УДК 519.644; 517.584

Интегрирование быстро осциллирующих функций

К. П. Ловецкий, В. В. Петров

Кафедра систем телекоммуникаций
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо–Маклая, д. 6, Москва, 117198, Россия

Умение вычислять интегралы от быстро осциллирующих функций является принципиально важным для решения многих задач оптики, электродинамики, квантовой механики, ядерной физики и многих других областях.

В статье рассматривается метод приближенного вычисления интегралов от быстро осциллирующих функций с помощью перехода к численному решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Использование чебышевской дифференциальной матрицы позволяет далее свести задачу к решению системы линейных алгебраических уравнений, чаще всего невырожденной. Однако и в случае плохой обусловленности системы линейных алгебраических уравнений применение метода тихоновской регуляризации позволяет с высокой точностью получать искомые значения интегралов.

Ключевые слова: интегрирование осциллирующих функций, метод Филона, метод Левина, чебышевская матрица дифференцирования, вырожденные матрицы, функции Бесселя.

1. Введение

Вычисление интегралов от быстро осциллирующих функций является одной из сложных, но весьма важных задач в оптике, электродинамике, квантовой механике и многих других областях.

Традиционные алгоритмы вычисления интеграла от быстро осциллирующих функций, используемые в широко распространённых вычислительных пакетах типа Maple, Mathcad и др., надёжно и точно работают для не очень большого числа наиболее простых случаев. При проектировании, например, реальных осветительных систем результаты таких вычислений становятся ненадёжными. Возникает необходимость разработки надёжных и точных численных методов и вычислительных алгоритмов для интегрирования широкого класса быстро осциллирующих функций.

Рассмотрим интеграл вида:

$$I = \int\limits_a^b f(x) e^{i\omega g(x)} \mathrm{d}x \equiv \int\limits_a^b F(x) \mathrm{d}x, \tag{1}$$

при этом область интегрирования такова, что константа осцилляций $\omega \gg 1$ — «большая» величина; амплитуда $f(x)$ и фаза $g(x)$ — достаточно гладкие не осциллирующие функции. Даже в случае линейной функции $g(x) \equiv x$ функции $\mathrm{Re}\left(f(x)e^{i\omega x}\right)$ и $\mathrm{Im}\left(f(x)e^{i\omega x}\right)$ имеют на $[a, b]$ примерно $\omega(b-a)/\pi$ нулей, поскольку фазовый множитель изменяется в области интегрирования на величину порядка $\omega(b-a)$. Число периодов $F(x) \sim \omega(b-a)/(2\pi)$, и на каждом периоде имеется 2 корня. Таким образом в области интегрирования имеется порядка $\omega(b-a)/\pi$ нулей.

Это означает, что величина, например равномерного, шага $h = (b-a)/n \ll 1/\omega$ при численном интегрировании должна быть мала или должно быть велико $n \gg \omega(b-a) > \omega(b-a)/\pi$. Таким образом, на каждом периоде функции $F(x)$

Статья поступила в редакцию 30 декабря 2010 г.
Авторы выражают признательность за обсуждение данной работы и ценные замечания профессору Севастьянову Л.А.

необходимо брать много узлов сетки и высокой степени полином для аппроксимации, что невыгодно с любой точки зрения — это приводит к большому объёму вычислений [1].

Для интегралов от функций с линейной фазой часто используют метод Филона [2], который работает надёжно и точно. Он основан на построении составных квадратурных формул, в которых на каждом частичном интервале используется интерполяционный многочлен невысокой степени для фазы $f(x)$, и дальнейшее интегрирование выполняется точно. Например, вычисление выражения

$$\int\limits_a^b x^k e^{i\omega x} \mathrm{d}x$$

может быть проведено интегрированием по частям или с использованием соотношения

$$\int\limits_a^b x^k e^{i\omega x} \mathrm{d}x = \frac{1}{(-i\omega)^{k+1}} \left[\Gamma(1+k, -i\omega a) - \Gamma(1+k, -i\omega b)\right],$$

где Γ — неполная гамма-функция.

В приложениях, однако, часто встречаются нерегулярные осцилляции, приводящие к интегралам вида

$$\int\limits_a^b x^k e^{i\omega g(x)} \mathrm{d}x.$$

В этом случае все зависит от вида осциллятора $g(x)$. В случае простой формы осциллятора можно применять метод Филона. Например, для полиномиальных функций вида $g(x) = x^r$. Но даже для функций $g(x) = x^3 - x$ или $g(x) = \cos x$ метод Филона неприменим.

Метод коллокаций Левина [3] подходит для отыскания осциллирующих интегралов с более сложной фазовой функцией. Он заключается в переходе к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) для определения первообразной от подынтегральной функции. Функция $p(x)$, удовлетворяющая условию $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)e^{i\omega g(x)}\right] = f(x)e^{i\omega g(x)}$, позволяет вычислить осциллирующий интеграл

$$I\left[f\right] = \int\limits_a^b f e^{i\omega g} \mathrm{d}x = \int\limits_a^b \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p e^{i\omega g}\right] \mathrm{d}x = p(b)e^{i\omega g(b)} - p(a)e^{i\omega g(a)}. \tag{2}$$

Можно переписать это условие в виде $L\left[p\right] = f$ для оператора

$$L\left[p\right] = p' + i\omega g' p. \tag{3}$$

Отметим, что метод не использует граничных условий, поскольку любое частное решение даёт решение задачи о значении определённого интеграла. Если удаётся хорошо аппроксимировать функцию $p(x)$, то значение $I\left[f\right]$ легко вычисляется.

Рассмотрим оператор $L(p)$, где $p = \sum_{k=1}^n c_k \psi_k$ — разложение функции v по векторам базиса $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\}$. При заданной системе узлов коллокации $\{x_1, \ldots, x_n\}$ коэффициенты c_k могут быть определены как решение системы уравнений метода коллокации:

$$L\left[p\right](x_1) = f(x_1), \quad \ldots, \quad L\left[p\right](x_n) = f(x_n). \tag{4}$$

При определении приближенного значения интеграла $I\left[f\right]$ в виде

$$Q^L\left[f\right] = \int\limits_a^b L(p) e^{i\omega g} \mathrm{d}x = \int\limits_a^b \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p e^{i\omega g}\right] \mathrm{d}x = p(b) e^{i\omega g(b)} - p(a) e^{i\omega g(a)} \qquad (5)$$

справедлива следующая оценка ошибки аппроксимации [4]:

1) $I\left[f\right] - Q^L\left[f\right] = O(\omega^{-1})$ — в том случае, когда граничные точки не входят в число узлов сетки;
2) $I\left[f\right] - Q^L\left[f\right] = O(\omega^{-2})$ — в том случае, когда граничные точки входят в число узлов сетки.

Таким образом, задача о вычислении быстро осциллирующего интеграла (1) сведена к решению системы линейных алгебраических уравнений (4). Повышения точности решения можно достигнуть за счёт выбора точек аппроксимации — их расположения внутри интервала интегрирования и количества.

2. Чебышевская дифференциальная матрица

Предположим, что нам известны значения полинома n-й степени в $(n+1)$-й точках $x_0, \ldots, x_n$. Тогда эти значения определяют полином единственным образом и, следовательно, значения его производных $p'(x) = \mathrm{d}p(x)/\mathrm{d}x$ в тех же точках. Значение производной в каждой точке может быть представлено в виде линейной комбинации значений полинома в этих точках. Эта зависимость может быть записана в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} p'(x_0) \\ \vdots \\ p'(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{0,0} & \cdots & d_{0,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,0} & \cdots & d_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(x_0) \\ \vdots \\ p(x_n) \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Матрица $D = \{d_{j,k}\}$ называется дифференциальной матрицей.

Если в качестве базисных функций выбираются полиномы Чебышева первого рода, а точки сетки являются узлами Гаусса–Лобатто, то элементы дифференциальной матрицы вычисляются по следующим формулам [5]:

$$\begin{array}{llll}
d_{jk} = \dfrac{(-1)^{k-j}}{x_j - x_k}, & 0 < j \neq k < n, & d_{kk} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{x_k}{1 - x_k^2}, & 0 < k < n, \\
 & d_{00} = \dfrac{1}{6}(1 + 2n^2), & d_{nn} = -\dfrac{1}{6}(1 + 2n^2), & \\
d_{0k} = 2\dfrac{(-1)^k}{1 - x_k}, & 0 < k < n, & d_{k0} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{(-1)^k}{1 - x_k}, & 0 < k < n, \\
d_{kn} = \dfrac{1}{2}\dfrac{(-1)^{n-k}}{1 + x_k}, & 0 < k < n, & d_{nk} = -2\dfrac{(-1)^{n-k}}{1 + x_k}, & 0 < k < n, \\
 & d_{0n} = \dfrac{1}{2}(-1)^n, & d_{n0} = -\dfrac{1}{2}(-1)^n. &
\end{array} \qquad (7)$$

Такая матрица называется дифференциальной матрицей Чебышева. Легко проверить, что сумма столбцов матрицы Чебышева равна нулевому вектору, следовательно, матрица является вырожденной.

3. Универсальный метод квадратур

Если рассматривать интеграл на отрезке $x \in [a, b]$, то для перехода к стандартной области задания полиномов Чебышева $[-1,\ 1]$ можно провести замену переменных $x = \dfrac{b-a}{2}t + \dfrac{b+a}{2}$, $t \in [-1,\ 1]$. Тогда

$$p'(x) = \frac{2}{b-a}p'(t). \tag{8}$$

В соответствии с введённым линейным преобразованием узлы Гаусса–Лобатто $t_j = \cos\left(\dfrac{\pi j}{N-1}\right)$ в исходных координатах имеют вид

$$x_j = \frac{b-a}{2}\cos\left(\frac{\pi j}{N-1}\right) + \frac{b+a}{2}, \quad j = 0, 1, \ldots, N-1.$$

Векторы значений функций и их производных в узлах Гаусса–Лобатто вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \vec{p} &= [p(x_0), p(x_1), ..., p(x_n)]^T, \\ \vec{p'} &= [p'(x_0), p'(x_1), ..., p'(x_n)]^T, \\ \vec{g'} &= [g'(x_0), g'(x_1), ..., g'(x_n)]^T, \\ f &= [f(x_0), f(x_1), ..., f(x_n)]^T. \end{aligned} \tag{9}$$

Очевидно, что в соответствии с определением дифференциальной матрицы Чебышева мы можем записать $\mathbf{p}'$ в векторно-матричной форме из (8)

$$\mathbf{p}' = \frac{2}{b-a}\mathbf{Dp} \tag{10}$$

В узлах сетки x_j, уравнения (4) представим в виде

$$\begin{bmatrix} p'(x_0) \\ p'(x_1) \\ \vdots \\ p'(x_{N-1}) \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} g'(x_0)p(x_0) \\ g'(x_1)p(x_1) \\ \vdots \\ g'(x_{N-1})p(x_{N-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \end{bmatrix}. \tag{11}$$

Подставим (9) и (10) в (11). Тогда система может быть записана в виде:

$$\frac{2}{b-a}Dp + i \cdot \operatorname{diag}(g')p = f, \tag{12}$$

или

$$(D + i\Lambda)p = \lambda f, \tag{13}$$

где $\lambda = (b-a)/2$, $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda g'(x_0), \lambda g'(x_1), \ldots, \lambda g'(x_{N-1}))$ является диагональной матрицей. Решение системы (13) содержит $p(b)$ и $p(a)$, а искомый интеграл вычисляется по формуле (5). Таким образом, вычисление интеграла (1) сводится к решению системы линейных уравнений (13).

4. Метод решения системы линейных уравнений

Дифференциальная матрица D является сингулярной матрицей, но её число обусловленности улучшается при прибавлении D к диагональной матрице $i\Lambda$. В этом случае $\|i\Lambda\|_2$ показывает степень улучшения. Когда $\|i\Lambda\|_2$ сравнительно велико, матрица $D + i\Lambda$ становится хорошо обусловленной, в противном случае она остаётся плохо обусловленной, что ведёт к большой ошибке при решении (13). В любом случае применение метода тихоновской регуляризации для решения системы позволяет обеспечить устойчивое вычисление искомого интеграла.

Пример. Рассмотрим в качестве примера вычисление функции Бесселя

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} e^{-i(n\tau - x\sin\tau)}\mathrm{d}\tau$$

сотого порядка ($n = 100$) на интервале $x \in [80, 130]$ (рис. 1).

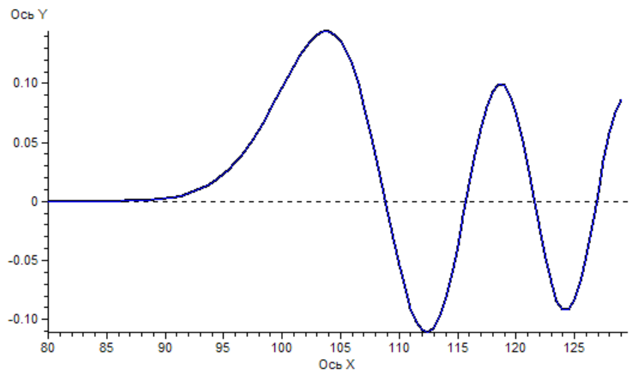

Рис. 1. **Значения функции Бесселя на интервале** $x \in [80, 130]$

Вычисленные по описанному алгоритму значения функции сравнивались со значениями, определёнными по программе BesselJN известного пакета Cephes Math Library [6], автор Stephen L. Moshier. Максимальное отклонение по всем вычисленным значениям не превышает 1.0e-12 при вычислениях с двойной точностью.

5. Заключение

В работе изучается универсальный метод квадратур для одномерных осциллирующих интегралов, позволяющий получить очень точный результат вычисления интегралов сведением задачи к решению систем линейных алгебраических уравнений. Даже в случае, когда системы линейных алгебраических уравнений вырождены, применение методов регуляризации приводит к весьма точным результатам. Достоинством метода является и тот факт, что решение может быть получено при небольшом (по сравнению с прямыми численными методами вычисления интегралов) количестве вычислений подынтегральных функций.

Литература

1. *Приклонский В. И.* Численные методы. Конспект лекций по курсу «Численные методы в физике». — М.: МГУ, 1999. — 146 с. [*Priklonskiyj V. I.* Chislennihe metodih. Konspekt lekciyj po kursu «Chislennihe metodih v fizike». — M.: MGU, 1999. — 146 s.]
2. *Jeffrey G. B.* Louis Napoleon, George Filon (1875-1937) // Obituary Notices of Fellows of the Royal Society. — 1939. — Vol. 2, No 7. — Pp. 500–509.
3. *Levin D.* Procedures for Computing One and Two-Dimensional Integrals of Functions with Rapid Irregular Oscillations // Math. Comp. — 1982. — Vol. 38, No 158. — Pp. 531–538.

4. *Iserles A.* On the Numerical Quadrature of Highly-Oscillatory Integrals I: Fourier Transforms // IMA J. Num. Anal. — 2004. — Vol. 24. — Pp. 1110–1123.
5. *Mason J. C., Handscomb D. C.* Chebyshev Polynomials. — Chapman and Hall/CRC, 2002. — 360 p.
6. www.netlib.org/cephes/.

UDC 519.644; 517.584

Integration of Highly Oscillatory Functions

K. P. Lovetskiy, V. V. Petrov

Telecommunication Systems Department
Peoples Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str., 6, Moscow, 117198, Russia

The paper demonstrates approximate methods of integral calculation of highly oscillatory functions. The paper describes a quadrature method which adopts Chebyshev differential matrix to solve the ordinary differential equation (ODE) and thus obtain integral values. This method make the system of linear equations well-conditioned for general oscillatory integrals. Furthermore, even if the system of linear equations is ill-conditioned, regularization method can be adopted to solve it properly and eventually obtain accurate integral results.

Key words and phrases: oscillatory integrals, Filon method, Levin method, Chebyshev differential matrix, ill-conditioned matrix, Bessel functions.