вектор

$$X_0^0 = \left(y_0,\, h y_0', \ldots,\, \frac{1}{p!} h^p y_0^{(p)} \right)^{\mathrm{T}},$$

где значения производных, входящих в X_0^0, могут быть вычислены приближённо с высокой степенью точности с помощью формул численного дифференцирования. Пользуясь формулами (2.1), (2.2), последовательно находим $X_1^0, X_0^1, \ldots, X_1^{L-1}$. Тем самым все коэффициенты полиномов, составляющих сплайн, однозначно определены.

Теорема 1. *Пусть числа m, M, p, n таковы, что $\det A_1 \neq 0$. Тогда для любой функции $f(x)$, заданной на отрезке $[a, b]$ своими значениями y_k в точках $x_k = a + kh$, $h = (b-a)/K$, и начального вектора X_0^0 существует единственный непериодический сплайн $S_{m,M}^n[y](x)$ класса C^p.*

В периодическом случае, применяя рекуррентную формулу (2.2) $L-1$ раз, получаем

$$\begin{aligned} X_0^0 = X_0^L = U X_0^{L-1} + \Psi^{L-1} &= \\ = U(U X_0^{L-2} + \Psi^{L-2}) + \Psi^{L-1} &= \ldots = U^L X_0^0 + \sum_{s=1}^{L} U^{L-s} \Psi^{s-1}, \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$X_0^0 = (E - U^L)^{-1} \sum_{s=1}^{L} U^{L-s} \Psi^{s-1}.$$

Затем последовательно находим $X_1^0, X_0^1, \ldots, X_1^{L-1}$. Тем самым все коэффициенты полиномов, составляющих периодический сплайн, однозначно определены.

Теорема 2. *Пусть числа m, M, p, n таковы, что $\det A_1 \neq 0$ и собственные числа матрицы U не равны корню степени L из единицы (здесь L — число полиномов, составляющих сплайн). Тогда для любой функции $f(x)$, заданной на отрезке $[a,b]$ своими значениями y_k в точках $x_k = a + kh$, $h = (b-a)/K$, существует единственный периодический сплайн $S^n_{m,M}[y](x)$ класса C^p.*

3. Устойчивость и сходимость S-сплайна класса C^p

Теорема 3. *Пусть $f(x)$ — периодическая функция, $f(x) \in C^{(n+1)}[a,b]$, и пусть выполнено условие*

$$|f(x_k) - y_k| \leqslant C_0 h^{n+1+\varepsilon}, \quad \varepsilon \geqslant 0. \tag{3.1}$$

Пусть, кроме того, числа m, M, p, n таковы, что $\det A_1 \neq 0$ и собственные значения матрицы U по модулю меньше единицы, т. е.

$$|\lambda_i| < 1, \quad i = 1, \ldots, p+1. \tag{3.2}$$

Тогда периодический сплайн $S^n_{m,M} \in C^p[a,b]$ с узлами на равномерной сетке имеет дефект $n-p$ и для $x \in [a,b]$ справедливы следующие оценки:

$$\left| f^{(r)}(x) - \frac{d^r}{dx^r} S^n_{m,M}(x) \right| \leqslant C_r h^{n+1-r} \quad \text{для} \quad r = 0, 1, \ldots, n; \tag{3.3}$$

$x \neq \xi_l$ при $r = p+1, \ldots, n$; в этом случае $\varphi^{(r)}(\xi_l) \equiv \varphi^{(r)}(\xi_l + 0)$.

Аналогичные утверждения справедливы и для непериодического случая (см. [9]).

Собственные числа матрицы U определяются из уравнения

$$\det(U - \lambda E) = 0. \tag{3.4}$$

Для случая малых значений M (при $3 \leqslant M \leqslant 20$) в результате расчёта были получены значения собственных чисел матрицы U. Как показано в случаях $n = 3$ и $n = 5$, для обеспечения условия устойчивости, т. е. выполнения неравенства (3.2), необходимо перекрывание. Это означает, что имеются элементы исходной таблицы значений функции, которые участвуют в определении коэффициентов не менее двух соседних полиномов, составляющих сплайн. Если перекрывание достаточно большое, то это в ряде случаев является и достаточным условием [10, 12, 15]. На практике наиболее употребительными являются сплайны, для построения которых используется небольшое число точек осреднения M. Некоторые наиболее интересные полученные значения m и M можно найти в таблице работы [9]. Показано, что в случае $p = 0$ и $n = M$, $1 \leqslant m \leqslant M - 1$ матрица U есть число, равное 0. В этих случаях $S-$сплайны обладают высокими аппроксимационными свойствами и удобны, например, для построения формул численного интегрирования (квадратурных, кубатурных).

4. Фундаментальный S-сплайн

Фундаментальный периодический S-сплайн $F_j(x)$ — это S-сплайн, построенный по данным $y = (y_0, y_1, \ldots, y_K) \in \mathbb{R}^{K+1}$ вида $\{y_i = \delta_{ij} \mid i, j = 0, 1, \ldots, K\}$, δ_{ij} — символ Кронекера. Легко убедиться, что линейная комбинация

$$S(x) = \sum_{j=0}^{K} y_j F_j(x)$$

является S-сплайном, приближающим данные $\{y_i \mid i = 0, 1, \ldots, K\}$.

Непериодические фундаментальные сплайны дополняются сплайнами с начальными условиями $y_0', y_0'', \ldots, y_0^{(p)}$, принимающими значения 0 или 1.

5. Трёхмерный полулокальный сглаживающий сплайн класса C^p

5.1. Построение S-сплайна на шаре

Будем рассматривать на шаре радиуса R следующие сферические сетки:

$$\begin{aligned}
&\{r_i = ih_1,\ i = 0, 1, \ldots, K_1\}, \quad \{R_{l_1} = l_1 H_1,\ l_1 = 0, \ldots, L_1\},\\
&\quad H_1 = m_1 h_1, \quad K_1 = m_1 L_1, \quad K_1 h_1 = R;\\
&\{\theta_j = jh_2,\ j = 0, 1, \ldots, K_2\}, \quad \{\Theta_{l_2} = l_2 H_2,\ l_2 = 0, \ldots, L_2\},\\
&\quad H_2 = m_2 h_2, \quad K_2 = m_2 L_2, \quad K_2 h_2 = \pi;\\
&\{\varphi_k = kh_3,\ k = 0, 1, \ldots, K_3\}, \quad \{\Phi_{l_3} = l_3 H_3,\ l_3 = 0, \ldots, L_3\},\\
&\quad H_3 = m_3 h_3, \quad K_3 = m_3 L_3, \quad K_3 h_3 = 2\pi.
\end{aligned}$$

Будем строить аппроксимацию функции $f(r, \theta, \varphi)$ на шаре при условии, что функция f имеет $n + 1$ производных по переменным r, θ и φ, т. е. $f \in C^{(n+1)}([0, R] \times [0, \pi] \times [0, 2\pi])$. Пусть

$$\{y_{ijk} = f(r_i, \theta_j, \varphi_k),\ i = 0, \ldots, K_1,\ j = 0, \ldots, K_2,\ k = 0, \ldots, K_3\} -$$

значения в узлах сетки, по которым будет проводиться аппроксимация. Для каждой пары $(j = 0, 1, \ldots, K_2;\ k = 0, 1, \ldots, K_3)$ построим непериодический S-сплайн $S_{jk}(r)$ на отрезке $[0, R]$ по начальным данным $\{y_{ijk},\ i = 0, 1, \ldots, K_1\}$.

Каждый из этих сплайнов аппроксимирует функцию $f(r,\theta,\varphi)$ на отрезке $[0,R]$, причём в силу теоремы о сходимости

$$\left|S_{jk}^{(p)}(r) - \frac{\partial^p f(r,\theta_j,\varphi_k)}{\partial r^p}\right| < Ch_1^{n+1-p}, \quad p=0,1,\ldots,n, \quad r\in[0,R].$$

Фиксируем произвольное $\tilde r\in[0,R]$. Рассмотрим набор

$$\{z_{jk} = S_{jk}(\tilde r),\ j=0,\ldots,K_2,\ k=0,\ldots,K_3\}.$$

По этой двумерной таблице строим двумерный непериодический по θ и периодический по φ $S_{\tilde r}$-сплайн (см. [3, 8]). При выполнении условий устойчивости $m_i < \zeta^* M_i$ собственные значения матрицы U по модулю будут меньше единицы. Тогда построенный для $\tilde r$ сплайн $S_{\tilde r}(\theta,\varphi)$ будет аппроксимировать функцию $f(\tilde r,\theta,\varphi)$ при $(\theta,\varphi)\in[0,\pi]\times[0,2\pi]$ с порядком $O(h^{n+1})$, $h=\max(h_i)$.

5.2. Сходимость S-сплайна

Обозначим $h=\max(h_i)$, $i=1,2,3$.

Теорема 4. *Пусть $m_i<\zeta^*M_i$ $(i=1,2,3)$ и $f\in C^{n+1}([0,R]\times[0,\pi]\times[0,2\pi])$. Тогда для S_r-сплайна справедливы оценки*

$$\left|\frac{\partial^p}{\partial r^{p_1}\partial\theta^{p_2}\partial\varphi^{p_3}}S(r,\theta,\varphi) - \frac{\partial^p}{\partial r^{p_1}\partial\theta^{p_2}\partial\varphi^{p_3}}f(r,\theta,\varphi)\right| < C_p h^{n+1-p}, \tag{5.1}$$

где $p=p_1+p_2+p_3$, $0\leqslant p\leqslant n$.

Здесь частная производная понимается в следующем смысле: сплайн $S_{jk}(r)$ как функция r, p_1 раз дифференцируем (в случае $p_1>2$ в точках склейки берётся односторонняя производная, например левая). По значениям

$$\frac{d^{p_1}S_{jk}(r)}{dr^{p_1}}$$

строится двумерный сплайн $S_{\tilde r}^{p_1}(\theta,\varphi)$, от которого аналогично предыдущему вычисляется производная

$$\frac{\partial^{p_2+p_3}}{\partial\theta^{p_2}\partial\varphi^{p_3}}$$

(подробнее см. [14]).

5.3. Получение S-сплайна на шаре как явной функции трёх переменных

Обозначим через $A_i(r)$, $B_j(\theta)$, $C_k(\varphi)$ непериодические по r, θ и периодические по φ фундаментальные сплайны,

$$S(r,\theta,\varphi) = \bigl\{S_{jk}(r) \mid \{z_{jk}=S_{jk}(r),\ j=0,\ldots,K_2,\ k=0,\ldots,K_3-1\}\bigr\} = S_{jk}(r).$$

В свою очередь,

$$S_{jk}(r) = \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} z_{jk} B_j(\theta) C_k(\varphi) = \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} B_j(\theta) C_k(\varphi) \sum_{i=0}^{K_1} y_{ijk} A_i(r) =$$
$$= \sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} A_i(r) B_j(\theta) C_k(\varphi) \quad (5.2)$$

(здесь ограничиваемся случаем $p = 0$; в общем случае добавляются слагаемые $y'_{0jk}A_{01}(r) + \ldots + y^p_{0jk}A_{0p}(r)$, где фундаментальный сплайн A_{0p} отвечает нулевому набору z_j и $z_j^{(p)} = 1$). Теперь рассмотрим укрупнённую сетку в шаре (R_i, Θ_j, Φ_k), где $R_i = iH_1$, $\Theta_j = jH_2$, $\Phi_k = kH_3$. Рассмотрим вид S-сплайна в некотором произвольном шаровом секторе этой сетки: $r = l_1H_1 + \tilde{r}$, $\theta = l_2H_2 + \tilde{\theta}$, $\varphi = l_3H_3 + \tilde{\varphi}$, где $0 \leqslant \tilde{r} < H_1$, $0 \leqslant \tilde{\theta} < H_2$ и $0 \leqslant \tilde{\varphi} < H_3$. В этом секторе фундаментальные S-сплайны согласно определению представляются в виде полиномов степени n:

$$A_i(r) = \sum_{p=0}^{n} a_{ip}\tilde{r}^p, \quad B_j(\theta) = \sum_{p=0}^{n} b_{jp}\tilde{\theta}^p, \quad C_k(\varphi) = \sum_{p=0}^{n} c_{kp}\tilde{\varphi}^p.$$

Подставляя эти выражения в формулу (5.2) для функции $S(r, \theta, \varphi)$ и меняя порядок суммирования, получаем

$$S(r,\theta,\varphi) = \sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} \sum_{p=0}^{n} a_{ip}^{l_1}\tilde{r}^p \sum_{q=0}^{n} b_{jq}^{l_2}\tilde{\theta}^q \sum_{s=0}^{n} c_{ks}^{l_3}\tilde{r}^s =$$
$$= \sum_{p=0}^{n} \sum_{q=0}^{n} \sum_{s=0}^{n} \tilde{r}^p\tilde{\theta}^q\tilde{\varphi}^s \left(\sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} a_{ip}^{l_1} b_{jq}^{l_2} c_{ks}^{l_3} \right) =$$
$$= \sum_{p=0}^{n} \sum_{q=0}^{5} \sum_{s=0}^{5} d_{pqs}^{l_1l_2l_3} \tilde{r}^p\tilde{\theta}^q\tilde{\varphi}^s, \quad (5.3)$$

где

$$d_{pqs}^{l_1l_2l_3} = \sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} a_{ip}^{l_1} b_{jq}^{l_2} c_{ks}^{l_3}.$$

Таким образом, показано, что на каждом произвольном шаровом секторе функция $S(r, \theta, \varphi)$ представляет собой полином n-й степени или сплайн-функцию трёх переменных. Заметим, что в выражения для коэффициентов $d_{pqs}^{l_1l_2l_3}$ входят значения всех y_{ijk}, содержащихся в шаре. Аналогичные выражения можно получить для всех многомерных областей, представляющих собой тензорные произведения одномерных, например для параллелепипеда и тора.

Представление сплайна на шаре в виде разложения по одномерным фундаментальным сплайнам (5.2) позволяет определить понятие смешанной производной для трёхмерного сплайна.

Определение 2. Под смешанной производной трёхмерного сплайна

$$\frac{\partial^{p+q+r}}{\partial r^p \partial \theta^q \partial \varphi^r} S(r, \theta, \varphi),$$

где $0 \leqslant p+q+r \leqslant n$, понимается конечная сумма

$$\sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} \frac{d^p}{dr^p} A_i(r) \frac{d^q}{d\theta^q} B_j(\theta) \frac{d^r}{d\varphi^r} C_k(\varphi),$$

состоящая из формальных производных от соответствующих фундаментальных сплайнов по r, θ и φ.

Эту формулу можно рассматривать как формулу численного дифференцирования, основанную на приближении трёхмерной функции полулокальным сглаживающим сплайном.

Всё сказанное верно и для сплайнов, если в них изменить порядок аппроксимации: например, сначала построить периодический сплайн по φ при фиксированных (r_i, θ_j), а затем по полученной двумерной таблице построить непериодический r-θ-сплайн.

5.4. Получение квадратурных формул для одномерных интегралов

Подставим выражение S-сплайна через фундаментальные сплайны в интеграл:

$$\int_A^B S(x)\,dx = \int_A^B \sum_{k=0}^{K} y_k C_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{K} y_k \int_A^B C_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{K} y_k c_k, \tag{5.4}$$

где

$$c_k = \int_A^B C_k(x)\,dx = \sum_{m=0}^{L-1} \sum_{i=0}^{n} \frac{a_i^{mk}}{i+1} H^{i+1} \,-$$

искомые коэффициенты квадратуры. Здесь $a_i^{m,k}$ — i-й коэффициент m-го полинома в k-м базисном сплайне (т. е. в сплайне, построенном по набору начальных данных $\{y_k = \delta_{ik},\ k = 0, 1, \ldots, K\}$, где δ_{ik} — символ Кронекера). Заметим, что в непериодическом случае указанные фундаментальные сплайны дополняются сплайнами с начальными условиями $y'_0, \ldots, y_0^{(p)}$, принимающими значения 0 или 1. Эти формулы имеют $(n+1)$-й порядок аппроксимации.

5.5. Получение квадратурных формул для двумерных интегралов на круге K

Подставим в интеграл по единичному кругу K выражение для S-сплайна:

$$\iint\limits_K S(\varphi, r)\, d\Omega = \int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^1 S(\varphi, r) r\, dr\, d\varphi =$$
$$= \sum_{i=0}^{K_1-1}\sum_{j=0}^{K_2} y_{ij}\int\limits_0^{2\pi} C_i(\varphi)\, d\varphi \int\limits_0^1 D_j(r) r\, dr = \sum_{i=0}^{K_1-1}\sum_{j=0}^{K_2} c_i d_j y_{ij}, \quad (5.5)$$

где

$$c_i = \int\limits_0^{2\pi} C_i(\varphi)\, d\varphi = \sum_{m=0}^{L_1-1}\sum_{p=0}^{n} a_p^{im}\frac{H_1^{p+1}}{p+1},$$

$$d_j = \int\limits_0^1 D_j(r) r\, dr = \sum_{s=0}^{L_2-1}\int\limits_{\xi_s}^{\xi_{s+1}} rD_j(r)\, dr = \sum_{s=0}^{L_2-1}\int\limits_0^{H_2}(u+\xi_s)\sum_{q=0}^{n} b_q^{js}u^q\, du$$
$$= \sum_{s=0}^{L_2-1}\int\limits_0^{H_2}\sum_{q=0}^{n} b_q^{js}(u^{q+1} + sH_2u^q)\, du = \sum_{s=0}^{L_2-1}\sum_{q=0}^{n} b_q^{js}H_2^{q+2}\left(\frac{1}{q+2} + \frac{s}{q+1}\right).$$

Здесь a_p^{im} и b_q^{js} — p-й и q-й коэффициенты m-го и s-го полиномов в i-м фундаментальном периодическом сплайне на окружности $[0, 2\pi]$ и j-м непериодическом сплайне на отрезке $[0, 1]$; $H_1 = 2\pi/L_1$, фундаментальный периодический сплайн $C_i(\varphi)$ строится по набору данных $\{y_k = \delta_{ik},\ k = 0, 1, \ldots, K_1\}$; $H_2 = 1/L_2$, непериодический фундаментальный сплайн $D_j(r)$ строится по набору данных $\left\{y_k = \delta_{jk},\ k = 0, 1, \ldots, K_2;\ y_0', \ldots, y_0^{(p)}\right\}$, где $y_0', \ldots, y_0^{(p)}$ принимают либо значение 0, либо значение 1.

5.6. Кубатурные формулы для трёхмерных интегралов на шаре

Подставим в интеграл по шару B радиуса R выражение для S-сплайна:

$$\iiint\limits_B S(r, \theta, \varphi)\, dV = \int\limits_0^R\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} S(r, \theta, \varphi) r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi =$$

$$= \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk} A_i(r) B_j(\theta) C_k(\varphi) r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi =$$
$$= \sum_{i=0}^{K_1} \sum_{j=0}^{K_2} \sum_{k=0}^{K_3-1} a_i b_j c_k y_{ijk},$$

где

$$\begin{aligned}
a_i &= \int_0^R A_i(r) r^2 \, dr = \sum_{l=0}^{L_1-1} \int_0^{H_1} (u+\xi_l)^2 \sum_{p=0}^{n} a_p^{il} u^p \, du \\
&= \sum_{l=0}^{L_1-1} \int_0^{H_1} \sum_{p=0}^{n} a_p^{il} (u^{p+2} + 2lH_1 u^{p+1} + l^2 H_1^2 u^p) \, du \\
&= \sum_{l=0}^{L_1-1} \sum_{p=0}^{n} a_p^{il} H_1^{p+3} \left(\frac{1}{p+3} + \frac{2l}{p+2} + \frac{l^2}{p+1} \right), \\
b_j &= \int_0^\pi B_j(\theta) \sin\theta \, d\theta = \sum_{s=0}^{L_2-1} \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} \int_0^{H_2} u^q \sin(u+\xi_s) \, du \\
&= \sum_{s=0}^{L_2-1} \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} \Big(\cos(sH_2) \int_0^{H_2} u^q \sin u \, du + \sin(sH_2) \int_0^{H_2} u^q \cos u \, du \Big), \\
c_k &= \int_0^{2\pi} C_k(\varphi) \, d\varphi = \sum_{t=0}^{L_3-1} \sum_{p=0}^{n} c_p^{kt} \frac{H_3^{p+1}}{p+1}.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Интегралы

$$J(q, \sin u, H) = \int_0^{H_2} u^q \sin u \, du, \quad J(q, \cos u, H) = \int_0^{H_2} u^q \cos u \, du$$

вычисляются по рекуррентным формулам:

$$J(q, \sin u, H) = -H^q \cos H + qJ(q-1, \cos u, H), \quad J(0, \sin u, H) = 1 - \cos H,$$
$$J(q, \cos u, H) = H^q \sin H - qJ(q, \sin u, H), \quad J(0, \cos u, H) = \sin H.$$

Здесь a_p^{il}, b_q^{js} и c_r^{kt} — p-й, q-й и r-й коэффициенты l-го, s-го и t-го полиномов в i-м, j-м и k-м фундаментальном непериодическом сплайне на отрезке $[0, R]$, фундаментальном непериодическом сплайне на отрезке $[0, \pi]$ и фундаментальном периодическом сплайне на окружности $[0, 2\pi]$. Здесь $H_1 = 1/L_1$, непериодический фундаментальный сплайн $A_i(r)$ строится по набору данных

$$\{ y_k = \delta_{jk}, \ k = 0, 1, \ldots, K_2; \ y_0', \ldots, y_0^{(p)} \},$$

где $y_0', \ldots, y_0^{(p)}$ принимают либо значение 0, либо значение 1. Аналогично $H_2 = \pi/L_2$, непериодический фундаментальный сплайн $B_j(\theta)$ строится по набору данных

$$\big\{y_k = \delta_{jk},\ k = 0, 1, \ldots, K_2;\ y_0', \ldots, y_0^{(p)}\big\},$$

где $y_0', \ldots, y_0^{(p)}$ принимают либо значение 0, либо значение 1. Наконец, фундаментальный периодический сплайн $C_i(\varphi)$ строится по набору данных

$$\{y_k = \delta_{ik},\ k = 0, 1, \ldots, K_1\},$$

$H_3 = 2\pi/L_3$.

5.7. Квадратурные формулы для двумерных односвязных областей

На плоскости рассматривается ограниченная область Ω с границей $\gamma = \partial\Omega$ — замкнутой самонепересекающейся кусочно-гладкой кривой. Предполагается, что граница задана параметрически: $\{\gamma = \{\tilde{x}(t), \tilde{y}(t)\} \mid t \in [\alpha, \beta]\}$, где $\tilde{x}, \tilde{y} \in C^{1+\varepsilon}$ — заданные периодические функции, т. е. $\tilde{x}(\alpha) = \tilde{x}(\beta)$, $\tilde{y}(\alpha) = \tilde{y}(\beta)$, первые производные функций $\tilde{x}$, $\tilde{y}$ удовлетворяют условию Гёльдера с порядком $\varepsilon \geqslant 0$ (быть может, за исключением отдельных точек). Будем предполагать также, что функция f определена и $(n+1)$ раз непрерывно дифференцируема в несколько большей области Ω_δ. Для простоты будем считать, что область Ω_δ есть круг K радиуса R.

Построение аппроксимирующей сетки будем производить следующим образом. Поместим область Ω в круг K радиуса R и введём полярную систему координат, связанную с центром круга. Будем рассматривать в круге радиуса R полярные сетки:

$$\begin{gathered}\{\varphi_i = ih_1 \mid i = 0, 1, \ldots, K_1\}, \quad \{\Phi_k = kH_1,\ k = 0, 1, \ldots, L_1\},\\ \{r_j = jh_2 \mid j = 0, 1, \ldots, K_2\}, \quad \{R_l = lH_2,\ l = 0, 1, \ldots, L_2\},\\ H_1 = m_1h_1, \quad K_1 = m_1L_1, \quad K_1h_1 = 2\pi, \quad H_2 = m_2h_2, \quad K_2 = m_2L_2, \quad K_2h_2 = R.\end{gathered} \tag{5.7}$$

Пусть $u_{ij} = f(\varphi_i, r_j)$ — сужение функции f на равномерную сетку (5.7). По таблице значений u_{ij} строим полулокальный сглаживающий сплайн $S(\varphi, r)$, состоящий из полиномов n-й степени, например, $r - \varphi$-сплайн, определённый на всем круге K. Из оценки подобной (5.1) следует, что S аппроксимирует функцию f с порядком $O\big(h^{(n+1)}\big)$, где $h = \max(h_1, h_2)$ в области Ω_δ. Подставим в интеграл по области Ω выражение для $r - \varphi$-сплайна в виде

$$\iint\limits_{\Omega} S(\varphi, r)\, d\Omega = \iint\limits_{\Omega} S(\varphi, r) r\, dr\, d\varphi = \sum_{i=0}^{K_1-1} \sum_{j=0}^{K_2} c^{ij} y_{ij}, \tag{5.8}$$

где

$$c^{ij} = \iint\limits_{\Omega} C_i(\varphi) D_j(r) r\, dr\, d\varphi. \tag{5.9}$$

Заметим, что выражение в (5.9), стоящее под знаком интеграла, есть произведение функций, каждая из которых зависит лишь от одной переменной, что весьма существенно. Применять формулы типа (5.5) становится неудобно, так как граница γ будет проходить внутри части секторов. Произведём универсализацию вычисления интегралов в (5.9). Для их вычисления применим формулу Грина—Стокса:

$$\oint\limits_{\gamma} (\vec{a}, \vec{\tau})\, ds = \iint\limits_{\Omega} (\operatorname{rot} \vec{a}, \vec{k}\,)\, d\Omega,$$

где $\vec{a} = \{P, Q, 0\}$, $P = P(x, y)$, $Q = Q(x, y)$, $\vec{\tau}$ — единичный вектор касательной к кривой γ, ограничивающей область Ω, $\vec{k}$ — единичный вектор, перпендикулярный плоскости области Ω. Линейная форма имеет вид

$$(\vec{a}, \vec{\tau})\, ds = P\, dx + Q\, dy = P_r\, dr + rQ_\varphi\, d\varphi,$$

где $P_r = P\cos\varphi + Q\sin\varphi$, $Q_\varphi = -P\sin\varphi + Q\cos\varphi$. Запишем выражение для ротора в полярной системе координат:

$$\operatorname{rot} \vec{a} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rQ_\varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial P_r}{\partial \varphi} \right) \vec{k}.$$

Тогда

$$c^{ij} = \iint\limits_{\Omega} C_i(\varphi) D_j(r) r\, dr\, d\varphi = \\ = \iint\limits_{\Omega} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rQ_\varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial P_r}{\partial \varphi} \right) r\, dr\, d\varphi = \oint\limits_{\gamma} P_r\, dr + rQ_\varphi\, d\varphi.$$

Отсюда получаем, что

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rQ_\varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial P_r}{\partial \varphi} \right) = C_i(\varphi) D_j(r). \tag{5.10}$$

Этому уравнению удовлетворяют

$$P_r = 0, \quad Q_\varphi = \frac{1}{r} C_i(\varphi) \int\limits_0^r D_j(t) t\, dt.$$

Иными словами, в качестве функции $rQ_\varphi(\varphi, r)$ возьмём первообразную от функции $rD_j(r)$ (по r), умноженную на $C_i(\varphi)$. Заметим, что эта первообразная есть сплайн, состоящий из полиномов $(n+2)$-й степени. Константу интегрирования в первообразной выберем так, чтобы выполнялось равенство $Q_\varphi(\varphi, 0) = 0$. Тогда

$$c^{ij} = \oint\limits_{\gamma} C_i(\varphi) \left(\int\limits_0^r D_j(t) t\, dt \right) d\varphi \tag{5.11}$$

Обратим внимание на то, что непериодический фундаментальный сплайн $D_j(r)$ равен 0 при $r < r_j$, если точка с координатами (φ_i, r_j) не принадлежит некоторой области $\Omega_\delta \supset \Omega$. Поэтому $Q_\varphi(\varphi, r) = 0$ при $r < r_j$. Итак, показано, что все коэффициенты c^{ij} равны нулю для таких пар (i,j), при которых точки с координатами (φ_i, r_j) не принадлежат Ω_δ, где $\delta = \delta(M,m,h)$.

5.8. Частный случай «простой» области

Область назовём «простой», если внутри неё найдётся такая точка, что любой луч, выпущенный из этой точки, пересечёт границу области только в одной точке. Поместим начало координат в эту точку и введём полярную систему координат. Тогда граница γ области Ω задаётся функцией $r = r(\varphi)$, $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Зафиксируем некоторое φ. Заметим, что $D_j(r) \equiv 0$ при $r \leqslant r_j - M_2 h_2$, где M_2 — количество точек осреднения, используемых при построении $D_j(r)$. Пусть $\xi_{l_1} \leqslant r_j - M_2 h_2$. Тогда $D_j(r) \equiv 0$ при $r \leqslant \xi_{l_1}$. Пусть $r(\varphi) \in [\xi_{l_2}, \xi_{l_2+1})$ (заметим, что $l_2 = l_2(\varphi)$ зависит от угла φ и границы области Ω). Имеем

$$\int\limits_0^{r(\varphi)} tD_j(t)\,dt = \sum_{s=l_1}^{l_2-1} \int\limits_{\xi_s}^{\xi_{s+1}} tD_j(t)\,dt + \int\limits_{\xi_{l_2}}^{r(\varphi)} tD_j(t)\,dt =$$

$$= \sum_{s=l_1}^{l_2-1} \int\limits_0^{H_2} (u+\xi_s) \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} u^q\,du + \int\limits_0^{r(\varphi)-\xi_{l_2}} (u+\xi_{l_2}) \sum_{q=0}^{n} b_q^{jl_2} u^q\,du =$$

$$= \sum_{s=l_1}^{l_2-1} \int\limits_0^{H_2} \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} (u^{q+1} + sH_2 u^q)\,du + \int\limits_0^{r(\varphi)-\xi_{l_2}} \sum_{q=0}^{n} b_q^{jl_2} (u^{q+1} + l_2 H_2 u^q)\,du =$$

$$= \sum_{s=l_1}^{l_2-1} \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} H_2^{q+2} \left(\frac{1}{q+2} + \frac{s}{q+1}\right) +$$

$$+ \sum_{q=0}^{n} b_q^{jl_2} \left(\frac{(r(\varphi) - l_2 H_2)^{q+2}}{q+2} + l_2 H_2 \frac{(r(\varphi) - l_2 H_2)^{q+1}}{q+1}\right).$$

Поэтому

$$c^{ij} = \oint\limits_\gamma \sum_{s=l_1}^{l_2(\varphi)-1} \sum_{q=0}^{n} b_q^{js} H_2^{q+2} \left(\frac{1}{q+2} + \frac{s}{q+1}\right) C_i(\varphi)\,d\varphi$$

$$+ \oint\limits_\gamma \sum_{q=0}^{n} b_q^{jl_2(\varphi)} \left(\frac{(r(\varphi) - l_2(\varphi) H_2)^{q+2}}{q+2} + l_2(\varphi) H_2 \frac{(r(\varphi) - l_2(\varphi) H_2)^{q+1}}{q+1}\right) C_i(\varphi)\,d\varphi, \tag{5.12}$$

где

$$C_i(\varphi) = \sum_{m=0}^{L_1-1} \sum_{p=0}^{n} a_p^{im} \varphi^p.$$

Здесь a_p^{im} и b_q^{js} — p-й и q-й коэффициенты m-го и s-го полиномов в i-м фундаментальном периодическом сплайне на окружности $[0, 2\pi]$ и в j-м фундаментальном непериодическом сплайне на отрезке $[0, R]$. Шаг H_1 равен $2\pi/L_1$. Фундаментальный периодический сплайн $C_i(\varphi)$ строится по набору данных $\{y_k = \delta_{ik} \mid k = 0, 1, \ldots, K_1\}$. Шаг H_2 равен $1/L_2$, фундаментальный непериодический сплайн $D_j(r)$ строится по набору данных $\{y_k = \delta_{jk} \mid k = 0, 1, \ldots, K_2;\ y_0', \ldots, y_0^{(p)}\}$, где $y_0', \ldots, y_0^{(p)}$ принимают либо значение 0, либо значение 1.

5.9. Оценка точности квадратурной формулы для двумерных односвязных областей

Обозначим $h = \max(h_1, h_2)$. Пусть выполнены условия устойчивости матрицы U, например, $m_1/M_1 < \zeta_*$, $m_2/M_2 < \zeta_*$, и пусть $f \in C^{(n+1)}(\Omega_\delta)$, где $\Omega_\delta \supset \Omega$, т. е. мы предполагаем, что функция f определена и $n+1$ раз непрерывно дифференцируема в несколько большей области $\Omega_\delta \supset \Omega$. Поместим область Ω_δ в круг K радиуса R. Введём полярную систему координат, взяв за начало координат центр круга R. Продолжим функцию f в $K \setminus \Omega_\delta$ тождественным нулём. Обозначим через $S(\varphi, r)$ $r - \varphi$-сплайн, приближающий таким образом продолженную функцию f на круге K.

Теорема 5. *Пусть $S(\varphi, r)$ — это $(r - \varphi)$-сплайн, приближающий функцию f, пусть $(M+m)h \leqslant \rho(\gamma_\delta, \gamma)$. Здесь $\rho(\gamma_\delta, \gamma)$ — расстояние между границами областей Ω_δ и Ω. Тогда справедлива оценка*

$$\left| \iint_\Omega f(x, y)\, d\Omega - \sum_{i=0}^{K_1-1} \sum_{j=0}^{K_2} c^{ij} y_{ij} \right| \leqslant C h^{(n+1)}. \tag{5.13}$$

Здесь $y_{ij} = f(\varphi_i, r_j)$ — значения функции f в узлах сетки, весовые коэффициенты c^{ij} определены формулами (5.11), (5.12)*, суммирование производится лишь по тем индексам i и j, для которых $(\varphi_i, r_j) \in \Omega_\delta$.*

Доказательство приведено в [11]. Здесь заметим, что

$$\sum_{i=0}^{K_1-1} \sum_{j=0}^{K_2} c^{ij} = 1,$$

так как $S(\varphi, r) \equiv 1$, если $f \equiv 1$.

5.10. Кубатурные формулы для трёхмерных односвязных областей

В пространстве $\mathbb{R}^3$ рассматривается ограниченная область с границей $\Gamma = \partial V$, где Γ — замкнутая кусочно-гладкая поверхность. Предполагается, что граница задана параметрически:

$$\Gamma = \{x = x(u,v),\ y = y(u,v),\ z = (u,v);\ (u,v) \in \Omega\},$$

где заданные функции x, y, z принадлежат $C^{1+\varepsilon}$, т. е. первые производные функций x, y, z удовлетворяют условию Гёльдера с порядком $\varepsilon \geqslant 0$ (быть может, за исключением отдельных точек). В области V рассматривается гладкая функция $f \in C^{n+1}(V)$. Будем предполагать, что функция f определена и $n+1$ раз непрерывно дифференцируема в несколько большей области V_δ. Построение аппроксимирующей сетки будем производить следующим образом. Поместим область V_δ в шар B радиуса R и введём сферическую систему координат, связанную с центром шара. Будем рассматривать в шаре радиуса R сферические сетки:

$$\begin{aligned}
&\{r_i = ih_1,\ i = 0,1,\ldots,K_1\},\quad \{R_{l_1} = l_1H_1,\ l_1 = 0,\ldots,L_1\},\\
&\quad H_1 = m_1h_1,\quad K_1 = m_1L_1,\quad K_1h_1 = R;\\
&\{\theta_j = jh_2,\ j = 0,1,\ldots,K_2\},\quad \{\Theta_{l_2} = l_2H_2,\ l_2 = 0,\ldots,L_2\},\\
&\quad H_2 = m_2h_2,\quad K_2 = m_2L_2,\quad K_2h_2 = \pi;\\
&\{\varphi_k = kh_3,\ k = 0,1,\ldots,K_3\},\quad \{\Phi_{l_3} = l_3H_3,\ l_3 = 0,\ldots,\ L_3\},\\
&\quad H_3 = m_3h_3,\quad K_3 = m_3L_3,\quad K_3h_3 = 2\pi.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Иными словами будем считать, что задана гладкая функция $u(r,\theta,\varphi) \in C^{n+1}(B)$, которая совпадает с функцией f в области V. Пусть $u_{ijk} = u(r_i,\theta_j,\varphi_k)$ — сужение функции u на равномерную сетку (5.14). По таблице значений u_{ijk} строим полулокальный сглаживающий сплайн $S(r,\theta,\varphi)$, состоящий из полиномов n-й степени, определённый на всём шаре B. Из оценки (5.1) следует, что S аппроксимирует функцию f с порядком $O(h^{n+1})$, где $h = \max(h_1,h_2,h_3)$ в области V. Подставим в интеграл по области V выражение для S-сплайна в виде (5.2):

$$\begin{aligned}
\iiint\limits_V S(r,\theta,\varphi)\,dV &= \iiint\limits_V S(r,\theta,\varphi) r^2 \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi = \\
&= \iiint\limits_V \sum_{i=0}^{K_1}\sum_{j=0}^{K_2}\sum_{k=0}^{K_3-1} y_{ijk}A_i(r)B_j(\theta)C_k(\varphi) r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi = \\
&= \sum_{i=0}^{K_1}\sum_{j=0}^{K_2}\sum_{k=0}^{K_3-1} c^{ijk}y_{ijk},
\end{aligned} \tag{5.15}$$

где

$$c^{ijk} = \iiint\limits_V A_i(r)B_j(\theta)C_k(\varphi) r^2 \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi. \tag{5.16}$$

Заметим, что выражение в (5.16), стоящее под знаком интеграла, что весьма существенно, есть произведение функций, каждая из которых зависит лишь от одной переменной. Применять формулы типа (5.6) становится неудобно, так как граница Γ будет проходить внутри части шаровых секторов (см. раздел 5.3). Произведём универсализацию вычисления интегралов в (5.16). Для их вычисления применим формулу Гаусса—Остроградского:

$$c^{ijk} = \oint_\Gamma (\vec{a}, \vec{n})\, dS = \iiint_V \operatorname{div} \vec{a}\, dV = \iiint_V A_i(r) B_j(\theta) C_k(\varphi) r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi.$$

Для векторного поля $\vec{a} = \{P_r, P_\theta, P_\varphi\}$ имеем

$$\operatorname{div} \bar{a} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 P_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} P_\theta + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} P_\varphi + \frac{1}{r} \operatorname{ctg} \theta P_\theta$$

(в сферической системе координат). Выберем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 P_r) = A_i(r) B_j(\theta) C_k(\varphi), \quad P_\theta = P_\varphi = 0.$$

Тогда

$$P_r = B_j(\theta) C_k(\varphi) \frac{1}{r^2} \int_0^r A_i(t) t^2\, dt.$$

Первообразная от функции $A_i(r) r^2$ является сплайном, состоящим из полиномов $(n+3)$-й степени. Отсюда получаем, что

$$c^{ijk} = \oint_\Gamma (\vec{a}, \vec{n})\, dS = \oint_\Gamma P_r n_r\, dS, \tag{5.17}$$

где dS — элемент поверхности Γ, n_r — первая компонента единичного вектора внешней нормали к поверхности Γ. Обратим внимание, что непериодический фундаментальный сплайн $A_i(r)$ равен 0 при $r < r_i$, если точка с координатами $(r_i, \theta_j, \varphi_k)$ не принадлежит некоторой области $V_\delta \supset V$. Поэтому $P_r(r, \theta, \varphi) = 0$ при $r < r_i$.

5.11. Частный случай «простой» трёхмерной области

Область назовём «простой», если внутри её найдётся такая точка, что любой луч, выпущенный из неё, пересечёт границу области только в одной точке. Поместим начало координат в эту точку и введём сферическую систему координат. Тогда поверхность Γ — граница области V — задаётся функцией $r = R(\theta, \varphi)$, $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi]$. Найдём выражение для элемента поверхности dS в этом случае. Вычислим гауссовские коэффициенты E, F, G. Имеем:

$$x = r \sin\theta \cos\varphi, \quad y = r \sin\theta \sin\varphi, \quad z = r \cos\theta, \quad r = R(\theta, \varphi). \tag{5.18}$$

Имеем матрицу

$$\begin{pmatrix} x'_\theta & y'_\theta & z'_\theta \\ x'_\varphi & y'_\varphi & z'_\varphi \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} R_\theta \sin\theta\cos\varphi + R\cos\theta\cos\varphi & R_\theta\sin\theta\sin\varphi + R\cos\theta\sin\varphi & R_\theta\cos\theta - R\sin\theta \\ R_\varphi\sin\theta\cos\varphi - R\cos\theta\sin\varphi & R_\varphi\sin\theta\sin\varphi + R\cos\theta\cos\varphi & R_\varphi\cos\theta \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$E = (x'_\theta)^2 + (y'_\theta)^2 + (z'_\theta)^2 = R_\theta^2 + R^2, \quad F = x'_\theta x'_\varphi + y'_\theta y'_\varphi + z'_\theta z'_\varphi = R_\theta R_\varphi,$$
$$G = (x'_\varphi)^2 + (y'_\varphi)^2 + (z'_\varphi)^2 = R_\varphi^2 + R^2\sin^2\theta.$$

Элемент поверхности Γ имеет вид

$$dS = \sqrt{EG - F^2}\, d\theta\, d\varphi = R\sqrt{R_\varphi^2 + (R_\theta^2 + R^2)\sin^2\theta}\, d\theta\, d\varphi.$$

Найдём выражение для внешней нормали к поверхности Γ. Граница области V — поверхность Γ — является поверхностью уровня $\Phi(r,\theta,\varphi) = r - R(\theta,\varphi) = 0$. В сферической системе координат

$$\operatorname{grad}\Phi = \left\{\Phi_r, \frac{1}{r}\Phi_\theta, \frac{1}{r\sin\theta}\Phi_\varphi\right\} = \left\{1, -\frac{1}{r}R_\theta, \frac{1}{r\sin\theta}R_\varphi\right\}.$$

На поверхности Γ первая компонента вектора внешней нормали записывается следующим образом:

$$n_r = \frac{R\sin\theta}{\sqrt{(R^2 + R_\theta^2)\sin^2\theta + R_\varphi^2}}.$$

По формуле (5.17) отсюда получаем, что

$$c^{ijk} = \oint\limits_\Gamma \frac{P_r R\sin\theta}{\sqrt{(R^2 + R_\theta^2)\sin^2\theta + R_\varphi^2}}\, dS = \iint\limits_\Omega P_r R^2 \sin\theta\, d\Omega.$$

Здесь Ω — цилиндр размера $[0,\pi]\times[0,2\pi]$ (входящие в формулу функции являются периодическими по переменной φ с периодом 2π). Подставляя выражение для компоненты P_r, окончательно получаем (см. [17]), что

$$c^{ijk} = \iint\limits_\Omega P_r R^2\sin\theta\, d\Omega = \int\limits_0^\pi \int\limits_0^{2\pi} B_j(\theta)\sin\theta C_k(\varphi)\left(\int\limits_0^{R(\theta,\varphi)} r^2 A_i(r)\, dr\right) d\theta\, d\varphi. \tag{5.19}$$

Заметим, что входящий в формулу (5.19) двумерный интеграл может быть вычислен с помощью двумерной квадратуры (см. раздел 5.5), а также с использованием квадратуры без насыщения. В последнем случае узлы квадратурной формулы по переменной φ в ней распределены равномерно, а узлы по переменной θ– — по нулям полинома Чебышёва [1].

5.12. Оценка точности кубатурной формулы для трёхмерных односвязных областей

Обозначим $h = \max(h_1, h_2, h_3)$. Пусть выполнены условия устойчивости матрицы U: например, $m_1/M_1 < \zeta_*$, $m_2/M_2 < \zeta_*$, $m_3/M_3 < \zeta_*$, и пусть $f \in C^{(n+1)}(V_\delta)$, где $V_\delta \supset V$, т. е. мы предполагаем, что функция f определена и $n+1$ раз непрерывно дифференцируема в несколько большей области $V_\delta \supset V$. Поместим область V_δ в круг K радиуса R . Введём полярную систему координат, взяв за начало координат центр круга R. Продолжим функцию f в $K \setminus V_\delta$ (для простоты можно считать, что V_δ и есть круг K). Обозначим через $S(r,\varphi,\theta)$ $(r-\varphi,\theta)$-сплайн, приближающий таким образом продолженную функцию f на круге K.

Теорема 6. *Пусть $S(r,\theta,\varphi)$ — полулокальный сглаживающий сплайн класса C^p, приближающий функцию f, пусть $(M+m)h \leqslant \rho(\gamma_\delta,\gamma)$. Здесь $\rho(\gamma_\delta,\gamma)$ — расстояние между границами областей V_δ и V. Тогда справедлива оценка*

$$\left| \iiint\limits_V \Big(f(r,\theta,\varphi) - \sum_{i=0}^{K_1}\sum_{j=0}^{K_2}\sum_{k=0}^{K_3-1} c^{ijk} y_{ijk}\right| \leqslant Ch^{n+1}. \tag{5.20}$$

Здесь $y_{ijk} = f(r_i,\theta_j,\varphi_k)$ — значения функции f в узлах сетки, весовые коэффициенты c^{ijk} определены формулами (5.17), (5.19)*, суммирование производится лишь по тем индексам i, j и k, для которых $(r_i,\theta_j,\varphi_k) \in V_\delta$.*

Доказательство. Заметим, что

$$\sum_{i=0}^{K_1}\sum_{j=0}^{K_2}\sum_{k=0}^{K_3-1} c^{ijk} \equiv 1, \tag{5.21}$$

так как $S(r,\theta,\varphi) \equiv 1$, если $f \equiv 1$. Из оценки (5.1) следует, что $|S(r,\theta,\varphi) - f(r,\theta,\varphi)| \leqslant C_0 h^{(n+1)}$ для $(r,\theta,\varphi) \subset V_\delta$. Поэтому

$$\left| \iiint\limits_V f\,dV - \iiint\limits_V S\,dV \right| \leqslant \iiint\limits_V |f-S|\,dV \leqslant C_0 h^{(n+1)} \operatorname{mes}(V),$$

и

$$\iiint\limits_V S\,dV = \sum_{i=0}^{K_1}\sum_{j=0}^{K_2}\sum_{k=0}^{K_3-1} c^{ijk} y_{ijk},$$

где c^{ijk} определены формулами (5.17), (5.19). □

Литература

[1] Бабенко К. И. Основы численного анализа. — М.; Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2002.

[2] Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. — М.: Наука, 1980.

[3] Колмогоров А. Н. О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиции функций одного переменного и сложения // Колмогоров А. Н. Избранные труды. Математика и механика. — М.: Наука, 1985.

[4] Крылов А. Н. Лекции о приближённых вычислениях. — М.; Л.: ГИТТЛ, 1950.

[5] Мысовских И. П. Интерполяционные кубатурные формулы. — М.: Наука, 1981.

[6] Рамазанов М. Д. Теория решётчатых кубатурных формул с ограниченным пограничным слоем. — Уфа: ИМВЦ УНЦ РАН, 2009.

[7] Соболев С. Л. Введение в теорию кубатурных формул. — М.: Наука, 1974.

[8] Соболев С. Л., Васкевич В. Л. Кубатурные формулы. — Новосибирск: Изд-во ИМ СО РАН, 1996.

[9] Силаев Д. А. Полулокальные сглаживающие S-сплайны // Компьютерные исследования и моделирование. — 2010. — Т. 2, № 4. — С. 349—358.

[10] Силаев Д. А. Дважды непрерывно дифференцируемый полулокальный сглаживающий сплайн // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Математика, механика. — 2009. — № 5. — С. 11—19.

[11] Силаев Д. А. Квадратурные формулы высокого порядка аппроксимации // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Мат. модел. прогр. — 2013. — Т. 6, № 4. — С. 87—100.

[12] Силаев Д. А., Амилющенко А. В., Лукьянов А. И., Коротаев Д. О. Полулокальные сглаживающие сплайны класса C^1 // Тр. семинара им. И. Г. Петровского. — 2007. — Вып. 26. — С. 347—367.

[13] Силаев Д. А., Коротаев Д. О. S-сплайн на круге // Тез. междунар. конф. «Математика. Компьютер. Образование». — Пущино. — 2003. — С. 157.

[14] Силаев Д. А., Коротаев Д. О. Решение краевых задач с помощью S-сплайна // Компьютерные исследования и моделирование. — 2009. — Т. 1, № 2. — С. 161—172.

[15] Силаев Д. А., Якушина Г. И. Приближение S-сплайнами гладких функций // Тр. семинара им. И. Г. Петровского. — 1984. — Вып. 10. — С. 197—206.

[16] Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. — М.: Наука, 1976.

[17] Силаев Д. А., Коротаев Д. О. О кубатурных формулах высокого порядка аппроксимации для широкого класса областей // Сб. трудов XVI междунар. конф. «Математика. Компьютер. Образование» / Под ред. Г. Ю. Ризниченко. — Ижевск, 2009. — Т. 2. — С. 20 — 38.