СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ "СВ. КЛ. ОХРИДСКИ"
ФАКУЛТЕТ ПО МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

НЯКОИ АСИМПТОТИЧЕСКИ ОПТИМАЛНИ КВАДРАТУРНИ ФОРМУЛИ

Ана Александрова Авджиева

АВТОРЕФЕРАТ

на дисертация за присъждане на образователна и научна степен
"Доктор"
професионално направление "Математика"
научна специалност "Изчислителна математика"

Научен ръководител: проф. д.м.н. Гено Николов

София, 2016 г.

1 Увод

В дисертацията се разглеждат формули за числено интегриране от вида

$$Q[f] = \sum_{i=1}^{n} a_i\, f(x_i), \qquad 0 \le x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le 1\,, \tag{1.1}$$

които служат за приближено пресмятане на определения интеграл

$$I[f] := \int_0^1 f(x)\, dx. \tag{1.2}$$

Изборът на интервала $[0, 1]$ тук не е съществено ограничение, тъй като с линейна трансформация резултатите могат да се преформулират за произволен краен затворен интервал $[a, b]$.

Навсякъде в дисертацията с π_k е означено множеството от алгебрични полиноми от степен по-малка или равна на k.

1.1 Концепциите за алгебрическа степен на точност и за оптималност в даден клас

Класическият подход за построяване на квадратурни формули за приближено пресмятане на (1.2) се базира на интерполация, т.е. за дадени възли $\{x_i\}_{i=1}^n$ се построява полиномът на Лагранж $L_{n-1}(f; x)$, интерполиращ функция f в тези възли и интегралът $I[f]$ се приближава с $Q[f] = I[L_{n-1}(f; x)]$. Този метод се основава на понятието *алгебрическа степен на точност*.

Казваме, че квадратурната формула (1.1) има *алгебрическа степен на точност* m (съкратено, $ACT(Q) = m$), ако остатъкът ѝ

$$R[Q; f] := I[f] - Q[f]$$

е равен на нула за $f \in \pi_m$ и $R[Q; f] \ne 0$, когато f е полином от степен $m + 1$.

При подходящ избор на възлите $\{x_i\}_{i=1}^n$ на $Q[f]$ се получават Гаусовите квадратурни формули, които имат най-висока алгебрическа степен на точност, равна на $2n - 1$ или формули за числено интегриране с близка до максималната алгебрическа степен на точност (квадратурни формули от Гаусов тип). Към този клас спадат квадратурните формули на Радо с $ACT = 2n - 2$ и квадратурните формули (КФ) на Лобато с $ACT = 2n - 3$. Квадратурните формули на Радо имат един фиксиран възел - левия или десния край на интеграционния интервал, а квадратурните формули на Лобато са с два фиксирани възела - двата края на интервала.

Мотивация за класическия подход при конструиране на квадратурни формули е теоремата на Вайерщрас за гъстотата на полиномите в пространството $C[0, 1]$, т.е. възможността всяка непрекъсната функция в $[0, 1]$ да се приближи с алгебричен полином при произволна отнапред избрана избрана точност.

Друг подход, основаващ се на съвършено различна идея, е подходът за оптималност на квадратурните формули в зададен клас от функции. Този метод се заражда в средата на миналия век и негови основатели са забележителни математици като А. Колмогоров, А. Сард и С. М. Николски. При този подход възлите $\{x_i\}_{i=1}^n$ и коефициентите $\{a_i\}_{i=1}^n$ на квадратурната формула (1.1) се избират така, че тази квадратурна формула да има най-малката възможна максимална грешка в зададен клас от функции. По-долу накратко ще изложим идеята му.

Нека X е линейно нормирано пространство от функции в $[0,1]$ с норма $\|\cdot\|$ (или, както е в случая на Соболевите пространства, с полунорма $\|\cdot\|$, т.е. условието $\|\cdot\|$ да е нула само за нулевия елемент от пространството не е изпълнено). За квадратурната формула Q от вида (1.1), означаваме с $\mathcal{E}(Q,X)$ най-голямата възможна грешка на Q за функции от единичното кълбо на X, т.е.

$$\mathcal{E}(Q,X) := \sup_{\|f\|_X \le 1} |R[Q;f]|.$$

Търсят се най-добрите коефициенти $\{a_i\}_{i=1}^n$ и възли $\{x_i\}_{i=1}^n$ на Q, така че $\mathcal{E}(Q,X)$ да е възможно най-малко, т.е. търси се величината

$$\mathcal{E}_n(X) := \inf_Q \mathcal{E}(Q,X).$$

Ако инфимумът се достига за квадратурна формула Q^{opt}, която е от вида (1.1), тогава Q^{opt} се нарича *оптимална квадратурна формула* от типа (1.1) в пространството X.

Специален интерес представлява случаят, когато X е някой от Соболевите класове от функции $\widetilde{W}_p^r$ и W_p^r. Тези класове се дефинират чрез

$$\widetilde{W}_p^r := \{f \in C^{r-1}[0,1],\ f - \text{ 1-периодична },\ f^{(r-1)} \text{ е абс. непр.},\ \|f^{(r)}\|_p < \infty\},$$

$$W_p^r := \{f \in C^{r-1}[0,1],\ f^{(r-1)} \text{ е абс. непр.},\ \|f^{(r)}\|_p < \infty\},$$

където

$$\|f\|_p := \Big(\int_0^1 |f(t)|^p dt\Big)^{1/p}, \quad \text{ако } 1 \le p < \infty, \quad \text{и} \quad \|f\|_\infty = \operatorname*{ess\,sup}_{t\in(0,1)} |f(t)|.$$

Доказателството на съществуване и единственост на оптимални квадратурни формули е много трудна задача. В случая на Соболевите класове $\widetilde{W}_p^r$ и W_p^r тя се свежда до дуалната задача за установяване на съществуване и единственост на (периодични) моносплайни от зададен вид с минимално L_q-отклонение от нулата, където $1/p+1/q=1$. Трудностите произтичат от нелинейния характер на задачата, както и от възможността инфимумът да се достига за моносплайн, при който някои от възлите съвпадат.

В периодичните Соболеви класове $\widetilde{W}_p^r$ съществува универсална оптимална кватурна формула (т.е. оптимална за всяко $r \in \mathbb{N}$ и $p \ge 1$) от вида (1.1) и това е съставната n-точкова квадратурна формула на правоъгълниците и нейните транслации. Този резултат е получен от Женсикбаев [31]. Частните случаи при $p=\infty$ и при $p=1$ и r нечетно, са доказани по-рано от Моторни в [21], а случаят $p=1$ и r четно е доказан от Лигун [20].

Съществуването и единствеността на оптимални квадратурни формули в непериодичните Соболеви пространства W_p^r е доказано от Женсикбаев [32]. Тук можем с гордост да посочим и съществения принос от страна на български математик. Борислав Боянов ([7], [8], [9]) доказва съществуване и единственост на моносплайни с минимално L_q-отклонение от нулата, допускащи кратни възли и като следствие съществуване и единственост на оптимални в непериодичните класове на Соболев квадратурни формули от по-общ тип, които използват и производни на подинтегралната функция. Струва си да се отбележи, че Боянов е един от първите, които прилагат топологически методи за доказателството на резултати за единственост. От резултата му за единственост на оптимални квадратурни формули с кратни възли в периодичните класове на Соболев [9] следва в частност, че единствената оптимална квадратурна формула от вида (1.1) е съставната n-точкова квадратурна формула на правоъгълниците и нейните транслации.

За константите на грешката на оптималните квадратурни формули в периодичните класове на Соболев е изпълнено (виж Женсикбаев [31], стр. 1070)

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^r) = \frac{1}{n^r} \inf_c \|B_r - c\|_q \quad \text{за} \quad r \geq 1 \quad \text{и} \quad 1 \leq p \leq \infty\,,$$

в частност

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^r) = \frac{1}{n^r} \|B_r\|_q \quad \text{за нечетни} \quad r \quad \text{и} \quad 1 \leq p \leq \infty\,,$$

т.е. инфимумът се получава при $c = 0$. В тези формули, B_r е r-тия полином на Бернули, и q е спрегнатото на p, т.е. $1/p + 1/q = 1$.

Друг важен случай е $p = \infty$, при който

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^\infty) = \frac{K_r}{(2\pi\, n)^r}, \quad r \geq 1,$$

където K_r са константите на Фавар

$$K_r = \frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m(r+1)}}{(2m+1)^{r+1}}\,.$$

Макар съществуването и единствеността на оптималните квадратурни формули в непериодичните класове на Соболев W_p^r да е доказано, явният вид на тези оптимални квадратурни формули, с изключение на няколко частни случая за $r = 1, 2$, е неизвестен. Този факт силно редуцира важността на оптималните квадратурни формули от практическа гледна точка. Изходът от тази ситуация е да се отстъпи от изискването за оптималност като се търсят квадратурни формули, които са близки до оптималните, например *асимптотически оптимални квадратурни формули.*

Редицата $\{Q_n\}$ от квадратурни формули се нарича асимптотически оптимална за класа от функции X, ако

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\mathcal{E}(Q_n, X)}{\mathcal{E}_n(X)} = 1$$

(тук за Q_n се предполага, че е квадратурна формула с n възела).

За установяване на асимптотическа оптималност в непериодичните класове на Соболев W_p^r използваме, че $\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^r) \le \mathcal{E}_n(W_p^r)$ (очевидно следствие от $\widetilde{W}_p^r \subset W_p^r$), както и факта (виж [10]), че за $1 < p \le \infty$ е изпълнено

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^r)}{\mathcal{E}_n(W_p^r)} = 1.$$

Известно е, че в редица случаи сплайн-функциите представляват по-добър апарат за приближаване от алгебричните полиноми. Това важи с особена сила в случаите, когато приближаваните функции са с ограничена гладкост. С други думи, вместо приближаването на функцията (и съответно на интеграла) да се извършва с полиноми от все по-висока степен е по-добре това да става със сплайн-функции от фиксирана степен и с нарастващ брой възли.

Оказва се, че квадратурните формули от Гаусов тип, асоциирани с някои пространства от сплайн функции, притежават свойството асимптотическа оптималност в Соболевите класове от функции. Преди всичко, нека отбележим, че съществуването и единствеността на квадратурни формули от Гаусов тип за пространства от сплайн функции е еквивалентно на фундаменталната теорема на алгебрата за моносплайни, удовлетворяващи нулеви гранични условия. Тази важна теорема е доказана от Карлин и Мичели [15] и от нея следва, че подобно на квадратурните формули от Гаусов тип за алгебрични полиноми, възлите на квадратурните формули от Гаусов тип за пространства от сплайн функции са различни и се намират в интеграционния интервал, а коефициентите им са положителни.

В работата [23] са изучени квадратурните формули от Гаусов тип за пространствата от сплайн функции от първа и втора степен. Въз основа на получените в [23] резултати, в същата статия е формулирана хипотезата, че редиците от квадратурни формули от Гаусов тип (т.е. квадратурни формули на Гаус, Радо и Лобато), асоциирани с пространствата от сплайн функции от фиксирана степен $r-1$ и равноотдалечени възли в интеграционния интервал, са асимптотически оптимални в непериодичните класове на Соболев W_p^r. Тази хипотеза е доказана от Кьолер и Николов в [16] и този резултат послужи като мотивация за по-нататъшното изследване на такива квадратурни формули. Така например, в статията на Николов и Симиан [28] са предложени алгоритми за рекурсивно намиране на възлите и коефициентите на квадратурните формули от Гаусов тип за пространствата от параболични сплайни с равноотдалечени възли. Специфичният вид на тези квадратурни формули е използван за намиране на ново представяне на константите на грешката на тези квадратурни формули, който в комбинация с получените точни двустранни оценки за възлите и коефициентите на квадратурните формули дава възможност на авторите да получат практически точните стойности на тези константи.

Макар и построяването на квадратурните формули от Гаусов тип за пространства от сплайн функции да е обосновано и важно от практическа гледна точка, при реализирането на тази цел за сплайн функции от степен по-висока от две се натъкваме на сериозна трудност: взаимното разположение на възлите на квадратурната формула спрямо възлите на сплайн функциите (без значение дали те са равноотдалечени или не) е неизвестно. За обосноваването на такова взаимно разположение или се прави хипотеза, базираща се на резултатите от проведени числени експерименти или се налагат подходящи допълнителни предположения за структурата на множеството от възлите на сплайн функциите.

В третата глава на дисертацията е предложен алгоритъм за численото пресмятане на Гаусовите квадратурни формули за пространства от кубични сплайн функции с равноотдалечени възли, като се прави предположение за взаимното разположение на възлите на квадратурната формула и възлите на съответното пространство от сплайн функции.

1.2 Дефинитни квадратурни формули

Важна роля в теорията на квадратурните формули изпълняват дефинитните квадратурни формули. Квадратурната формула

$$Q_n[f] = \sum_{i=1}^{n} a_{i,n}\, f(\tau_{i,n})\,, \quad 0 \le \tau_{1,n} < \tau_{2,n} < \cdots < \tau_{n,n} \le 1$$

се нарича *дефинитна от ред* r, $r \in \mathbb{N}$, ако съществува реална ненулева константа $c_r(Q_n)$, такава че остатъкът на квадратурната формула може да се представи във вида

$$R[Q_n; f] := I[f] - Q_n[f] = c_r(Q_n)\, f^{(r)}(\xi)$$

за всяка $f \in C^r[0,1]$ и някое $\xi \in [0,1]$ зависещо от f. При това, Q_n се нарича положително дефинитна, ако $c_r(Q_n) > 0$ и отрицателно дефинитна от ред r, ако $c_r(Q_n) < 0$.

Очевидно, ако Q_n е дефинитна квадратурна формула от ред r, то Q_n има *алгебрическа степен на точност* $r-1$, т.е. $R[Q_n; f] = 0$ винаги когато f е алгебричен полином от степен ненадвишаваща $r-1$, и $R[Q_n; x^r] \neq 0$.

Функцията f ще наричаме r-изпъкнала (r-вдлъбната), ако $f \in C^r[0,1]$ и $f^{(r)} \ge 0$ ($f^{(r)} \le 0$) върху интервала $[0,1]$.

Значимостта на дефинитните формули от ред r се състои в това, че те апроксимират едностранно интеграла $I[f]$ когато подинтегралната функция f е r-изпъкнала (вдлъбната). Ако например $\{Q^+,\ Q^-\}$ е двойка от съответно положително и отрицателно дефинитна квадратурна формула от ред r и f е r-изпъкнала, то за точната стойност на интеграла $I[f]$ са изпълнени неравенствата $Q^+[f] \le I[f] \le Q^-[f]$. Това просто наблюдение служи за получаване апостериорни оценки на грешката и правила за прекратяване на изчисленията (stopping rules) при автоматизираните алгоритми за числено интегриране (виж напр. [12]). Повечето квадратурни формули, използвани в практиката (квадратурните формули на Гаус, Радо, Лобато и Нютон-Коутс) са дефинитни от някакъв ред.

Дефинитните n-точкови квадратурни формули с най-малката положителна или с най-голямата отрицателна константа на грешката се наричат оптимални дефинитни квадратурни формули. Нека означим

$$c^+_{n,r} := \inf\{c_{n,r}(Q_n) \,:\, Q_n \ \text{ е положително дефинитна от ред } \ r\}\,,$$
$$c^-_{n,r} := \sup\{c_{n,r}(Q_n) \,:\, Q_n \ \text{ е отрицателно дефинитна от ред } \ r\}\,.$$

Трябва да се отбележи, че съвсем не е очевидно дали тези инфимуми се достигнат и дали оптималните дефинитни квадратурни формули са единствени. Съществуването на оптимални дефинитни квадратурни формули за първи път е доказано от Шмайсер [30] за четни r, а за произволно r и при по-общи гранични условия е доказано от Йетер [14] и Ланге [18]. Единствеността на оптималните дефинитни квадратурни формули е доказана от Ланге [18, 19]. За четни r той показва в [18], че

$$
\begin{aligned}
c^+_{n,r} &= -\frac{B_r(j/2)}{n^r}\Big(1+O(n^{-1})\Big) \quad \text{ако} \;\; r = 4m+2j\,,\\
c^-_{n,r} &= -\frac{B_r(j/2)}{n^r}\Big(1+O(n^{-1})\Big) \quad \text{ако} \;\; r = 4m+2-2j
\end{aligned}
$$

за $j = 1,\,2$, където B_r е r-тият полином на Бернули със старши коефициент $1/r!$. Шмайсер в [30] доказва същия резултат за оптималните дефинитни квадратурни формули с равноотдалечени възли. При нечетно r подобни асимптотически формули за $c^{\pm}_{n,r}$ не са известни в литературата.

Оптималната положително дефинитна квадратурна формула с n възела и оптималната $(n+1)$-точкова отрицателно дефинитна квадратурна формула от ред 2 са добре известни: това са съответно съставни квадратурни формули на правоъгълниците и трапеците. Случаят $r = 2$ е изключение, защото при $r \ge 3$ явният вид на на оптималните дефинитни квадратурни формули не е известен. В дисертацията си Ланге [18] числено е пресметнал за $3 \le n \le 30$ n-точковите оптимални дефинитни КФ от ред 3 и n-точковите оптимални положително дефинитни квадратурни формули от ред 4.

С други думи, и за оптималните дефинитни квадратурни формули важи казаното за оптималните квадратурни формули за даден клас от функции: въпреки че съществуването и единствеността им са доказани, самите оптимални дефинитни квадратурни формули остават неизвестни. Този факт значително намалява практическото значение на оптималните дефинитни квадратурни формули. Начин да се справим с тази ситуация е да търсим КФ, които са близки до оптималните, например редици от асимптотически оптимални квадратурни формули.

Нека $\{Q_n\}_{n=n'}^{\infty}$ е редица от положително (респективно отрицателно) дефинитни квадратурни формули от ред r. Казваме, че Q_n е *асимптотически оптимална* положително (отрицателно) дефинитна КФ от ред r, ако

$$
\lim_{n\to\infty}\frac{c_r(Q_n)}{c^+_{n,r}} = 1 \qquad \Big(\text{съответно,}\quad \lim_{n\to\infty}\frac{c_r(Q_n)}{c^-_{n,r}} = 1\Big)\,.
$$

Шмайсер в своята публикация [30] предлага метод за конструиране на асимптотически оптимални квадратурни формули от четен ред r с равноотдалечени възли. Кьолер и Николов в [17] изучават Гаусови квадратурни формули асоциирани с пространствата на сплайн-функциите с двукратни и равноотдалечени възли. Като резултат те получават оценки за най-добрите константи $c^+_{n,r}$ и $c^-_{n,r}$. В частност, в [17] е доказано, че за четни r съответните квадратурни формули от Гаусов тип са асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули (аналогично твърдение за нечетни r няма, защото липсват асимптотически формули за най-добрите константи в този случай). Мотивиран от този резултат, Николов в [27] (виж също [26]) намира явни рекурентни формули за пресмятане на възлите и теглата на Гаусовите квадратурни формули за пространствата от C^1 кубични сплайни с двукратни и равноотдалечени възли. В тази статия Николов предлага и числен алгоритъм за построяване на квадратурни формули на Лобато за същите пространства от сплайни. Съгласно [17], квадратурните формули на Гаус и Лобато за тези пространства от сплайни са съответно асимптотически оптимални положително дефинитни и асимптотически оптимални отрицателно дефинитни от ред 4.

При построяването на квадратурните формули от Гаусов тип за пространствата от сплайн функции с двойни и равноотдалечени възли възниква същият проблем, както и в случая на сплайни с прости възли: не е известно разположението на възлите на квадратурите спрямо възлите на сплайните. За да се определят взаимното разположение на абсцисите на квадратурната формула и възлите на сплайните е необходимо да се направят подходящи допълнителни предположения. Например, в публикацията [1] от 2015 г., авторите разширяват алгоритъма от [27] за да получат в явен вид Гаусови квадратурни формули за пространства от C^1 кубични сплайни с неравномерни възли, като приемат че възлите на сплайните са симетрично разтеглени. Друг подход за конструирането на на Гаусови КФ за пространството от C^2 кубични сплайни е предложен в скорошната публикация [6].

1.3 Метод за получаване на асимптотически оптимални квадратурни формули

Поради трудностите, възникващи при построяването на квадратурните формули от Гаусов тип за пространства от сплайн функции с равноотдалечени възли (прости или двойни), в дисертацията се предлага алтернативен подход за построяване на редици от асимптотически оптимални квадратурни формули в непериодичните класове на Соболев W_p^r, $r = 3, 4$ (Глава 4) и на асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от ред $r = 4$ (Глава 5).

Този подход (който би могъл да се приложи успешно и за по-големи стойности на r) се основава на факта, че единствената (с точност до транслация) оптимална квадратурна формула в периодичните класове на Соболев $\widetilde{W}_p^r$ е съставната квадратурна формула на правоъгълниците и за нейния остатък е налице интегрално представяне с ядра, които са отместени Бернулиеви моносплайни. От това представяне се намират съответните константи на грешката в периодичните класове на Соболев. Аналогът на това представяне в непериодичния случай се дава от сумационните формули на Ойлер-Маклорен, в които допълнително участвуват производните от нечетен ред на подинтегралната функция, пресметнати в краищата на интеграционния интервал. Тези производни се апроксимират с подходящи формули за числено диференциране, използващи възли само в малки околности на краищата на интеграционния интервал и в резултат се получават квадратурни формули, чиито ядра на Пеано се различават само в тези малки околности от съответните отместени Бернулиеви моносплайни. Като резултат, получените квадратурни формули са асимптотически оптимални в съответните непериодични класове на Соболев. Същата идея е приложена и да построяването на асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от четвърти ред.

1.4 Монотонност на остатъците и апостериорни оценки

Както вече бе споменато, дефинитността и монотонността на остатъците при квадратурните формули играят основна роля за получаване на апостериорни оценки за грешката и правила за преустановяване на изчисленията в софтуерните пакети за числено интегриране. Може би първите резултати за монотонност на остатъците на квадратурни формули принадлежат на Нюман [22]. Условия и критерии за монотонност на редиците от остатъците на квадратурни формули и в частност за остатъците на редиците от съставни квадратурни формули от Гаусов тип в термини на техните ядра на Пеано са изведени в [11, 12, 24, 25, 13].

Оказва се, че освен класическия метод за получаване на двустранни оценки за определен интеграл $I[f]$ при r-изпъкнала (вдлъбната) подинтегрална функция f чрез двойка от дефинитни квадратурни формули от ред r и *противоположен тип* дефинитност, такива оценки могат да се получат и с помощта на двойка дефинитни квадратурни формули от ред r и от *един и същи тип.* Такава обща теорема е доказана в Глава 6 на настоящата дисертация и е приложена за доказване на монотонност на остатъците и апостериорни оценки на някои двойки от асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от ред 4, получени в Глава 5 от дисертацията.

2 Съдържание на дисертацията

Дисертацията се състои от увод и пет основни глави. Втората глава съдържа дефиниции, известни теореми и резултати, които се използват в настоящата работа. В следващите четири глави се съдържат основните резултати в дисертацията. Ще представим по-обстойно съдържанието на всяка от главите.

Глава 2. Предварителни сведения

В тази част на дисертацията са представени някои добре известни понятия, теореми и резултати. Материалът е взет основно от курса "Числено интегриране" [33].

В Глава 2 са дефинирани понятията сплайн-функции, ядра на Пеано, подробно са описани свойствата им. В тази част на дисертацията са доказани основни теореми за развитие на остатъка на квадратурните формули в ред. Тук се въвеждат полиноми и моносплайни на Бернули. За конструирането на асимптотически оптималните квадратурни формули съществено използваме сумационните формули на Ойлер-Маклорен. Тези формули са изложени в следната

Лема 1. *Нека* $f \in W_1^s$. *Тогава*

$$\int\limits_0^1 f(x)\,dx = Q_{n+1}^{Tr}[f] - \sum_{\nu=1}^{[\frac{s}{2}]} \frac{\mathcal{B}_{2\nu}}{(2\nu)!}\,\frac{f^{(2\nu-1)}(1)-f^{(2\nu-1)}(0)}{n^{2\nu}} + \frac{(-1)^s}{n^s}\int\limits_0^1 \widetilde{B}_s(nx) f^{(s)}(x)\,dx \tag{2.1}$$

и

$$\int\limits_0^1 f(x)\,dx = Q_n^{Mi}[f] + \sum_{\nu=1}^{[\frac{s}{2}]} \left(1-2^{1-2\nu}\right) \frac{\mathcal{B}_{2\nu}}{(2\nu)!}\,\frac{f^{(2\nu-1)}(1)-f^{(2\nu-1)}(0)}{n^{2\nu}} + \frac{(-1)^s}{n^s}\int\limits_0^1 \widetilde{B}_s\Big(nx-\frac{1}{2}\Big) f^{(s)}(x)\,dx\,. \tag{2.2}$$

Тук и понатагък, $[t]$ е цялата част на t, $\widetilde{B}_s$ е s-тият Бернулиев моносплайн, и $\mathcal{B}_\mu$ е μ-тото число на Бернули.

Константи на грешките на Q_{n+1}^{Tr} и Q_n^{Mi} в $\widetilde{W}_p^r$

Както вече беше споменато, квадратурните формули на правоъгълниците $\{Q_n^{Mi}\}_{n=1}^{\infty}$ и техните транслации са единствените оптимални квадратурни формули в периодичните Соболеви класове $\widetilde{W}_p^r$. Квадратурните формули на трапеците $\{Q_{n+1}^{Tr}\}_{n=1}^{\infty}$ също могат да се разглеждат като транслации на $\{Q_n^{Mi}\}_{n=1}^{\infty}$, тъй като стойностите на подинтегралната функция в краищата на интервала са равни. За $f \in \widetilde{W}_p^s$, $1 \le p \le \infty$, сумите в десните страни на (2.1) и (2.2) са равни на нула поради периодичността на f, следователно

$$R[Q_{n+1}^{Tr};f] = \frac{(-1)^s}{n^s}\int\limits_0^1 \Big[\widetilde{B}_s(nx)-d\Big]\, f^{(s)}(x)\,dx \tag{2.3}$$

и

$$R[Q_n^{Mi};f] = \frac{(-1)^s}{n^s}\int\limits_0^1 \Big[\widetilde{B}_s\Big(nx-\frac{1}{2}\Big)-d\Big]\, f^{(s)}(x)\,dx\,, \tag{2.4}$$

където d е произволна константа. Прилагайки неравенството на Хьолдер в (2.3) и (2.4) и имайки предвид, че Q_{n+1}^{Tr} и Q_n^{Mi} са оптимални квадратурни формули в $\widetilde{W}_p^s$, получаваме

$$|R[Q_{n+1}^{Tr};f[| \le \mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^s)\,\|f^{(s)}\|_p\,, \quad |R[Q_n^{Mi};f[| \le \mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^s)\,\|f^{(s)}\|_p\,,$$

където

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^s) = \frac{1}{n^s}\inf_d \|B_s-d\|_q =: \|B_s-d_{s,p}\|_q\,, \qquad \frac{1}{p}+\frac{1}{q}=1\,. \tag{2.5}$$

Някои стойности на константата $d_{s,p}$ (виж, например [31]) са:

$$d_{s,p} = 0 \ \text{ за нечетни } \ s \in \mathbb{N} \ \text{ и } \ 1 \le p \le \infty, \tag{2.6}$$

$$d_{s,p} = \begin{cases} 2^{-s} B_s(0) & \text{за четни } \ s \in \mathbb{N} \ \text{ и } \ p = 1, \\ 0 & \text{за всяко } \ s \in \mathbb{N} \ \text{ и } \ p = 2, \\ B_s\left(\frac{1}{4}\right) & \text{за четни } \ s \in \mathbb{N} \ \text{ и } \ p = \infty\,. \end{cases} \tag{2.7}$$

По-долу даваме константите $\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^s)$ за $s = 3, 4$ и $p = 1, 2$ и ∞, тъй като с тях ще сравняваме константите на грешката на получените в Глава 4 асимптотически оптимални квадратурни формули.

При $s = 3$, тези константи са

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_\infty^3) = \frac{1}{n^3}\, \|B_3\|_1 = \frac{1}{192\, n^3}\,, \tag{2.8}$$

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_2^3) = \frac{1}{n^3}\, \|B_3\|_2 = \frac{1}{12\sqrt{210}\, n^3}\,, \tag{2.9}$$

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_1^3) = \frac{1}{n^3}\, \|B_3\|_\infty = \frac{1}{72\sqrt{3}\, n^3}\,. \tag{2.10}$$

За $s = 4$, съответните константи са

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_\infty^4) = \frac{1}{n^4}\, \|B_4(\cdot) - B_4(1/4)\|_1 = \frac{5}{6144\, n^4}\,, \tag{2.11}$$

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_2^4) = \frac{1}{n^4}\, \|B_4\|_2 = \frac{1}{240\sqrt{21}\, n^4}\,, \tag{2.12}$$

$$\mathcal{E}_n(\widetilde{W}_1^4) = \frac{1}{n^4}\, \|B_4(\cdot) - 2^{-4} B_4(0)\|_\infty = \frac{1}{768\, n^4}\,. \tag{2.13}$$

Глава 3. Числено пресмятане на Гаусови квадратурни формули за пространства от кубични сплайни с равноотдалечени възли

Тази глава от дисертацията се основава на статията [2].

Интересът към Гаусовите квадратурни формули в пространството от сплайн-функции с равноотдалечени възли е провокиран от резултатите публикувани в [16], където е доказана асимптотическата оптималност на тези квадратури в някои Соболеви класове. В статията [16] е показано, че Гаусовите квадратурни формули, асоциирани в пространството от сплайни от степен $r-1$ с равноотдалечени възли, са асимптотически оптимални в W_∞^r за всяко r, а за нечетни r, в W_p^r, за всяко $p \in [1, \infty]$. За константата на грешката $c_{4,\infty}(Q_n^G)$ на n-точковата Гаусова квадратурна формула Q_n^G за пространството от кубични сплайни с равноотдалечени е изпълнено

$$|R[Q_n^G; f]| \le c_{4,\infty}(Q_n^G)\, \|f^{(4)}\|_\infty \quad \text{за всяко} \ \ f \in W_\infty^4,$$

и в [16] за тази константа е доказано неравенството

$$c_{4,\infty}(Q_n^G) \le \frac{5}{384}\frac{1}{(2n-3)^4}\left(1-\frac{7}{75(2n-3)}\right). \tag{2.14}$$

Сравняването с (2.11) показва асимптотическата оптималност на Q_n^G в Соболевия клас W_∞^4.

В третата глава на дисертацията е предложен алгоритъм за численото пресмятане на Q_n^G. Разгледани са два случая в зависимост от четността на броя на възлите на Гаусовите квадратурни формули. Аналитично са изведени уравнения за последователно получаване на възлите и теглата на квадратурните формули съответно при четен и нечетен брой възли. При големи стойности на броя на възлите системата от нелинейни уравнения за пресмятане на възлите и коефициентите на квадратурите е неразрешима в явен вид. Оказва се, че тази система е подходяща за прилагане на метода на стрелбата. Основа за приложимостта на този метод е наблюдението, че поради единствеността на Гаусовата квадратурна формула, тя трябва да е от симетричен тип. Алгоритъмът е разработен при предположение за разпределението на възлите на Гаусовата квадратурна формула, направено въз основа на някои числени експерименти. Изложени са числените резултати и са направени заключения.

При повече от шестнадесет възли числените стойности на генериращите нормализирани начален възел (или коефициент) стават много близки - различават се едва в шестнадесети знак след десетичната точка, което граничи с машинната точност. Това наложи да се търси друг подход за конструиране на асимптотически оптимални квадратурни формули. Такъв подход е предложен в следващите две глави на дисертацията.

Глава 4. Асимптотически оптимални квадратурни формули в Соболевите класове W_p^3 и W_p^4

В тази глава на дисертацията са построени асимптотически оптимални квадратурни формули в Соболевите класове W_p^3 $(1 \le p \le \infty)$ и W_p^4 за $p = 1, 2$ и ∞.

За дадено $n \in \mathbb{N}$, означаваме с $\{x_{k,n}\}_{k=0}^n$ и $\{y_{\ell,n}\}_{\ell=1}^n$ съответно

$$x_{k,n} = \frac{k}{n}, \quad k = 0, \dots, n; \qquad y_{\ell,n} = \frac{2\ell-1}{2n}, \quad \ell = 1, \dots, n\,. \tag{2.15}$$

Точките $\{x_{k,n}\}_{k=0}^n$ и $\{y_{\ell,n}\}_{\ell=1}^n$ са възлите на съставните квадратурни формули на трапеците Q_{n+1}^{Tr} и правоъгълниците Q_n^{Mi}, зададени чрез

$$Q_{n+1}^{Tr}[f] = \frac{1}{2n}\big(f(x_{0,n}) + f(x_{n,n})\big) + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k,n})\,, \tag{2.16}$$

$$Q_n^{Mi}[f] = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(y_{k,n})\,. \tag{2.17}$$

Получените в тази глава на дисертацията асимптотически оптимални квадратурни формули се получават с подходящи модификации на Q_{n+1}^{Tr} и Q_n^{Mi}, като се използват свързаните с тях сумационни формули на Ойлер-Маклорен. Идеята на конструкцията е проста: заместват се производните на подинтегралната функция в краищата на интервала с формули за числено диференциране с възли, намиращи се в малки околности на краищата на интеграционния интервал. При тази замяна се получават квадратурни формули с ядра на Пеано, които се различават от оптималните ядра за периодичния случай само в тези малки околности, факт, който обезпечава тяхната асимптотическа оптималност. Друго важно предимство на новопостроените квадратурни формули е, че те са в явен вид и могат да бъдат използвани за практически изчисления, без да се грижим за точността, с която са пресметнати възлите и коефициентите им. В тази част на дисертацията са представени числените резултати, константите на грешката на квадратурните формули и аналитично е доказана асимптотическата им оптималност. Направено е сравнение на константите на грешката на построените асимптотически оптимални квадратурни формули в съответните Соболеви класове при използване на един и същ брой възли.

Резултатите в тази глава са публикувани в [3] и [4].

Нека например $f \in W_p^3$. Сумационните формули на Ойлер-Маклорен за $s = 3$ се свеждат до

$$\int_0^1 f(x)\,dx = Q_{n+1}^{Tr}[f] - \frac{1}{12\,n^2}\big[f'(1) - f'(0)\big] + \frac{1}{n^3}\int_0^1 \widetilde{B}_3(nx)\,f^{(3)}(x)\,dx \tag{2.18}$$

и

$$\int_0^1 f(x)\,dx = Q_n^{Mi}[f] + \frac{1}{24\,n^2}\big[f'(1) - f'(0)\big] + \frac{1}{n^3}\int_0^1 \widetilde{B}_3\Big(nx - \frac{1}{2}\Big)\,f^{(3)}(x)\,dx\,. \tag{2.19}$$

Заместваме производните $f'(0)$ и $f'(1)$, които са в дясната страна на (2.18) и (2.19) с подходящи формули за числено диференциране. С цел по-кратък запис ще въведем следната дефиниция:

Определение 1. За дадени $0 \le t_1 < t_2 < t_3 < 1$, означаваме с $D_1(t_1, t_2, t_3)[f]$ интерполационната формула за числено диференциране с възли $\{t_i\}_{i=1}^3$, която апроксимира $f'(0)$, т.е.

$$D_1[f] = D_1(t_1, t_2, t_3)[f] = \sum_{i=1}^{3} c_i\, f(t_i) \approx f'(0)\,.$$

Ще използваме формули за числено диференциране с $t_3 = O(n^{-1})$. Пример за такава формула е

$$D_1(x_{0,n}, y_{1,n}, x_{2,n})[f] = \frac{n}{6}\,\big[-15 f(x_{0,n}) + 16 f(y_{1,n}) - f(x_{2,n})\big]\,.$$

За по-голяма простота $f'(1)$ се апроксимира с формула за числено диференциране, получена от $D_1(t_1,t_2,t_3)[f]$ чрез отражение, т.е.

$$f'(1) \approx \widetilde{D}_1[f] := D_1(t_1,t_2,t_3)[g]\,, \qquad g(t) = -f(1-t)\,.$$

Линейните функционали $L[f] := f'(0) - D_1[f]$ и $\widetilde{L}[f] := f'(1) - \widetilde{D}_1[f]$ се анулират върху π_2, а от теоремата на Пеано за $f \in W_1^3$ те могат да бъдат представени посредством

$$L[f] = \int\limits_0^1 K_3(L;t) f'''(t)\,dt\,, \qquad \widetilde{L}[f] = \int\limits_0^1 K_3(\widetilde{L};t) f'''(t)\,dt\,,$$

където $K_3(L;t) = L\big[(\cdot - t)_+^2/2\big]$ и $K_3(\widetilde{L};t) = \widetilde{L}\big[(\cdot - t)_+^2/2\big]$. От това представяне следва, че

$$\begin{aligned} K_3(L;t) &\equiv 0 \quad \text{за } t \in (t_3, 1]\,,\\ K_3(\widetilde{L};t) &\equiv 0 \quad \text{за } t \in [0, 1-t_3)\,. \end{aligned}$$

Заместваики в (2.18) производните $f'(0)$ и $f'(1)$ съответно с $D_1[f]$ и $\widetilde{D}_1[f]$, получаваме нова квадратурна формула

$$Q[f] = Q_{n+1}^{Tr}[f] + \frac{1}{12\,n^2}\,\sum_{i=1}^{3} c_i\,\big[f(t_i) + f(1-t_i)\big] \tag{2.20}$$

с най-много $n+7$ възела (включая $\{x_{k,n}\}_{k=0}^n$) и ядро на Пеано

$$K_3(Q;t) = \frac{1}{n^3}\,\widetilde{B}_3(n\,t) + \frac{1}{12\,n^2}\big[K_3(L;t) - K_3(\widetilde{L};t)\big]\,, \quad t \in [0,1]\,.$$

Аналогично, заместваики в (2.19) производните $f'(0)$ и $f'(1)$ съответно с $D_1[f]$ и $\widetilde{D}_1[f]$, получаваме нова квадратурна формула

$$Q[f] = Q_n^{Mi}[f] - \frac{1}{24\,n^2}\,\sum_{i=1}^{3} c_i\,\big[f(t_i) + f(1-t_i)\big] \tag{2.21}$$

с най-много $n+6$ възела (включвайки $\{y_{\ell,n}\}_{\ell=1}^n$), като ядрото на Пеано $K_3(Q;t)$ има следното представяне

$$K_3(Q;t) = \frac{1}{n^3}\,\widetilde{B}_3\Big(nx - \frac{1}{2}\Big) - \frac{1}{24\,n^2}\big[K_3(L;t) - K_3(\widetilde{L};t)\big]\,, \quad t \in [0,1]\,.$$

Важно наблюдение за квадратурните формули (2.20) и (2.21) е, че техните трети ядра на Пеано съвпадат в интервала $t \in (t_3, 1-t_3)$ с $n^{-3}\widetilde{B}_3(n\,t)$ и $n^{-3}\widetilde{B}_3(n\,t - 1/2)$ съответно. Или с други думи казано, с изключение на малки околности на краищата на интеграционния интервал, третите ядра на Пеано на тези новообразувани квадратурни формули съвпадат с третите ядра на Пеано на Q_{n+1}^{Tr} и Q_n^{Mi} в периодичния случай. Следователно за константите на грешките на тези квадратури (2.20) и (2.21) имаме

$$c_{3,p}(Q) = \|K_3(Q;\cdot)\|_q = \mathcal{E}_n(\widetilde{W}_p^3)(1+o(1)) \quad \text{при} \ \ n \to \infty\,, \tag{2.22}$$

което доказва тяхната асимптотическа оптималност в W_p^3, $1 < p \le \infty$.

По подобен начин са получени е асимптотически оптимални квадратурни формули в класовете на Соболев W_p^4, $p = 1, 2, \infty$. Разликата със случая W_p^3 е, че тук при различните стойности на p асимптотически оптималните квадратурни формули са различни (дори и да имат едни и същи възли).

Тук ще представим три от асимптотически оптималните квадратурни формули, получени в Глава 4.

1. При $n \ge 6$, квадратурната формула (в дисертацията номерирана с (4.6))

$$Q_{n+1}[f] = \sum_{k=1}^{n+1} A_{k,n+1}\, f(x_{k-1,n})$$

с тегла

$$A_{1,n+1} = A_{n+1,n+1} = \frac{3}{8\,n}\,, \qquad A_{2,n+1} = A_{n,n+1} = \frac{7}{6\,n}\,,$$
$$A_{3,n+1} = A_{n-1,n+1} = \frac{23}{24\,n}\,, \quad A_{k,n+1} = \frac{1}{n}\,, \quad 4 \le k \le n-2\,,$$

е асимптотически оптимална в Соболевите класове W_p^3, $1 \le p \le \infty$. Константата на грешката ѝ в W_∞^3 е

$$c_{3,\infty}(Q_{n+1}) = \frac{1}{192\,n^3}\left(1 + \frac{20}{3\,n}\right),$$

а константата на грешката ѝ в Соболевия клас W_2^3 е

$$c_{3,2}(Q_{n+1}) = \frac{1}{12\sqrt{210}\,n^3}\left(1 + \frac{35}{n}\right)^{1/2}.$$

2. Следващата квадратурна формула (в дисертацията под номер (4.27)) е асимптотически оптимална в Соболевия клас W_2^4:

$$Q_{n+1}^{Tr}[f] := \sum_{k=0}^{n} A_{k,n} f(x_{k,n}),$$

(горният индекс ^{Tr} показва, че е получена на базата на съставната квадратурна формула на трапеците), с тегла $\{A_{k,n}\}_{k=0}^{n}$ зададени чрез

$$A_{0,n} = A_{n,n} = \tfrac{251}{720n}, \qquad A_{1,n} = A_{n-1,n} = \tfrac{299}{240n},$$
$$A_{2,n} = A_{n-2,n} = \tfrac{211}{240n}, \qquad A_{3,n} = A_{n-3,n} = \tfrac{739}{720n},$$
$$A_{k,n} = \tfrac{1}{n}, \qquad 4 \le k \le n-4.$$

Константата на грешката на тази квадратура в W_2^4 е

$$c_{4,2}(Q_{n+1}^{Tr}) = \frac{1}{240\sqrt{21}\,n^4}\left(1+\frac{93971}{180\,n}\right)^{1/2}.$$

3. Квадратурната формула (в дисертацията под номер (4.36))

$$\widetilde{Q}_{n+2}^{Mi}[f] := \sum_{k=1}^{n+2} \widetilde{A}_k f(\tau_{k,n})\,,$$

с тегла

$$\begin{array}{ll} \widetilde{A}_{1,n+2} = \widetilde{A}_{n+2,n+2} = \frac{143}{1152n}, & \widetilde{A}_{2,n+2} = \widetilde{A}_{n+1,n+2} = \frac{871}{1024n}, \\ \widetilde{A}_{3,n+2} = \widetilde{A}_{n,n+2} = \frac{4747}{4608n}, & \widetilde{A}_{4,n+2} = \widetilde{A}_{n-1,n+2} = \frac{1019}{1024n}, \\ \widetilde{A}_{k,n} = \frac{1}{n}, & 5 \le k \le n-2 \end{array}$$

и коефициенти

$$\begin{array}{ll} \tau_{1,n+2} = x_{0,n}, & \tau_{n+2,n+2} = x_{n,n}\,, \\ \tau_{2,n+2} = y_{1,n}, & \tau_{n+1,n+2} = y_{n,n}\,, \\ \tau_{k,n+2} = y_{k-1,n}, & 3 \le k \le n\,, \end{array}$$

е асимптотически оптимална в класа W_∞^4 (индексът ^{Mi} индикира, че тази квадратурна формула е получена от съставната квадратурна формула на правоъгълниците). Константата на грешката ѝ в класа W_∞^4 е

$$c_{4,\infty}(\widetilde{Q}_{n+2}^{Mi}) = \frac{5}{6144\,n^4}\left(1+\frac{1.434934207865606}{n}\right).$$

За численото пресмятане на тази константа е използвана системата Mathematica, като закръглянето е направено с излишък.

Глава 5. Асимптотически оптимални дефинитни формули за числено интегриране

В петата глава на дисертацията са получени редици от асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от четвърти ред. Ако $\{Q^+, Q^-\}$ е двойка съставена от съответно положително и отрицателно дефинитни квадратурни формули от ред 4 и f е 4-изпъкнала функция, то точната стойност на интеграла $I[f]$ е заключена между $Q^+[f]$ и $Q^-[f]$. За получаването на по-добри оценки за точната стойност на интеграла би било добре да се използва двойката от положително и отрицателно дефинитни квадратурни формули, които имат възможно най-малка положителна и възможно най-голяма отрицателна констатнта на грешката, т.е. оптималните дефинитни квадратурни формули от ред 4. Както обаче вече бе споменато, оптималните дефинитни квадратурни формули не са известни и вместо тях конструираме асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от четвърти ред използвайки същата идея както в Глава 4: в отместените сумационни формули на Ойлер-Маклорен, производните на подинтегралната функция в краищата на инервала се заместват с формули за числено интегриране с подходящ избор на възли. На основата на съставните квадратурни формули на трапеците и правоъгълниците са построени шест отрицателно дефинитни и пет положително дефинитни квадратурни формули от четвърти ред. Показана е дефинитността на получените в явен вид квадратурни формули, пресметнати са константите им на грешката и като следствие е установена асимптотическата им оптималност. Причината за това да се построят по няколко редици от положително дефинитни и от отрицателно дефинитни квадратурни формули (а не например по една от всеки вид) е с оглед на приложенията им в комбинации по двойки, предмет на Глава 6 от дисертацията.

Тази глава от дисертацията се основава на статията [5].

Тук излагаме само четири от получените в тази глава асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от ред 4.

1. Квадратурната формула (в дисертацията получена в секция 5.2.1)

$$Q_{n+6,1}[f] = \sum_{k=1}^{n+6} A_{k,n+6}\, f(\tau_{k,n+6}),$$

с възли

$$\begin{aligned}
&\tau_{1,n+6} = x_{0,n}, \quad \tau_{2,n+6} = y_{1,n}, \quad \tau_{3,n+6} = y_{2,2n}, \quad \tau_{4,n+6} = x_{1,n}, \\
&\tau_{k,n+6} = y_{k-3,n}, \qquad 5 \le k \le n+2, \\
&\tau_{n+7-k,n+6} = 1 - \tau_{k,n+6}, \qquad 1 \le k \le 4\,,
\end{aligned}$$

и тегла

$$\begin{aligned}
&A_{1,n+6} = A_{n+6,n+6} = \tfrac{13}{72n}, \qquad && A_{2,n+6} = A_{n+5,n+6} = \tfrac{1}{2n}, \\
&A_{3,n+6} = A_{n+4,n+6} = \tfrac{4}{9n}, && A_{4,n+6} = A_{n+3,n+6} = -\tfrac{1}{8n}, \\
&A_{k,n+6} = \tfrac{1}{n}, \quad 5 \le k \le n+2\,,
\end{aligned}$$

е асимптотически оптимална отрицателно дефинитна квадратура от четвърти ред, основана на съставната квадратурна формула на правоъгълниците. Константата на грешката на $Q_{n+6,1}[f]$ е

$$c_4(Q_{n+6,1}) = -\frac{7}{5760\, n^4}\Big(1 - \frac{15}{14\, n}\Big)\,.$$

2. Квадратурната формула (в дисертацията получена в секция 5.2.2)

$$Q_{n+6,2}[f] = \sum_{k=1}^{n+6} A_{k,n+6}\, f(\tau_{k,n+6}).$$

с възли

$$\begin{aligned}
&\tau_{1,n+6} = x_{0,n}, \quad \tau_{2,n+6} = y_{1,2n}, \quad \tau_{3,n+6} = y_{1,n}, \quad \tau_{4,n+6} = x_{1,n}, \\
&\tau_{k,n+6} = y_{k-3,n}, \qquad 5 \le k \le n+2\,, \\
&\tau_{n+7-k,n+6} = 1 - \tau_{k,n+6}\,, \qquad 1 \le k \le 4
\end{aligned}$$

и коефициенти

$$\begin{aligned}
&A_{1,n+6} = A_{n+6,n+6} = \tfrac{7}{24n}, \qquad &&A_{2,n+6} = A_{n+5,n+6} = -\tfrac{4}{9n},\\
&A_{3,n+6} = A_{n+4,n+6} = \tfrac{7}{6n}, \qquad &&A_{4,n+6} = A_{n+3,n+6} = -\tfrac{1}{72n},\\
&A_{k,n+6} = \tfrac{1}{n}, \quad 5 \le k \le n+2
\end{aligned}$$

е асимптотически отимална отрицателно дефинитна квадратура от ред 4, базирана на съставната квадратурна формула на правоъгълниците.

Константата на грешката на $Q_{n+6,2}$ е

$$c_4(Q_{n+6,2}) = -\frac{7}{5760\,n^4}\Big(1 - \frac{5}{14\,n}\Big)\,.$$

Следват две асимптотически оптимални положително дефинитни квадратурни формули от четвърти ред, основани на съставната квадратурна формула на трапеците.

3. Квадратурната формула (в дисертацията получена в секция 5.3.2)

$$Q_{n+5,3}[f] = \sum_{k=1}^{n+5} A_{k,n+5}\, f(\tau_{k,n+5})$$

с възли и тегла съответно

$$\begin{aligned}
&\tau_{1,n+5} = x_{0,n}, \quad \tau_{2,n+5} = y_{1,2n}, \quad \tau_{3,n+5} = y_{1,n}, \quad \tau_{4,n+5} = x_{1,n},\\
&\tau_{k,n+5} = x_{k-3,n}, \qquad 5 \le k \le n+1,\\
&\tau_{n+6-k,n+5} = 1 - \tau_{k,n+5}, \quad\ 1 \le k \le 4\,,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&A_{1,n+5} = A_{n+5,n+5} = -\tfrac{1}{12n}, \qquad &&A_{2,n+5} = A_{n+4,n+5} = \tfrac{8}{9n},\\
&A_{3,n+5} = A_{n+3,n+5} = -\tfrac{1}{3n}, \qquad &&A_{4,n+5} = A_{n+2,n+5} = \tfrac{37}{36n},\\
&A_{k,n+5} = \tfrac{1}{n}, \qquad 5 \le k \le n+1\,.
\end{aligned}$$

е асимптотически оптимална положително дефинитна от ред 4. Константата на грешката на $Q_{n+5,3}$ е

$$c_4(Q_{n+5,3}) = \frac{1}{720\,n^4}\,\Big(1 - \frac{5}{8\,n}\Big)\,.$$

4. Квадратурната формула (в дисертацията получена в секция 5.3.1)

$$Q_{n+7,4}[f] = \sum_{k=1}^{n+7} A_{k,n+7}\, f(\tau_{k,n+7})$$

с възли и тегла

$$\begin{aligned}
&\tau_{1,n+7} = x_{0,n}, \quad \tau_{2,n+7} = y_{1,3n}, \quad \tau_{3,n+7} = x_{1,3n}, \quad \tau_{4,n+7} = y_{1,n},\\
&\tau_{k,n+7} = x_{k-4,n}\,, \qquad 5 \le k \le n+3\,,\\
&\tau_{n+8-k,n+7} = 1 - \tau_{k,n+7}\,, \qquad 1 \le k \le 4\,,
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&A_{1,n+7} = A_{n+7,n+7} = -\tfrac{5}{12n}, \qquad A_{2,n+7} = A_{n+6,n+7} = \tfrac{3}{2n},\\
&A_{3,n+7} = A_{n+5,n+7} = -\tfrac{3}{4n}, \qquad A_{4,n+7} = A_{n+4,n+7} = \tfrac{1}{6n},\\
&A_{k,n+7} = \tfrac{1}{n}, \quad 5 \le k \le n+3\,,
\end{aligned}
$$

е асимптотически оптимална положително дефинитна от ред 4 с константа на грешката

$$c_4(Q_{n+7,4}) = \frac{1}{720\,n^4}\Big(1 - \frac{5}{36\,n}\Big).$$

Глава 6. Монотонност на остатъците и апостериорни оценки за константата на грешката

Шестата глава на дисертацията е посветена на установяване на монотонност на редиците от остатъците на дефинитни квадратурни формули и като следствие доказване на апостериорни оценки за грешките им. В първата секция на тази глава е доказана следната теорема (в дисертацията Теорема 5), която се отнася за дефинитни квадратурни формули от произволен ред r.

Теорема 1. *Нека* $(Q'\,,\,Q'')$ *е двойка от положително (отрицателно) дефинитни квадратурни формули от ред* r. *Да предположим, че за някоя константа* $c > 0$, *квадратурната формула*

$$\widehat{Q} := (c+1)\,Q' - c\,Q''$$

е отрицателно (положително) дефинитна от ред r. *Тогава следните неравенства са в сила, когато* f *е изпъкнала (вдлъбната) функция от ред* r*:*

(i) $\quad |R[Q';f]| \le \dfrac{c}{c+1}\,|R[Q'';f]|\,;$

(ii) $\quad |R[Q';f]| \le c\,|Q'[f] - Q''[f]|\,;$

(iii) $\quad |R[Q'';f]| \le (c+1)\,|Q'[f] - Q''[f]|\,.$

Твърдение (i) на теоремата ни дава сравнение на големината на остатъците на Q' и Q'' (и понеже при приложенията често Q' е аналог на Q'', но с повече възли, говорим и за монотонност на редицата от остатъците). Твърдения (ii) и (iii) са апостериорни оценки за грешките на Q' и Q''. Вижда се, че колкото е по-малка положителната константа c, толкова по-добри са апостериорните оценки.

Във втората секция на Глава 6 се доказва (Теореми 6 и 7), че условията на горната теорема са изпълнени за някои двойки съставени от построените в Глава 5 асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от ред 4 (десет двойки от отрицателно дефинитни и осем двойки от асимптотически оптимални положително дефинитни квадратурни формули). Намерени са и най-добрите (т.е. най-малките) константи c за всяка от тези двойки.

Така например, за двете асимптотически оптимални отрицателно дефинитни квадратурни формули от четвърти ред, изложени при представяне на съдържението на Глава 5,

$$(Q', Q'') = (Q_{2n+6,1}, Q_{n+6,2}),$$

условията на Теорема 1 са изпълнени с най-добрата за тази двойка квадратурни формули константа

$$c = \frac{13}{29}.$$

За двойката асимптотически оптимални положително дефинитни квадратурни формули от четвърти ред, изложени при представяне на съдържението на Глава 5,

$$(Q', Q'') = (Q_{2n+5,3}, Q_{n+7,4}),$$

условията на Теорема 1 са изпълнени с най-добрата за тази двойка квадратурни формули константа

$$c = \frac{1}{3}.$$

При доказателството на Теореми 6 и 7 е показано, че константата $c = \frac{1}{3}$ е възможно най-малката при произволни получени по тази схема дефинитни квадратурни формули, за която условията на Теорема 5 биха могли да бъдат изпълнени.

Доказаните теоритично апостериорни оценки са тествани върху две функции, които са изпъкнали от четвърти ред (тези функции са използвани за тест и в статията на Шмайсер [30]):

$$f(x) = e^x\,, \qquad g(x) = -\frac{e^{-x}\,\log\left(\frac{1+x}{2}\right)}{\sqrt{1+x}}\,.$$

В третата секция на глава 6 са представени резултатите и сравненията от извършените числени експерименти. Накрая на тази глава са изложени някои изводи и заключения относно получените резултати. В частност е показано защо Теорема 5 е неприложима за някои типове двойки дефинитни квадратурни формули от един и същи тип.

3 Апробация на резултатите

Резултатите, включени в дисертацията, са публикувани в следните статии:

[2] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Numerical computation of Gaussian quadrature formulae for spaces of cubic splines with equidistant knots. In: *BGSIAM'12, Proceedings of the 7th meeting of the Bulgarian Section of SIAM* (A. Slavova and Kr. Georgiev, Eds.), ISNM: 1314 - 7145, Sofia, 2012, 28–38.

[3] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: On certain asymptotically optimal quadrature formulae. In: *Advanced Research in Mathematics and Computer Science, MIE 2014 Proceedings* (P. Sloup, Kr. Stefanov, A. Soskova, I. Koytchev, P. Boytchev, Eds.), 2014, St. Kliment Ohridski University Press, ISNM: 978–954–07–3759–1, Sofia, 3–21.

[4] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Asymptotically optimal quadrature formulae in certain Sobolev classes. In: *Annual of Sofia university "St. Kliment Ohridski"* **102** (2015), St. Kliment Ohridski University Press, ISSN: 0205–0808, Sofia, 145–169.

[5] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Asymptotically optimal definite quadrature formulae of 4-th order. In: *arXiv:1605.02510v1[math.NA] 9 May 2016.*

Части от резултатите, включени в дисертацията, са докладвани на:

1. Avdzhieva A., On Certain Asymptotically Optimal Quadrature Formulae, Doctoral conference in Mathematics, Informatics and Education, MIE 2014 Proceedings, Sofia University, 23-25 September 2014

2. Avdzhieva A., Asymptotically Optimal Quadrature Formulae in the Sobolev Classes W_p^3 , 125 години математика и природни науки в Софийския университет „Св. Климент Охридски", 2014

3. Avdzhieva A., Asymptotically optimal definite quadrature formulae of 4-th order, International Conference "Constructive Theory of Functions", България/Созопол 2016

Публикацията [2] е цитирана в:
Michael Barton, Victor Calo: Gaussian quadrature for splines via homotopy continuation: Rules for C^2 cubic splines, Journal of Computational and Applied Mathematics 296 (2016), 709-723.

4 Авторска справка

По мнение на автора основните приноси на дисертационния труд са:

1. Предложен е алгоритъм за численото пресмятане на Гаусови квадратурни формули за пространства от кубични сплайни с равноотдалечени възли.

2. Намерени са асимптотически оптимални квадратурни формули в Соболевите класове W_p^3 за $1 \leq p \leq \infty$ и W_p^4 при $p = 1, 2, \infty$. Пресметнати са константите на грешките. Тези квадратурни формули имат явен вид, при това възлите и коефициентите им са рационални числа.

3. Построени са асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от четвърти ред и са изчислени константите на грешките им. Отново квадратурите са в явен вид, като възлите и теглата им са рационални числа.

4. Доказани са достатъчни условия за монотонност на остатъците на дефинитни квадратурни формули и апостериорни оценки за грешката на дефинитни квадратурни формули. Тези условия са приложими за някои от построените асимптотически оптимални дефинитни квадратурни формули от 4 ред. Показана е тяхната ефективност.

5 Благодарност и посвещание

Благодаря на научния ми ръководител проф. д.м.н. Гено Николов за помощта и подкрепата, които ми оказа за създаването на дисертацията. За мен беше истинско удоволствие да работя под негово напътствие.

Посвещавам настоящия дисертационен труд в светлата памет на доц. д-р Спас Ташев, който ни напусна преждевременно.

6 Декларация

Декларирам, че представената във връзка с провеждането на процедура за придобиване на образователната и научна степен "доктор" в Софийски университет "Св. Климент Охридски" дисертация на тема: "Някои асимптотически оптимални квадратурни формули" е мой труд и в нейното разработване не са ползвани чужди публикации и разработки в нарушение на авторските им права.

Цитиранията на всички източници на информация, текст, илюстрации, таблици, изображения и други са обозначени според стандартите.

Резултатите и приносите на проведеното дисертационно изследване са оригинални и не са заимствани от изследвания и публикации, в които нямам участие.

Подпис:...............................

Литература

[1] Ait-Haddou, R., Bartoň, M., Calo, V. M.: Explicit quadrature formulae for C^1 cubic splines with symmetrically stretched knot sequences, *J. Comp. Appl. Math.* **290** (2015), 543–552.

[2] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Numerical computation of Gaussian quadrature formulae for spaces of cubic splines with equidistant knots. In: *BGSIAM'12, Proceedings of the 7th meeting of the Bulgarian Section of SIAM* (A. Slavova and Kr. Georgiev, Eds.), ISNM: 1314 - 7145, Sofia, 2012, 28–38.

[3] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: On certain asymptotically optimal quadrature formulae. In: *Advanced Research in Mathematics and Computer Science, MIE 2014 Proceedings* (P. Sloup, Kr. Stefanov, A. Soskova, I. Koytchev, P. Boytchev, Eds.), 2014, St. Kliment Ohridski University Press, ISNM: 978–954–07–3759–1, Sofia, 3–21.

[4] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Asymptotically optimal quadrature formulae in certain Sobolev classes. In: *Annual of Sofia university "St. Kliment Ohridski"* **102** (2015), St. Kliment Ohridski University Press, ISSN: 0205–0808, Sofia, 145–169.

[5] Avdzhieva, A., Nikolov, G.: Asymptotically optimal definite quadrature formulae of 4-th order. In: *arXiv:1605.02510v1[math.NA] 9 May 2016*

[6] Bartoň, M., Calo, V. M.: Gaussian quadrature for splines via homotopy continuation: Rules for C^2 cubic splines, *J. Comp. Appl. Math.* **296** (2016), 709–723.

[7] Bojanov, B. D.: Uniqueness of the monosplines of least deviation. In: *Numerische Integration* (G. Hämmerlin, Ed.), ISNM 45, Birkhäuser, Basel, 1979, 67–97.

[8] Bojanov, B. D.: Existence and characterization of monosplines of least L_p deviation. In: *Constructive Function Theory '77* (Bl. Sendov and D. Vačov, Eds), Sofia, BAN, 1980, 249–268.

[9] Bojanov, B. D.: Uniqueness of the optimal nodes of quadrature formulae, *Math. Comput.*, **36**, 1981, 525–546.

[10] Brass, H.: *Quadraturverfahren*, Vandenhoech&Ruprecht, Göttingen, 1977.

[11] Förster, K.-J.: Exit criteria and monotonicity in compound quadratures, *Numer. Math.* **66** (1993) 321–327.

[12] Förster, K.-J.: Survey on stopping rules in quadrature based on Peano kernel methods, *Suppl. Rend. Circ. Math. Palermo, Ser. II* **33** (1993) 311–330.

[13] Förster, K.-J., Köhler, P., Nikolov, G.: Monotonicity and stopping rules for compound Gauss-type quadrature formulae, *East J. Approx.* **4** (1998) 55–74.

[14] Jetter, K.: Optimale Quadraturformeln mit semidefiniten Peano-Kernen, *Numer. Math.* **25** (1976) 239–249.

[15] Karlin, S., Micchelli, C. A.: The fundamental theorem of algebra for monosplines satisfying boundary conditions. *Israel J. Math.*, **11** (1972), 405–451.

[16] Köhler, P., Nikolov, G.: Error bounds for Gauss type quadrature formulae related to spaces of splines with equidistant knots, *J. Approx. Theory 81* (1995), 368–388.

[17] Köhler, P., Nikolov, G.: Error bounds for optimal definite quadrature formulae, *J. Approx. Theory* **81** (1995), 397–405.

[18] Lange, G.: *Beste und optimale definite Quadraturformel*, Ph.D. Thesis, Technical University Clausthal, Germany, 1977.

[19] Lange, G.: Optimale definite Quadraturformel, in: G. Hämmerlin, (Ed.), *Numerische Integration*, ISNM vol. 45, Birkhäuser, Basel, Boston, Stuttgart, 1979, pp. 187–197.

[20] Ligun, A. A.: Exact inequalities for splines and best quadrature formulas for certain classes of functions. *Mat. Zametki* **19** (1976), 913–926 (in Russian); English Translation in: *Math. Notes* **19** (1976), 533–541.

[21] Motornii, V. P.: On the best quadrature formula of the form $\sum p_k f(x_k)$ for some classes of differentiable periodic functions. *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Mat.* **38** (1974), 583–614 (in Russian); English Translation in: *Math. USSR Izv.* **8** (1974), 591–620.

[22] Newman, D.: Monotonicity of quadrature approximations, *Proc. Amer. Math. Soc.* **42** (1974), 251–257.

[23] Nikolov, G.: Gaussian quadrature formulae for splines. In: *Numerische Integration, IV* (G. Hämmerlin and H. Brass, Eds.), ISNM Vol. 112, Birkhäuser, Basel, 1993, 267–281.

[24] Nikolov, G.: On the monotonicity of sequences of quadrature formulae, *Numer. Math.* **62** (1992), 557–565.

[25] Nikolov, G.: Exit Criteria and Monotonicity of the Remainders of Euler-Maclaurin Quadrature Formulae. In: *Open problems in approximation theory* (B. Bojanov, Ed.), SCT Publishing 1994, 156–162.

[26] Nikolov, G.: Asymptotically optimal definite quadrature formulae, *ZAMM* **75** (1995) SII, 653–654.

[27] Nikolov, G.: On certain definite quadrature formulae, *J. Comp. Appl. Math.* **75** (1996), 329–343.

[28] Nikolov, G., Simian, C.: Gauss-type quadrature formulae for parabolic splines with equidistant knots. In: *Approximation and Computation - In Honor of Gradimir V. Milovanovic* (W. Gautschi, G. Mastroianni, Th. M. Rassias, eds.), Springer Optimization and its Applications, Springer Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 2010, 207–229.

[29] Peano, G: Resto nelle formule di quadratura espresso con un integrale definito, *Atti della Reale Accademia dei Lincei: Rendiconti* (Ser. 5) **22** (1913), 562–569.

[30] Schmeisser, G.: Optimale Quadraturformeln mit semidefiniten Kernen, *Numer. Math.* **20** (1972), 32–53.

[31] Zhensykbaev, A.: Best quadrature formulae for some classes of periodic differentiable functions. *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Mat.*, **41** (1977) (in Russian); English Translation in: *Math. USSR Izv.* **11** (1977), 1055–1071.

[32] Zhensykbaev, A.: Monosplines and optimal quadrature formulae for certain classes of non-periodic functions. *Anal. Math.* **5** (1979), 301–331 (in Russian).

[33] Гено Николов: *Лекции по числено интегриране*, 2005.

[34] Борислав Боянов, Акоп Акопян: Теория на сплайн функциите, *Наука и изкуство*, 1990