

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М.В. ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ
«МНОГОМЕРНЫЕ КУБАТУРЫ СО СВЕРХСТЕПЕННОЙ
СХОДИМОСТЬЮ»

Выполнил студент

205М группы

Тинтул Максим Александрович

подпись студента

Научные руководители:

д.ф.-м.н., проф. Поляков П.А.

подпись научного руководителя

к.ф.-м.н. Белов А.А.

подпись научного руководителя

Допущена к защите

Зав. кафедрой д.ф.-м.н., проф. Салецкий А.М. _____

подпись зав. кафедрой

Москва

2023

Оглавление

Введение.....	3
Глава 1. Вычисление многомерных кубатур.....	6
1.1. Сеточные методы	6
1.2. Псевдослучайные точки.....	7
1.3. Точки Соболя.....	8
1.4. Сетки Коробова	11
Глава 2. Одномерные квадратуры со сверхстепенной сходимостью.....	13
2.1. Замена переменных	13
Глава 3. Многомерные кубатуры со сверхстепенной сходимостью	20
3.1. Экстремальные сетки Коробова	20
3.2. Замена переменных	22
3.4. Конструирование тестов	24
3.5. Примеры расчетов.....	25
Глава 4. Электростатическая задача о сегнетоэлектрике	29
4.2. Математическая постановка задачи	30
4.3. Нижняя полуплоскость. Большие поля	32
4.4. Нижняя полуплоскость. Промежуточные поля.....	33
4.5. Нижняя полуплоскость. Слабые поля	34
4.6. Константы интегрирования	34
4.7. Верификация (нижняя полуплоскость).....	36
4.8. Верхняя полуплоскость. Третья формула Грина	38
4.9. Верификация (верхняя полуплоскость).....	40
4.10. Примеры.....	42
Заключение.....	48
Список литературы	49

Введение

Многомерные функции встречаются в разнообразных задачах физики. Приведем некоторые примеры. В задачах газодинамики, теории упругости и других все величины зависят от трех пространственных координат. Перенос нейтронов, фотонов и других частиц в среде описывается уравнением для функции распределения; эта функция зависит от трех координат среды и трех компонент вектора скорости частицы, то есть число переменных равно шести. Для определения коэффициентов теплопроводности или электропроводности среды приходится вычислять интегралы рассеяния; в них входят компоненты векторов скоростей двух частиц до момента столкновения и после момента столкновения. Общее число переменных в таком интеграле равно двенадцати. Возникают задачи и с существенно большим числом переменных.

В простейшей постановке рассматривают вычисление интеграла в единичном s -мерном кубе V . Пусть $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_s)$ есть s -мерный вектор. Требуется найти

$$I = \int_V f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_0^1 \dots \int_0^1 f(x_1, x_2, \dots, x_s) dx_1 dx_2 \dots dx_s. \quad (1)$$

В физических задачах функция $f(\mathbf{x})$ обычно оказывается непрерывной и достаточно гладкой, то есть имеющей непрерывные производные нескольких порядков. Размерность s может быть достаточно большой, как мы видели выше. Возникает вопрос – какими методами вычислять интегралы (1).

Для небольших размерностей $s \leq 3$ применяются сеточные методы. К ним относятся многомерные варианты квадратурных формул трапеций, средних, Симпсона и др. Их погрешность равна $\delta = O(N^{-p/s})$, где p – порядок точности кубатуры.

Для размерностей $s > 3$ используют методы Монте-Карло (МК):

- Псевдослучайные точки. Примерами являются Линейная конгруэнтная последовательность, генератор Марсалья, вихрь Мерсенна и т.д. Погрешность есть $\delta = O(N^{-1/2})$ и не зависит от s .
- Квазислучайные точки. Среди них последовательности Корпута, Халтона. Лучшими являются ЛП $_{\tau}$ -последовательности Соболя. Погрешность близка к $O(N^{-1})$ и не зависит от s .
- Теоретико-числовые сетки Коробова. Если функция $f(\mathbf{x})$ имеет p -гладкое периодическое продолжение по всем переменным, то погрешность определяется формулой $\delta = O\left[(\ln N)^{\gamma} / N^p\right]$ и не зависит от размерности s .

В математических постановках для некоторых приложений (но в основном для общности) рассматривают огромные размерности s порядка 100–1000. Однако здесь мы ограничимся случаем умеренных размерностей.

В данной работе

- Впервые предложены одномерные и многомерные квадратуры со сверхстепенной сходимостью для гладких подынтегральных функций, в том числе непериодических. Они основаны на использовании специальной замены переменных в интеграле.
- Построены апостериорные оценки точности, практически неотличимые от фактической погрешности. В методах МК такие оценки ранее были неизвестны.
- Предложены усовершенствованные сетки Коробова, названные экстремальными. Их узлы распределены в гиперкубе существенно более равномерно.

- Найдены параметры экстремальных сеток, достаточные для вычисления интегралов размерности $2 \leq s \leq 12$ с точностью вплоть до ошибок округления.
- Рассмотрена прикладная задача о распределении электростатического поля, которое создается тонкой заряженной нитью над плоской границей раздела «воздух-сегнетоэлектрик». Построено новое решение этой задачи в квадратурах. Эти квадратуры вычисляются с помощью предложенных математических методов.

Глава 1. Вычисление многомерных кубатур

1.1. Сеточные методы

Интегралы малой размерности ($s \leq 3$) легко вычисляются по простейшим кубатурным формулам трапеций или средних на равномерных сетках [1,2]. Особенно просто выглядит формула средних. Делят каждую сторону куба V на k равных частей. Тогда куб разбивается на $N = k^s$ кубиков со стороной $1/k$. Обозначим центр j -го кубика как $x_{j+1/2}$; эти центры образуют регулярную сетку. Тогда приближенное значение интеграла и теоретическая оценка погрешности для одномерного случая имеют следующий вид:

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f(x_{j+1/2}), \quad |\Delta_N| \equiv |I - I_N| \leq \frac{1}{24k^2} \max \left| \frac{d^2 f}{dx^2} \right|. \quad (2)$$

В формуле трапеций используются значения подынтегральной функции в узлах x_j и строится интерполяция функции $(s-1)$ -мерной гиперплоскостью. Приведем приближенное значение интеграла и теоретическую оценку его погрешности для одномерного случая:

$$I_N = \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^{N-1} [f(x_j) + f(x_{j+1})], \quad |\Delta_N| \equiv |I - I_N| \leq \frac{1}{12k^2} \max \left| \frac{d^2 f}{dx^2} \right|. \quad (3)$$

Видно, что оценка погрешности из (3) оказывается вдвое больше, чем аналогичная оценка из (2). Поскольку $k = N^{1/s}$, то погрешность имеет порядок величины $\Delta_N = O(N^{-2/s})$. Для одномерной задачи это дает эффективный порядок точности два, что считается достаточно хорошим для практических вычислений. Уже в двумерном случае эффективный порядок точности лишь первый. При дальнейшем увеличении s эффективный порядок точности стремительно уменьшается. Поэтому в многомерном кубе для получения удовлетворительной точности потребуется неприемлемо большое N .

1.2. Псевдослучайные точки

Принципиально другой подход используется в методах Монте-Карло. В этом случае в кубе V выбирают N случайных точек \mathbf{x}_j ; при этом число N может быть произвольным, в отличие от кубатурных формул на регулярных сетках. Кубатурная формула имеет схожий вид с формулой средних. Однако оценка ее погрешности оказывается кардинально иной:

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j), \Delta_N \sim \sqrt{DfN^{-1}}, Df = \int_V f^2(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \left[\int_V f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \right]^2. \quad (4)$$

Здесь Df есть дисперсия. Оценка погрешности имеет не мажорантный, а вероятностный характер: величина погрешности распределена по закону Гаусса с указанным в формуле стандартом. Напомним, что погрешность не превышает 1 стандарта с вероятностью 0.68.

Оценка погрешности (4) не зависит от размерности s . Случайные точки сильно проигрывают регулярным сеткам при $s=1$ или $s=2$. Уже при $s=4$ зависимость погрешности от N для случайных точек и регулярных сеток одинакова. При дальнейшем увеличении размерности случайные точки оказываются более выгодными; выигрыш быстро увеличивается при возрастании s .

Формулы (4) предполагают, что случайные точки \mathbf{x}_j имеют равномерную плотность распределения в кубе V и не коррелированы. Однако строгих математических способов построения таких точек не найдено. Предложен ряд математических алгоритмов; получаемые при этом точки называют псевдослучайными. Построению псевдослучайных точек посвящена обширная литература, например, [3-15]. В отечественной и зарубежной литературе наиболее распространены следующие генераторы:

- вихрь Мерсенна (Mersenne twister) и быстрый вихрь Мерсенна (SIMD-oriented fast Mersenne twister);
- мультипликативный конгруэнтный генератор (Multiplicative congruential generator);
- мультипликативный генератор Фибоначчи с запаздыванием (64-bit multiplicative lagged Fibonacci generator),
- комбинированный множественный рекурсивный генератор (combined multiple recursive generator);
- генератор Philo4x32;
- генератор Threefry4x64;
- генератор Марсалья (Marsaglia's SHR3 shift-register generator);
- модифицированный генератор Subtract-with-Borrow (modified Subtract-with-Borrow generator);
- модифицированная последовательность Лемера.

Именно эти генераторы реализованы во многих коммерческих пакетах (например, Matlab).

Качество каждой последовательности псевдослучайных чисел проверяют с помощью некоторых наборов тестов, основанных на теории вероятности [16-19]. Но никакой набор тестов не может быть полным и исчерпывающим. Поэтому такие проверки носят ограниченный характер. Даже простейшие визуальные тесты показывают, что широко распространенные последовательности не обеспечивают достаточно хорошей равномерности заполнения единичного квадрата [20,21]. Вопрос о влиянии такой неравномерности на фактическую погрешность кубатур остается недостаточно ясным.

1.3. Точки Соболя

В 1973 году Соболев предложил точки, которые он назвал LPP_r – последовательностями [3,22]; сейчас в зарубежной литературе их

называют последовательностями Соболя. Эти последовательности не имитируют случайные распределения; наоборот, они стремятся не вполне случайным образом добиться равномерного распределения в многомерном кубе. Такие точки называют также квазислучайными. Введем

Определение. Назовем магическими отрезки последовательности Соболя с числом точек, удовлетворяющих формуле

$$1 \leq j \leq N, N = 2^n (n = 0, 1, \dots - \text{целое число}). \quad (5)$$

Особенно просто описываются свойства последовательностей Соболя, если рассматривать только магические отрезки. При магическом N проекции всех точек на каждую ось принимают значения j/N , $0 \leq j \leq N-1$. Такие проекции образуют равномерную сетку по каждой оси. Распределение проекций точек на двумерные плоскости также обладают определенными свойствами равномерности: если разбить двумерную грань на N одинаковых прямоугольников, то каждый прямоугольник содержит ровно одну точку последовательности. Это нетривиально, так как существуют много разбиений на одинаковые прямоугольники. Например, при $n=2$, $N=4$ есть три типа разбиений: разбиение на 4 вертикальных прямоугольника размером $1/4 \times 1$, 4 горизонтальных прямоугольника размером $1 \times 1/4$ или 4 квадрата размером $1/2 \times 1/2$. При увеличении n количество типов разбиений стремительно возрастает; поэтому достижение равномерности в указанном смысле нетривиально. Сходные требования предъявляются к многомерным разбиениям.

Последовательность Соболя определена неоднозначно. В ней использованы так называемые направляющие числа, вид которых может варьироваться. В ранних работах [3] таблицы направляющих чисел были построены для размерностей $s \leq 13$ и чисел $n \leq 20$ ($N \leq 2^{20}$). Позднее были построены числа для больших s и N [22]. Правда, при этом направляющие

числа также менялись. В настоящее время доступна программа [23]. Вариант открытого доступа содержит $s \leq 50$ и $n \leq 31$ ($N \approx 2 \cdot 10^9$). Коммерческий вариант программы имеет $s \leq 2^{16} - 1$.

Напомним, что последовательности Соболя отдельно строятся для каждого s . Нельзя из s -мерной последовательности Соболя получить последовательность меньшего числа измерений. Тоже относится к магическим отрезкам последовательностей Соболя.

Предпринимались различные попытки обобщить последовательности Соболя. Однако поиски оптимальных вариантов таких обобщений неизменно приводили опять к последовательностям Соболя. Поэтому мы относимся к таким обобщениям осторожно.

Сама кубатурная формула Соболя имеет тот же вид, что и (4). Но оценка ее погрешности не вполне ясна. Распределение точек лишь при магических N приближается по свойствам к равномерному. При промежуточных N оно получается выбрасыванием части точек и теряет свойство равномерности. Поэтому для кубатур следует использовать лишь магические N .

Отметим одну тонкость. Алгоритм построения точек Соболя является детерминированным. Поэтому и результат расчета является не случайной, а детерминированной величиной. Тем самым, вероятностная оценка (4) есть некоторое приближение (модель) реальной погрешности в предположении, что точки распределены случайно и равномерно. Вопрос о мажорантной (детерминированной) оценке фактической точности остается открытым.

В работе [24] с помощью численных экспериментов была исследована точность многомерных кубатур на последовательностях Соболя. Установлено, что скорость сходимости кубатур на магических последовательностях Соболя близка к $O(N^{-1})$. Была проведена совместная обработка серии расчетов с

различных набором магических значений N , которая позволила апостериорно оценить точность.

1.4. Сетки Коробова

В работе [25] Коробов ввел так называемые «параллелепедальные» сетки.

Определение. Сетки вида

$$M_k = \left(\left\{ \frac{a_1 k}{N} \right\}, \dots, \left\{ \frac{a_s k}{N} \right\} \right), \quad (k = 1, 2, \dots, N), \quad (6)$$

в которых величины a_1, \dots, a_s являются оптимальными коэффициентами по модулю N , называются оптимальными параллелепедальными сетками или просто параллелепедальными сетками.

Характерной особенностью квадратурных формул с такими сетками является то, что они точны для конечных тригонометрических полиномов:

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 P(x_1, \dots, x_s) dx_1 \dots dx_s = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N P\left(\left\{ \frac{a_1 k}{N} \right\}, \dots, \left\{ \frac{a_s k}{N} \right\}\right), \quad (7)$$

где

$$P(x_1, \dots, x_s) = \sum_{m_1, \dots, m_s} C(m_1, \dots, m_s) e^{2\pi i(m_1 x_1 + \dots + m_s x_s)}. \quad (8)$$

Способ вычисления оптимальных коэффициентов, практически приемлемый при не очень больших значениях N , основан на следующей теореме.

Теорема 1. Пусть для целых z функция $H_1(z)$ определена равенством

$$H_1(z) = \frac{3^s}{N} \sum_{k=1}^N \left(1 - 2 \left\{ \frac{k}{N} \right\} \right)^2 \dots \left(1 - 2 \left\{ \frac{kz^{s-1}}{N} \right\} \right)^2, \quad (9)$$

где N – простое число, большее s .

Если при $z=a$ достигается минимум функции $H_1(z)$ на интервале $1 \leq z \leq N-1$, то целые $a_1=1$, $a_2=a, \dots, a_s=a^{s-1}$ будут оптимальными коэффициентами по модулю N .

Выберем $N=N_1N_2$, где N_1 и N_2 простые, большие s , причем N_2 имеет порядок $\sqrt{N_1}$. Определим целое a как в теореме 1, заменив в ней N на N_1 . При больших значениях N для вычисления оптимальных коэффициентов удобнее использовать следующую теорему.

Теорема 2. Пусть для целых z функция $H_2(z)$ определена равенством

$$H_2(z) = \frac{3^s}{N_1N_2} \sum_{k=1}^{N_1N_2} \left(1 - 2 \left\{ \frac{N_1 + N_2}{N_1N_2} k \right\} \right)^2 \cdot \dots \cdot \left(1 - 2 \left\{ \frac{N_1 z^{s-1} + N_2 a^{s-1}}{N_1N_2} k \right\} \right)^2. \quad (10)$$

Если при $z=b$ достигается минимум функции $H_2(z)$ на интервале $1 \leq z \leq N_2 - 1$, то целые $a_1 = N_1 + N_2$, $a_2 = N_1b + N_2a, \dots, a_s = N_1b^{s-1} + N_2a^{s-1}$ будут оптимальными коэффициентами по модулю N_1N_2 .

Глава 2. Одномерные квадратуры со сверхстепенной сходимостью

2.1. Замена переменных

Рассмотрим интеграл

$$I = \int_0^1 f(x) dx. \quad (11)$$

Выполним замену переменных интегрирования по следующему правилу. Сначала с помощью преобразования $t(x)$ отобразим отрезок $x \in (0,1)$ на прямую $t \in (-\infty, +\infty)$. Затем эту прямую отобразим на отрезок $\xi \in (0,1)$ с помощью преобразования $t(\xi)$, производные которого стремятся к нулю вблизи $\xi = 0$ и $\xi = 1$ быстрее любой степени ξ^m .

Такие замены можно составить различными способами. В данной работе рассматривалось преобразование

$$t(\xi) = \frac{A(\xi - 0.5)}{\xi^\alpha (1 - \xi)^\alpha}, \quad x(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{th}(Bt), \quad (12)$$

где A, B, α – постоянные. Назовем замену (12) рационально-экспоненциальной (РЭ-заменой). Отображение (12) приведено на рис. 1 в виде зависимости $x(\xi)$. Она практически линейна в середине отрезка, но на его концах производные x_ξ быстро стремятся к нулю. Возможна также реализация замены (12), в которой вместо гиперболического тангенса берется функция ошибок $\Phi(Bt)$.

После замены (12) интеграл преобразуется к виду

$$I = \int_0^1 \tilde{f}(\xi) d\xi, \quad \tilde{f}(\xi) = f\{x[t(\xi)]\} x_t[t(\xi)] t_\xi(\xi). \quad (13)$$

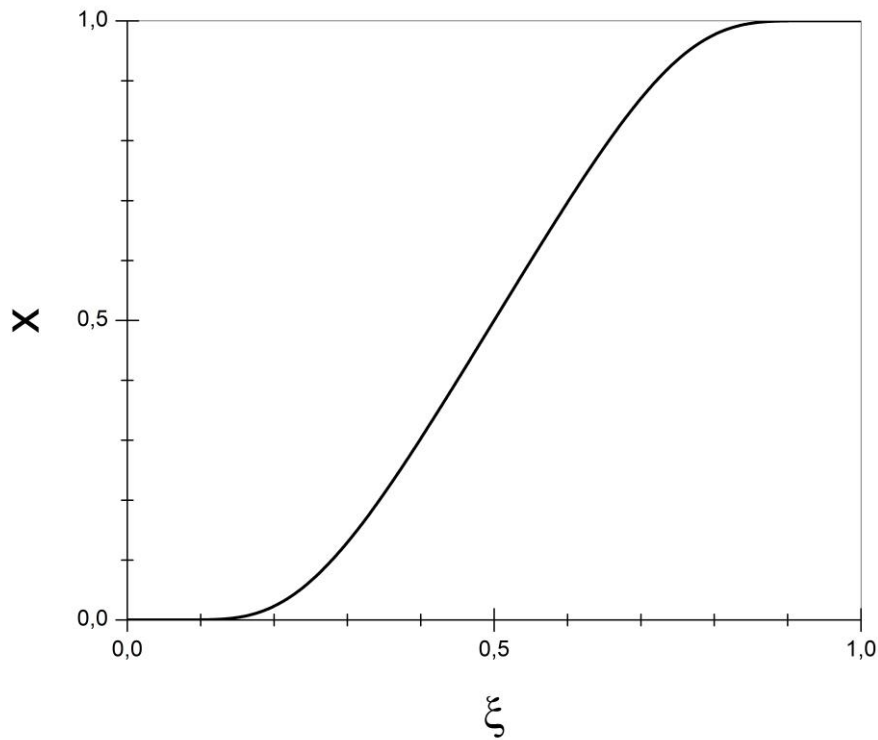


Рис. 1. Преобразование (12). Параметры A, B и α равны единице.

2.2. Периодическое продолжение

Покажем, что новая подынтегральная функция $\tilde{f}(\xi)$ допускает бесконечно гладкое периодическое продолжение за границы отрезка $\xi \in (0,1)$.

Выражение $t_\xi(\xi) \sim \xi^{-\alpha-1}(1-\xi)^{-\alpha-1}$ имеет полюсы на концах отрезка $\xi = 0$ и $\xi = 1$. Однако при $\xi \rightarrow 0+0$ и $\xi \rightarrow 1-0$ производная $x_i \sim \exp(-\xi^{-\alpha}(1-\xi)^{-\alpha})$ стремится к нулю существенно быстрее. В результате $x_i t_\xi \rightarrow 0$ при стремлении к точкам $\xi = 0$ и $\xi = 1$ изнутри отрезка. Поэтому $\tilde{f}(\xi)$ обращается в нуль на границах отрезка.

Аналогично можно показать, что все производные этой функции стремятся к нулю при $\xi \rightarrow 0+0$ и $\xi \rightarrow 1-0$. Например, первая производная имеет вид

$$\tilde{f}'_\xi = f_x x_i^2 t_\xi^2 + f_{x_{ii}} t_\xi^2 + f_{x_i} t_{\xi\xi}. \quad (14)$$

Все производные $dt^m/d\xi^m \sim \xi^{-\alpha-m}(1-\xi)^{-\alpha-m}$ на границах отрезка имеют полюсы, которые умножаются на выражение $\sim \exp(-\xi^{-\alpha}(1-\xi)^{-\alpha})$ в различных степенях. Поэтому при $\xi \rightarrow 0+0$ и $\xi \rightarrow 1-0$ имеем $\tilde{f}_\xi \rightarrow 0$. То же верно и для более высоких производных $d\tilde{f}_\xi^m/d\xi^m$. Таким образом, подынтегральная функция \tilde{f} может быть бесконечно гладко периодически продолжена за границы отрезка $\xi \in (0,1)$.

2.3. Сходимость формулы средних

На отрезке $\xi \in (0,1)$ введем равномерную сетку с шагом $h=1/N$. Полуцелые узлы обозначим через $\xi_{n+1/2}=(n-1/2)h$, $n=1,\dots,N$. Запишем квадратуру средних

$$I_N = \sum_{n=1}^N \tilde{f}(\xi_{n+1/2}). \quad (15)$$

Справедлива

Теорема 3. А) Если $f(x)$ является бесконечно гладкой на отрезке $x \in (0,1)$, то квадратура (15) имеет сверхстепенную сходимость. Б) Если $f(x)$ имеет j непрерывных производных на $x \in (0,1)$, $(j+1)$ -я производная имеет разрыв в точке $x=a \in (0,1)$, и эта точка является узлом сетки, то квадратура (15) имеет степенную сходимость. Порядок точности равен $j+2$, если j четно, и $j+3$, если j нечетно. Такой порядок точности является максимальным при данной гладкости подынтегральной функции.

Доказательство. Докажем утверждение А). Степенная часть погрешности квадратуры средних (15) описывается формулой Эйлера-Маклорена [1]. Она содержит разности нечетных производных на концах отрезка интегрирования

$$\delta = \sum_{k=1}^{\infty} b_k h^{2k} \left(\tilde{f}^{(2k-1)}(1) - \tilde{f}^{(2k-1)}(0) \right), \quad b_k = \text{const}. \quad (16)$$

Как отмечалось выше, после замены переменных (12) производные $\tilde{f}^{(k)}(\xi) \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow 0+0$ и $\xi \rightarrow 1-0$. Все слагаемые в сумме (16) обращаются в нуль. Поэтому в погрешности формулы средних не остается степенных членов, и сходимость оказывается сверхстепенной.

Докажем утверждение Б). При указанных предположениях степенной вклад в погрешность формулы средних имеет вид

$$\delta = \sum_{k=1}^{\infty} b_k h^{2k} \left(\tilde{f}^{(2k-1)}(1) - \tilde{f}^{(2k-1)}(0) \right) + \sum_{k=1}^K b_k h^{2k} \left(\tilde{f}^{(2k-1)}(a-0) - \tilde{f}^{(2k-1)}(a+0) \right). \quad (17)$$

Первая сумма в (17) аналогична (16). После замены переменных (12) она обращается в нуль.

Вторая сумма есть погрешность, возникающая из-за особенности в точке a . Если $2k-1 \leq j$, то в силу непрерывности правые и левые предельные значения производных порядка $2k-1$ одинаковы $\tilde{f}^{(2k-1)}(a-0) = \tilde{f}^{(2k-1)}(a+0)$. Каков предел суммирования K ? Поскольку $\tilde{f}^{(j+1)}$ разрывна в точке a , и в (17) входят только нечетные производные, то возможны два случая. Если j нечетное, то $2K-1 = j+2$. Тогда $\delta = O(h^{j+3})$. Если j четное, то $2K-1 = j+1$, и $\delta = O(h^{j+2})$. Очевидно, такой порядок точности является максимальным, т.е. он не может быть повышен. Теорема доказана.

Замечание. В литературе описаны [26-29] замены переменных, аналогичные (12). В этих работах использовались формулы трапеций и Симпсона, в которых необходимо вычислять подинтегральную функцию в граничных точках. Однако после замены (12) подинтегральная функция $\tilde{f}(\xi)$ имеет существенно особые точки в границах отрезка $\xi=0$ и $\xi=1$. Поэтому вычисление $\tilde{f}(0)$ и $\tilde{f}(1)$ представляет проблему; в частности, возникает переполнение компьютерных чисел.

Чтобы этого избежать, в [26] было предложено обрезать отрезок интегрирования, т.е. вместо $\xi \in (0,1)$ рассматривать $\xi \in (\varepsilon, 1-\varepsilon)$, где ε –

некоторое малое число. Такое обрезание внесло существенную погрешность, и реализовать сверхстепенную сходимость не удалось. Авторы работы [27] провели численные эксперименты и установили, что по количественной точности этот подход уступает формуле Симпсона без замены переменных. Поэтому этот подход был признан неперспективным [27].

Мы используем формулу средних, в которой не требуется вычислять $\tilde{f}(0)$ и $\tilde{f}(1)$. Поэтому описанная трудность не возникает, и реализуется сверхстепенная сходимость.

2.4. Двухэтапная замена переменных

Точность можно улучшить, если предварительно исключить разрыв подынтегральной функции и нескольких ее производных. Выполним замену переменных в два этапа:

1) Исключим разрыв $f(x)$ и ν первых производных. Например,

$$x = \left(1 - (1 - \tilde{x})^\nu\right)^\nu. \quad (19)$$

2) Введем рассмотренную выше замену $\tilde{x}(\xi)$. Влияние существенно особых точек $\xi = 0$, $\xi = 1$ уменьшается. Скорость сходимости резко возрастает.

2.5. Апробация метода

РЭ-замена. В качестве тестового примера была выбрана неполная нижняя гамма функция

$$f(x) = \frac{1}{\gamma(\beta, 1)} x^{\beta-1} e^{-x}, \quad I = \int_0^1 f(x) dx = 1. \quad (18)$$

Подынтегральная функция является бесконечно гладкой внутри интервала $(0, 1)$. Показатель степени β был выбран равным $\beta = 1.7$. В этом случае интеграл является собственным, однако первая производная подынтегральной функции имеет разрыв в точке $x = 0$.

Расчет проводился на наборе сеток с различным числом узлов $N=2,3,4,\dots$. На каждой сетке вычислялась квадратура средних и ее погрешность $\Delta \equiv I - I_N$, равная разности численного и точного интегралов. На рис. 2 приведен график погрешности Δ в зависимости от числа шагов сетки N . Масштаб графика полулогарифмический. В таком масштабе экспоненциальной сходимости соответствует прямая линия, а степенной – логарифмическая кривая.

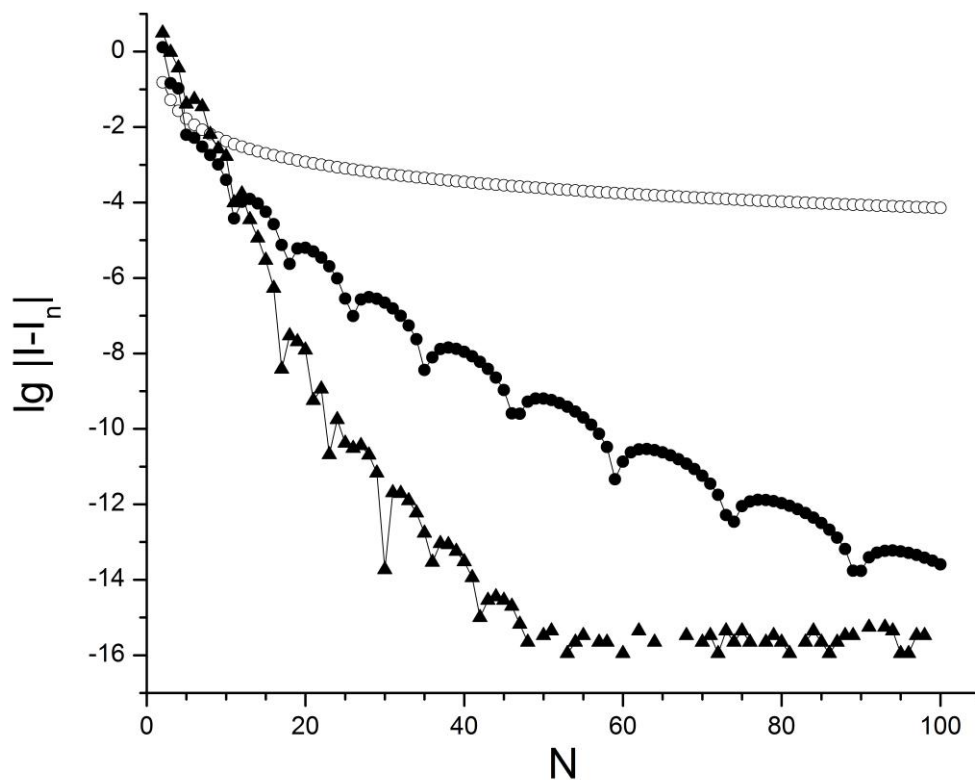


Рис. 2. Погрешность формулы средних в тесте (19). Обозначения – см. текст.

Темные кружки соответствуют расчету с РЭ-заменой (12), светлые кружки – расчету без нее (применению формулы средних к исходному интегралу без замены переменных). Видно, что предлагаемая замена переменных кардинально повышает точность: уже при $N \cong 100$ погрешность составляет $\Delta \cong 10^{-14}$, что сопоставимо с ошибками округления. Выигрыш по

точности по сравнению с расчетом без замены переменных достигает 10 порядков. Скорость сходимости несколько уступает экспоненциальной, но кардинально превосходит степенную.

Из-за наличия существенно особых точек \tilde{f} на границах отрезка зависимость погрешности от числа шагов является немонотонной и знакопеременной [30,31]. На данном графике это видно по немонотонному поведению кривой. Локальные минимумы соответствуют смене знака погрешности.

Таким образом, предложенная замена кардинально повышает точность формулы средних. Мы рекомендуем ее к широкому применению в практических вычислениях.

Двухэтапная замена переменных. На рис. 2 также приведены результаты численного расчета интеграла (18) двухэтапной заменой переменных изображены черными треугольниками. В замене переменных (19), исключая разрывы производных, параметр ν был выбран равным трем. Это значение является оптимальным для данного теста, поскольку при переходе от $\nu = 2$ к $\nu = 3$ сходимость кардинально ускорилась, в то время как дальнейшее увеличение ν не приводило к заметному выигрышу в точности. Из графика видно, что в случае предварительного исключения разрывов скорость сходимости резко возрастает даже по сравнению с РЭ-заменой, а влияние существенно особых точек $\xi = 0$ и $\xi = 1$ уменьшается.

Глава 3. Многомерные кубатуры со сверхстепенной сходимостью

3.1. Экстремальные сетки Коровова

В данной работе усовершенствован алгоритм расчета оптимальных коэффициентов, основанный на теореме 2. Рассмотрим $H_2(z, a)$ как функцию двух целочисленных переменных z и a , $1 \leq a \leq N_1 - 1$, $1 \leq z \leq N_2 - 1$ (10).

Найдем одновременный минимум $\min_{z,a} H_2$ по этим переменным. Координаты минимума обозначим b_0 и a_0 соответственно. Вычислим коэффициенты a_1, \dots, a_s , подставляя $a = a_0$, $b = b_0$, и узлы M_k . Назовем такие сетки экстремальными сетками Коровова. Найденны таблицы параметров экстремальных точек для размерностей $2 \leq s \leq 12$ (см. табл. 2). Они позволяют вычислять интегралы с точностью вплоть до ошибок округления.

s	N_1	N_2	a_0	b_0	s	N_1	N_2	a_0	b_0	s	N_1	N_2	a_0	b_0
2	3	2	3	1	3	7	3	3	1	4	7	3	3	1
	7	3	6	1		23	5	9	3		47	7	5	1
	23	5	2	1		113	11	6	3		167	13	8	9
	113	11	9	10		283	17	5	7		839	29	16	26
	283	17	7	14		839	29	8	9		9403	97	18	11
5	3	2	19	1	6	47	7	3	4	7	23	5	11	2
	23	5	12	2		283	17	12	14		167	13	18	10
	167	13	10	11		839	29	9	5		839	29	7	10
	1367	37	11	5		6229	79	7	42		2803	53	12	22
	5039	71	14	10		38803	197	14	34		32749	181	11	16
8	283	17	4	2	9	283	17	13	12	10	167	13	3	6
	1367	37	13	8		953	31	11	29		839	29	13	25
	6229	79	8	19		6229	79	13	22		3719	61	4	18
	26561	163	14	10		29927	173	4	10		19319	139	19	13
	76717	277	15	6		72353	269	12	5		78941	281	14	4
11	1669	41	16	13	12	167	13	20	10					
	5039	71	17	13		839	29	14	13					
	17159	131	13	11		6883	83	16	2					
	52433	229	14	8		27883	167	13	7					
	94229	307	7	6		85847	293	6	4					

Таблица 1. Параметры экстремальных сеток Коровова.

Величина $\min H_2$ характеризует качество сетки. Чем она меньше, тем равномернее распределены точки M_k в гиперкубе и тем выше точность кубатуры. Расчеты показывают, что при увеличении N величина $\min_z H_2$ уменьшается до некоторого предельного значения, зависящего от s , и при дальнейшем сгущении сеток перестает убывать (см. рис. 3). Это ограничивает предельно достижимую точность кубатур на классических сетках Коробова. В то же время величина $\min_{z,a} H_2$ убывает с увеличением N вплоть до достижения фона ошибок округления, который в $10^3 - 10^5$ раз меньше, чем предельно достижимое $\min_z H_2$.

Тем самым, предлагаемые экстремальные сетки Коробова имеют существенно лучшую равномерность распределения точек в гиперкубе по сравнению с классическими сетками Коробова.

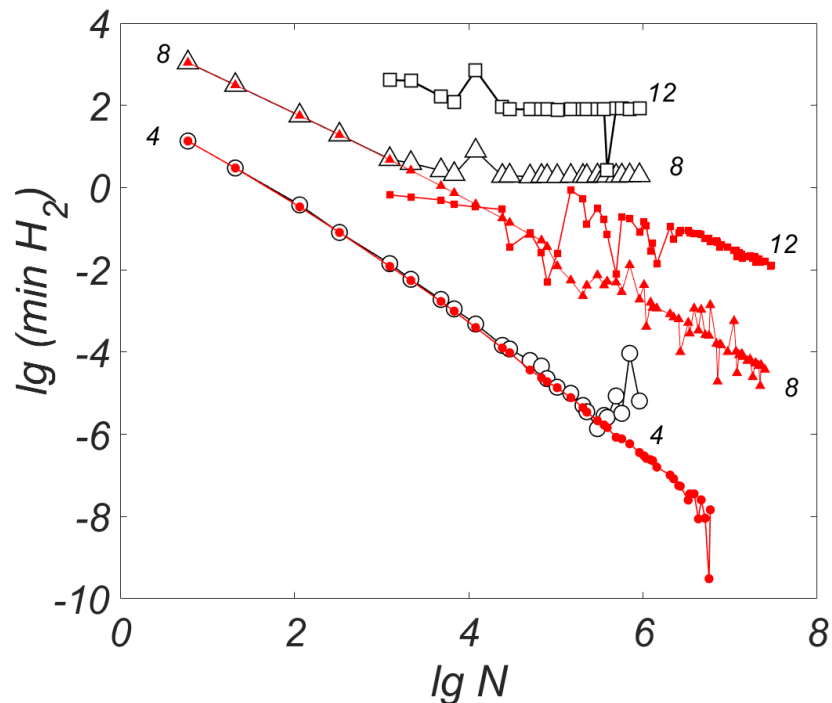


Рис. 3. Светлые маркеры – классические сетки Коробова, темные – экстремальные сетки, цифры около линий – s .

3.2. Замена переменных

Обобщим РЭ-замену переменных (12) на многомерный случай

$$x_q(t_q) = 0.5 + 0.5th(Bt_q), \quad t_q(\xi_q) = A \frac{\xi_q - 0.5}{\xi_q^\alpha (1 - \xi_q)^\alpha}, \quad 1 \leq q \leq s. \quad (20)$$

По аналогии с одномерным случаем, в результате такой замены переменных интеграл примет вид

$$I = \int_0^1 \dots \int_0^1 \tilde{f}(\xi_1, \dots, \xi_s) d\xi_1 \dots d\xi_s, \quad (21)$$

где

$$\tilde{f}(\xi_1, \dots, \xi_s) = f(x_1(\xi_1), \dots, x_s(\xi_s)) \prod_{q=1}^s (dx_q / dt_q) (dt_q / d\xi_q), \quad (22)$$

$$\frac{dx_q}{dt_q} = \frac{0.5B}{ch^2(Bt_q)}, \quad \frac{dt_q}{d\xi_q} = A \frac{(2\alpha - 1)\xi_q^2 - (2\alpha - 1)\xi_q + 0.5\alpha}{\xi_q^{-\alpha-1} (1 - \xi_q)^{-\alpha-1}}. \quad (23)$$

Кубатурная формула на сетках Коробова может быть записана в виде

$$I_N = N^{-1} \sum_{k=1}^N f(M_k). \quad (24)$$

Если узел M_k попадает на грань гиперкуба, то доопределим $\tilde{f}(M_k) = 0$.

Теорема 4. Если подынтегральная функция $f(\mathbf{x})$ является бесконечно гладкой в гиперкубе $(0,1) \times \dots \times (0,1)$, то кубатура на сетках Коробова (24) для интеграла (21) имеет сверхстепенную сходимость.

Доказательство. Степенные по N члены погрешности кубатуры для интеграла (21) могут быть записаны в виде

$$\delta \leq \sum_{j=1}^{\infty} a_j \tilde{D}_{p+j} N^{-p-j} \ln^{\gamma_j} N, \quad (25)$$

где $a_j, \gamma_j - \text{const}$, \tilde{D}_{p+j} – число, мажорирующее скачок $(p+j)$ -ой производной периодического продолжения $f(\mathbf{x})$ по x_q . Поскольку после замены переменных (20) новая подынтегральная функция имеет бесконечно гладкое периодическое продолжение, то все $\tilde{D}_{p+j} = 0$. В погрешности (25) не остается степенных по N членов, и сходимость оказывается сверхстепенной. Теорема доказана.

Замечание 1. Подчеркнем, что точки Коробова, как и точки Соболя, строятся по детерминированному алгоритму. Оценка (25) является не вероятностной, а мажорантной.

Замечание 2. В оценке (25) константа \tilde{D}_{p+j} мажорирует не величину $(p+j)$ -ой производной во всем многомерном кубе, а только ее скачок на противоположащих гранях гиперкуба. Это позволяет ослабить требования на подынтегральную функцию.

3.3. Контроль точности

Как известно, для кубатур средних и трапеций применяют метод сгущения сеток и оценки точности по Ричардсону. Суть состоит в следующем. Проводится расчет на сетках с $N, 2N, \dots$ ячеек. От сетки к сетке размер ячейки уменьшается вдвое. В результате получается последовательность сеточных значений кубатуры I_N, I_{2N}, \dots . Оценка точности по Ричардсону имеет вид

$$\delta_{2N} = (I_N - I_{2N}) / (2^{p/s} - 1), \quad (26)$$

где p – порядок точности кубатуры. Эта оценка асимптотически точна. Она применима, если точно известна главная асимптотика зависимости

погрешности от числа шагов. Для точек Коробова такая асимптотика не найдена.

В данной работе предлагается следующий подход. Пусть проведен расчет на наборе экстремальных сеток Коробова. Точность кубатуры I_{end} на последней сетке сопоставима с ошибками компьютерного округления. Поэтому погрешность δ_N на предыдущих сетках N оценим сравнением с последней сеткой:

$$\delta_N = I_{end} - I_N. \quad (27)$$

Для методов МК такие оценки ранее были неизвестны.

3.4. Конструирование тестов

Численные эксперименты целесообразно проводить на многомерных интегралах по единичному кубу, точные значения которых известны. Тогда можно непосредственно определять погрешность численного расчета и исследовать ее поведение. Обсудим, какие требования целесообразно предъявлять к подынтегральной функции.

В многомерных задачах используют понятие эффективной размерности функции. Например, рассмотрим две функции:

$$f(\mathbf{x}) = \prod_{q=1}^s f_q(x_q) \quad (28)$$

и

$$f(\mathbf{x}) = f_1\left(\sum_{q=1}^s \alpha_q x_q\right), \quad (29)$$

где все $f_q(x_q)$ существенно отличны от констант. В первой функции все переменные в равной степени важны, и эффективная размерность функции

равна s . Вторая функция зависит лишь от одной комбинации переменных, так что её эффективная размерность равна 1. Чем больше эффективная размерность функции, тем задача труднее. Поэтому наиболее трудными оказываются функции первого типа.

Заметим, что не нарушая общности, можно считать все подынтегральные функции неотрицательными: их можно сделать неотрицательными путем прибавления константы, а такая процедура не влияет на погрешность любого метода. Пусть для функции типа произведения каждая f_q существенно отлична от нуля лишь на участке длиной β своего единичного ребра. Тогда произведение одномерных функций будет значимо отличаться от нуля в объеме β^s . Если β невелико, то при увеличении s объем β^s стремительно убывает; например, при $\beta=0.1$ и $s=10$ величина $\beta^s=10^{-10}$. В этом случае для получения приемлемой точности любой метод Монте-Карло потребует числа узлов $N\beta^s > 1$. Видно, что для того, чтобы число точек было разумным, следует брать β близким к единице.

С учетом указанных соображений, в качестве теста мы выбрали тест вида (28). Он не является легким, несмотря на внешнюю простоту.

Для простоты и без потери общности все f_q будем считать одинаковыми. Для них введем нормировку такую, что

$$\int_V f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1. \quad (30)$$

3.5. Примеры расчетов

Рассмотрим тест вида (28), где одномерная функция та же, что и в тесте с неполной нижней гамма функцией (19):

$$f(\mathbf{x}) = \prod_{q=1}^s f_q(x_q), \quad f_q(x_q) = \frac{1}{\gamma(\beta, 1)} x_q^{\beta-1} e^{-x_q}, \quad \beta=1.7. \quad (31)$$

Расчеты интеграла были проведены для различных размерностей $s=4,8,12$. Погрешность определялась как разность кубатуры и точного значения интеграла. Полученные погрешности приведены на рис. 4 (темные кружки). Масштаб графика – двойной логарифмический. В таком масштабе прямая линия соответствует степенной сходимости, а линия, убывающая быстрее прямой (выпуклая вверх) – сверхстепенной.

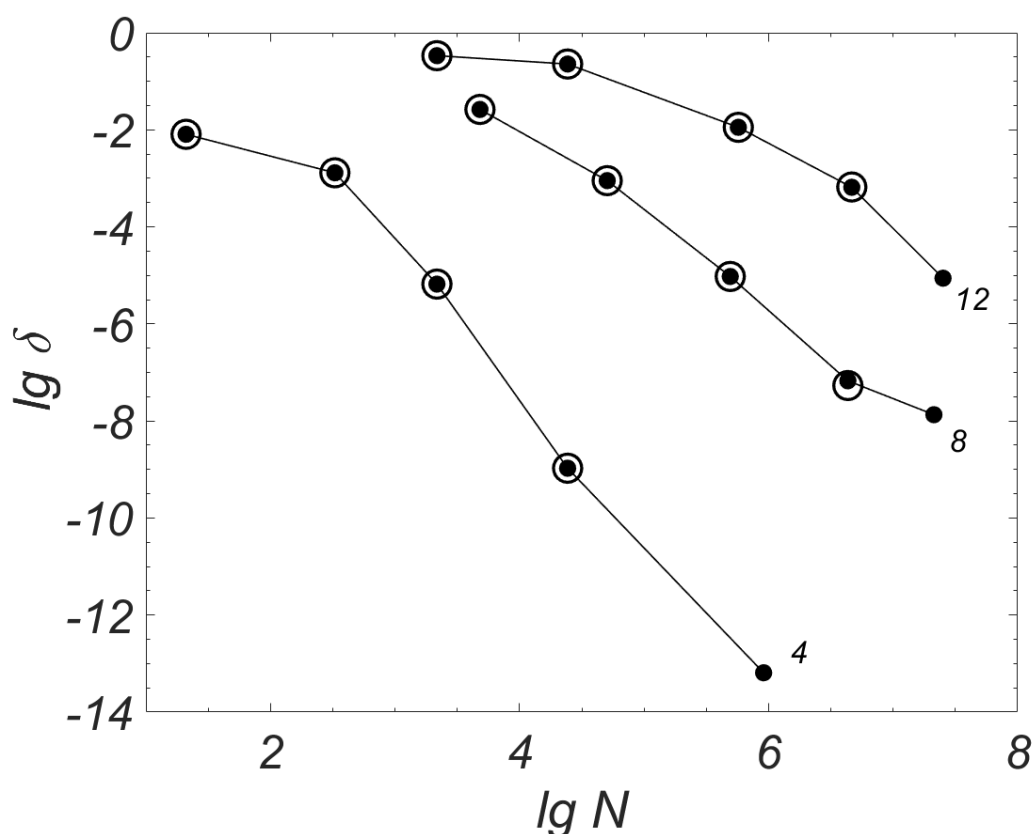


Рис. 4. Погрешности, $\beta = 1.7$. Обозначения – см. текст.

Видно, что все кривые являются выпуклыми вверх, и закон сходимости действительно является сверхстепенным. На самых подробных сетках погрешность сопоставима с ошибками округления и перестает убывать.

Также на рис. 4 приведены апостериорные оценки (27) – светлые кружки. Видно, что они практически неотличимы от фактической погрешности. Это показывает высокую практическую ценность предлагаемых оценок.

Проведем сравнение различных методов: кубатуры (24) на экстремальных сетках Коробова с РЭ-заменой (20) и без нее, на классических сетках Коробова [25], на сетках Соболя [23], а также многомерной формулы средних с заменой (20). Пусть подынтегральная функция имеет вид (31) при $s = 6$. Погрешности данных методов приведены на рис. 5. График выполнен в двойном логарифмическом масштабе.

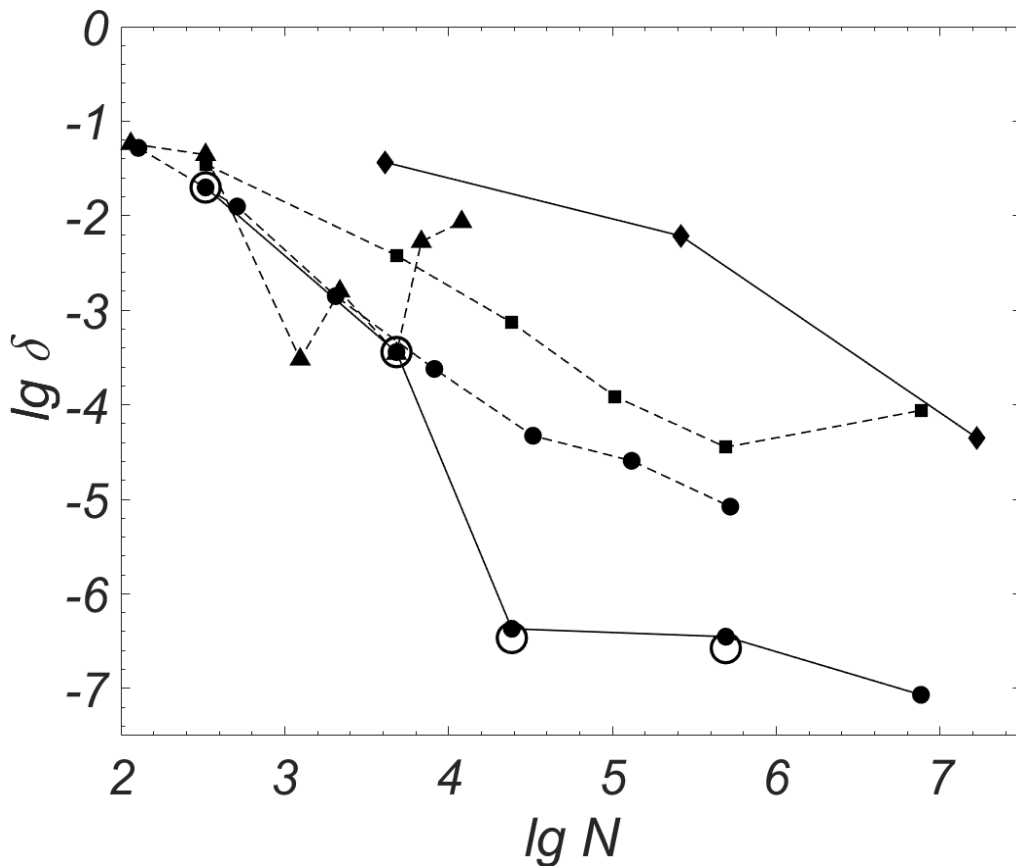


Рис. 5. Сравнение методов в тесте (31). Сплошные линии – РЭ-замена (20), штриховые – без замены. Темные маркеры – погрешность относительно точного ответа, светлые – апостериорная оценка (27). Кружки – экстремальная сетка Коробова, треугольники – классическая сетка Коробова, квадраты – точки Соболя, ромбы – формула средних.

Видно, что экстремальные сетки Коробова позволяют достигать существенно более высокой точности по сравнению с классическими сетками Коробова. Введение РЭ-замены переменных (20) резко ускоряет сходимость и существенно повышает количественную точность. При этом формула трапеций

с заменой (20) сильно уступает по точности кубатуре на экстремальных сетках Коробова с той же заменой. Видно также, что совокупность предлагаемых подходов – экстремальные сетки Коробова и РЭ-замена (20) – кардинально превосходят по точности другие перечисленные методы. Выигрыш составляет от 10^2 до 10^5 раз. Кроме того, предлагаемые методы позволяют апостериорно подтверждать достигнутую точность. Поэтому они также превосходят известные методы по надежности.

Глава 4. Электростатическая задача о сегнетоэлектрике

4.1. Физическая постановка задачи

Тонкая бесконечно протяженная заряженная нить с линейной плотностью заряда γ расположена на расстоянии h от плоской границы раздела двух полупространств, заполненных веществом с диэлектрическими проницаемостями $\varepsilon_1 = const$ и $\varepsilon_2 = \varepsilon(\vec{E})$ соответственно (см. рис. 6). Требуется найти распределение потенциала в каждой области.

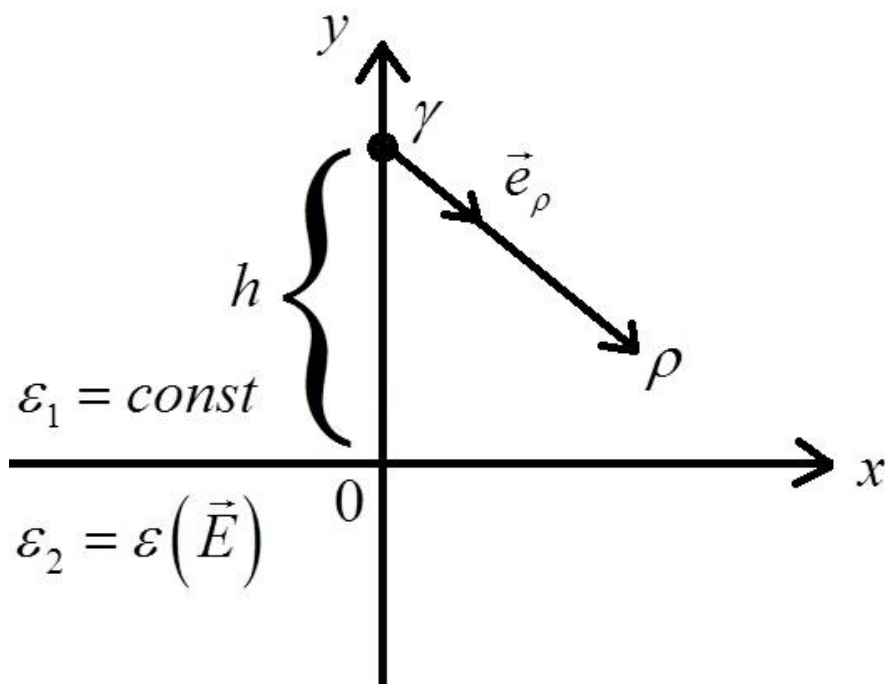


Рис. 6. Постановка задачи.

Пусть в верхнем полупространстве вакуум ($\varepsilon_1 = 1$), а среда, заполняющая нижнее полупространство, существенно нелинейна, причем её вектор поляризации описывается следующим выражением:

$$\vec{P}(\vec{E}) = P_s \left(1 - e^{-E/E_{cr}}\right) \frac{\vec{E}}{E}, \quad (32)$$

где P_s – поляризация насыщения, E_{cr} – критическое значение поля. При $E \ll E_{cr}$ возникает насыщение: $|P| = const$.

Поскольку нить является бесконечной протяженной, то решение во всех её сечениях будет одинаково. Достаточно рассмотреть одно выделенное сечение. Следовательно, задача является двумерной. Введем декартову систему координат, как показано на рис. 6. Тогда границей раздела двух сред является прямая $y = 0$, а заряд (выделенное сечение заряженной нити) находится в точке $M_h = \{0, h\}$.

4.2. Математическая постановка задачи

Как известно, любая задача электростатики описывается двумя уравнениями Максвелла:

$$\operatorname{rot} \vec{E} = \vec{0}, \operatorname{div} \vec{D} = 2\pi\rho. \quad (33)$$

где $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$. Введем скалярный потенциал φ , такой, что $\vec{E} = -\vec{\nabla} \varphi$.

Записывая дивергенцию вектора \vec{D} в каждой полуплоскости и выражая его через потенциал φ , мы получим два следующих уравнения:

$$\Delta \varphi_{\text{верх}} = -2\pi\gamma\delta(x)\delta(y-h), \quad (34)$$

$$\operatorname{div} \left[-\varepsilon \left(-\vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right) \vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right] = 0. \quad (35)$$

Кроме того, на границе раздела двух сред должны выполняться граничные условия

$$\varphi_{\text{нижн}}(y=0) = \varphi_{\text{верх}}(y=0), \quad (36)$$

$$D_n^{\text{верх}} - D_n^{\text{нижн}} = 2\pi\rho_{\text{пов}}. \quad (37)$$

Условие (36) вытекает из требования непрерывности потенциала в любой точке пространства. Условие (37) означает, что единственной причиной разрыва нормальной составляющей вектора электрической индукции \vec{D} на границе раздела двух сред является наличие на ней поверхностных свободных зарядов.

Перепишем уравнение (37) для потенциалов, учитывая, что свободных зарядов на границе нет, а нормаль сонаправлена с осью y , которая изображена на рис. 6. Тогда получим

$$\varepsilon \left(-\vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right) \frac{\partial \varphi_{\text{нижн}}}{\partial y} = \frac{\partial \varphi_{\text{верх}}}{\partial y}. \quad (38)$$

Поскольку задача рассматривается в неограниченной области, необходимо поставить условия на бесконечности. По мере удаления точки наблюдения от заряда поле ослабевает. Вклад нелинейности нижней среды уменьшается, и диэлектрическая проницаемость стремится к постоянной величине, которую мы отыщем позже. Поэтому условие на бесконечности имеет вид

$$\varphi \rightarrow \varphi^0 \quad (39)$$

при $\rho = \sqrt{x^2 + (y-h)^2} \rightarrow \infty$. Здесь φ^0 – решение линейной задачи, в которой диэлектрическая проницаемость нижней среды является постоянной величиной.

Собирая (34), (35), (36), (38) и (39) вместе, мы приходим к системе уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \varphi_{\text{верх}} = -2\pi\gamma\delta(x)\delta(y-h) \\ \operatorname{div} \left[-\varepsilon \left(-\vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right) \vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right] = 0 \\ \varphi_{\text{нижн}}(y=0) = \varphi_{\text{верх}}(y=0) \\ \varepsilon \left(-\vec{\nabla} \varphi_{\text{нижн}} \right) \frac{\partial \varphi_{\text{нижн}}}{\partial y} = \frac{\partial \varphi_{\text{верх}}}{\partial y} \\ \varphi \rightarrow \varphi^0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty \end{array} \right. \quad (40)$$

Для сеточного решения задачи (40) нужно использовать бикомпактные схемы [32]. Однако, на наш взгляд, прямой сеточный расчет нецелесообразен, так как

он сопряжен с большими объемами вычислений. Нам удалось построить простое и изящное решение в квадратурах, которое сводится к расчету нескольких одномерных интегралов.

4.3. Нижняя полуплоскость. Большие поля

Под «большими» полями мы подразумеваем предельный случай, когда $E \square E_{cr}$. Тогда экспонентой в формуле (32) можно пренебречь, а поляризация будет приближенно равна поляризации насыщения

$$\vec{P} \cong P_s \frac{\vec{E}}{E}. \quad (41)$$

В нижней полуплоскости, исходя из (33), можно записать следующее уравнение для вектора \vec{D} :

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0. \quad (42)$$

Решение уравнения (42) должно быть центрально-симметричным относительно точки $M_h = \{0, h\}$, поскольку единственным источником поля является заряд в указанной точке. Введем полярную систему координат с центром в точке нахождения заряда, как показано на рис. 6:

$$\rho = \sqrt{x^2 + (y - h)^2}, \quad \varphi = \operatorname{arctg} \frac{y - h}{x}. \quad (43)$$

В этих координатах $\vec{E} = E \vec{e}_\rho$, $\vec{P} = P_s \vec{e}_\rho$ и, поскольку $\vec{D} = \vec{E} + 2\pi \vec{P}$,

$$\vec{D} = (E + 2\pi P_s) \vec{e}_\rho. \quad (44)$$

Запишем дивергенцию в полярных координатах с учетом симметрии поля

$$\operatorname{div} \vec{D} = \frac{1}{\rho} \left[\frac{d}{d\rho} (\rho D_\rho) \right] = 0. \quad (45)$$

Решение уравнения (45) имеет вид

$$\vec{D} = \frac{C_1}{\rho} \vec{e}_\rho, \quad (46)$$

где C_1 – константа интегрирования, не зависящая от координаты ρ . Мы найдем ее позже.

Подставляя (46) в (44), получим напряженность поля E в нижней полуплоскости:

$$E_{\text{нижн}}^{\text{больш}} = \frac{C_1}{\rho} - 2\pi P_s, \quad (47)$$

Зная напряженность поля (47), мы можем сразу найти потенциал

$$\varphi = -\int E(\rho) d\rho, \quad (48)$$

тогда

$$\varphi_{\text{нижн}}^{\text{больш}} = C_1 \ln \frac{1}{\rho} + 2\pi P_s \rho + C_2, \quad (49)$$

где C_2 – нормировочная константа.

4.4. Нижняя полуплоскость. Промежуточные поля

В этом случае поле E сопоставимо с E_{cr} , и каким-либо слагаемым в (32) пренебречь нельзя. Построим решение аналогично пункту 4.3. Относительно E получаем следующее алгебраическое уравнение:

$$E_{\text{нижн}}^{\text{пром}} + 2\pi P(E_{\text{нижн}}^{\text{пром}}) = \frac{C}{\rho}. \quad (50)$$

Уравнение (50) является трансцендентным и хорошо решается численно, например, с помощью метода Ньютона. Решив (50) и найдя значения поля, мы можем найти потенциал с помощью (48).

Таким образом, мы построили решение задачи в нижней полуплоскости в квадратурах. Осталось только найти константы интегрирования C_1, C .

4.5. Нижняя полуплоскость. Малые поля

«Малыми» полями назовем $E \ll E_{cr}$. В этом случае экспоненту в (33) можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться линейным членом. Получим вектор поляризации в этом случае

$$\vec{P} \cong \frac{P_s}{E_{cr}} \vec{E}. \quad (51)$$

Поскольку $\vec{D} = \vec{E} + 2\pi\vec{P} = \varepsilon\vec{E}$, то диэлектрическая проницаемость равна

$$\varepsilon^0 = 1 + 2\pi \frac{P_s}{E_{cr}}. \quad (52)$$

Из (52) видно, что в случае малых полей диэлектрическая проницаемость нижней среды является константой и не зависит от поля. Решение этой линейной задачи строится методом изображений и хорошо известно:

$$\varphi_{\text{нижн}}^{\text{мал}} = \frac{\gamma}{2\pi} \frac{2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \ln \frac{1}{R_{MM_h}}, \quad (53)$$

$$\varphi_{\text{верх}}^{\text{мал}} = \frac{\gamma}{2\pi\varepsilon_1} \ln \frac{1}{R_{MM_h}} + \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \ln \frac{1}{R_{MM_{-h}}}, \quad (54)$$

где $M_{-h} = \{0, -h\}$ и $M = \{x, y\}$. Величины ε_1 и ε_2 – диэлектрические проницаемости верхней и нижней сред соответственно. В нашем случае $\varepsilon_1 = 1$, а ε_2 определяется формулой (52).

4.6. Константы интегрирования

А. Вернемся к формуле (50) и отыщем константу C . С одной стороны, в случае малых полей вектор поляризации определяется формулой (51). Подставляя (51) в (50), получим выражение для малых полей в нижней полуплоскости

$$E_{\text{нижн}}^{\text{мал}} = \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{C}{\rho}, \quad (55)$$

где ε_2 находится из (52).

С другой стороны, мы можем продифференцировать (53) и получить то же поле E

$$E_{\text{нижн}}^{\text{мал}} = \frac{\gamma}{2\pi} \frac{2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{1}{\rho}. \quad (56)$$

Приравнявая (55) и (56), находим искомую константу интегрирования

$$C = \frac{\gamma}{2\pi} \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (57)$$

Для случая больших полей можно провести аналогичные рассуждения и найти, что $C_1 = C$.

Б. В ходе расчета потенциала промежуточного поля в нижней среде мы интегрируем напряженность по ρ , от $\rho_{\min} = h$ до текущего ρ_i :

$$\varphi_{\text{нижн}}^{\text{пром}}(\rho_i) = - \int_{\rho_{\min}}^{\rho_i} E_{\text{нижн}}^{\text{пром}}(\rho) d\rho. \quad (58)$$

Интеграл (58) вычислялся численно по квадратурной формуле трапеций:

$$\varphi_{\text{нижн}}^{\text{пром}}(\rho_i) \cong \sum_{n=0}^{i-1} \frac{h_n}{2} (E_n^{\text{пром}} + E_{n+1}^{\text{пром}}). \quad (59)$$

Здесь h_n – шаг сетки по ρ . Добавим к (58) аддитивную константу так, чтобы выполнялось условие на бесконечности. Напомним, что потенциал (58) должен переходить в таковой для линейной задачи (53).

Для этого был построен график зависимости модуля разности численного и аналитического (линейная задача) решений и производной этой разности от координаты ρ в двойном логарифмическом масштабе. Результаты показаны на рис. 7.

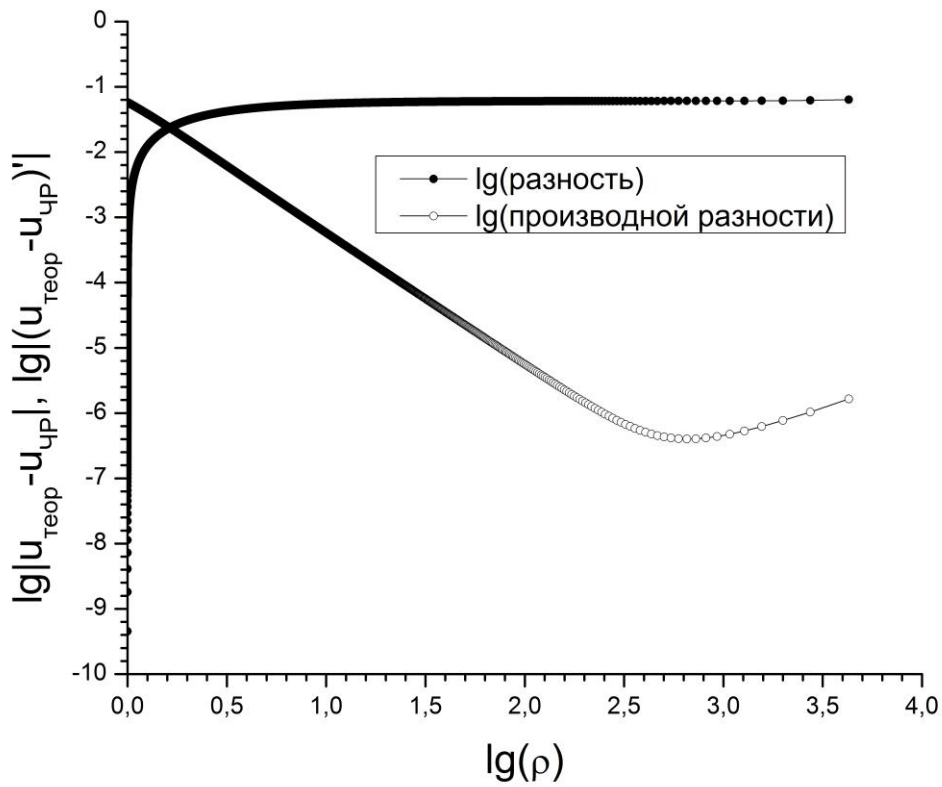


Рис. 7. К нормировке потенциала промежуточного поля.

Из графика видно, что разность решений выходит на константу, которая и является константой нормировки.

4.7. Верификация (нижняя полуплоскость)

Изобразим на одном графике решение задачи в нижней среде в случае больших полей (47), промежуточных полей (численное решение уравнения (50)) и малых полей (56). Результаты представлены на рис. 8.

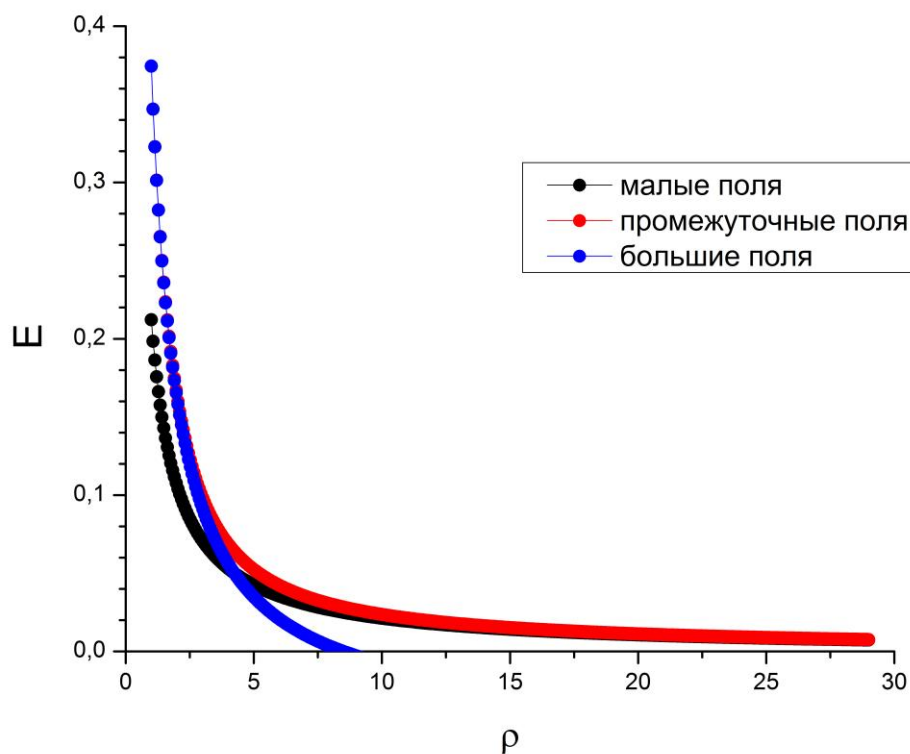


Рис. 8. Напряженность поля в нижней полуплоскости в зависимости от координаты ρ .

Из рис. 8 видно, что при малых ρ промежуточное поле переходит в большое, а при больших ρ – в малое. Аналогичный график можно построить и для потенциалов, если их отнормировать с помощью процедуры, описанной в параграфе 4.6, подпункте Б. Он проиллюстрирован на рис. 9. Потенциалы «склеиваются» так же, как и напряженности.

Таким образом, задача в нижней полуплоскости полностью решена. Корректность найденного нами решения в квадратурах (промежуточное поле и его потенциал) обеспечена правильными предельными переходами в частных случаях больших и малых полей.

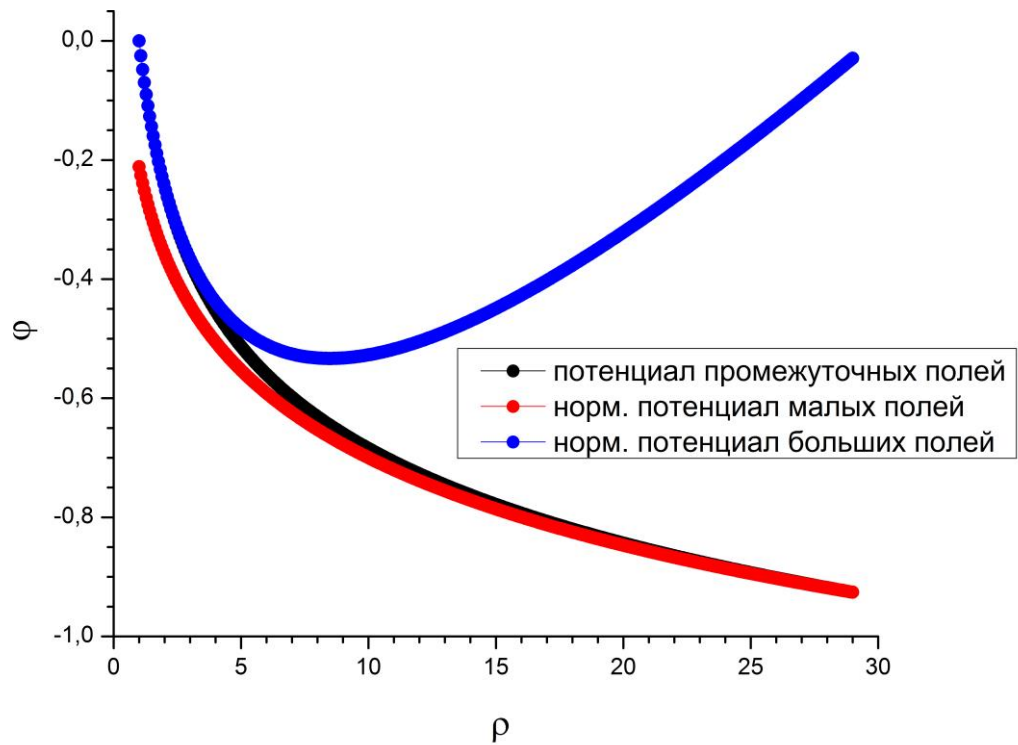


Рис. 9. Потенциал поля в нижней полуплоскости в зависимости от координаты ρ .

4.8. Верхняя полуплоскость. Третья формула Грина

В предыдущем параграфе мы полностью решили задачу в нижней полуплоскости. Следовательно, мы знаем потенциал и его производную на границе раздела. Тогда для нахождения потенциала в верхней полуплоскости мы можем воспользоваться третьей формулой Грина. В двумерном случае она имеет вид:

$$\varphi_{\text{верх}}(M_0) = \oint_L \left(G(P, M_0) \frac{\partial \varphi_{\text{верх}}(P)}{\partial n_p} - \varphi_{\text{верх}}(P) \frac{\partial G(P, M_0)}{\partial n_p} \right) dl_p - \int_D \Delta \varphi_{\text{верх}}(M) G(M, M_0) dS_M, \quad M_0 \in D, \quad (60)$$

где $G(P, M_0) \equiv \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{R_{PM_0}}$ – фундаментальное решение оператора Лапласа в

двумерном случае; $P = \{x_k, 0\}$ – точка на границе раздела двух сред,

$M_0 = \{x_i, y_j\}$ – произвольная точка выше границы раздела; n_p – нормаль к границе раздела.

Поскольку $\Delta\varphi_{\text{верх}}(M) = -\gamma\delta(M, M_h)$, где $M_h = \{0, h\}$ – точка нахождения заряда, то

$$-\int_D \Delta\varphi_{\text{верх}}(M)G(M, M_0)dS_M = \int_D \gamma\delta(M, M_h)G(M, M_0)dS_M = \gamma G(M_h, M_0). \quad (61)$$

Нормаль к границе раздела сонаправлена с осью y , а граница раздела является прямой $y = 0$, поэтому третья формула Грина преобразуется к виду

$$\varphi_{\text{верх}}(M_0) = \gamma G(M_h, M_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(G(P, M_0) \frac{\partial\varphi_{\text{верх}}(P)}{\partial y} - \varphi_{\text{верх}}(P) \frac{\partial G(P, M_0)}{\partial y} \right). \quad (62)$$

Мы уже знаем, как связаны потенциалы верхней и нижней сред на границе раздела (36), (38). Подставим эти граничные условия в (62), чтобы избавиться от неизвестного нам пока потенциала в верхней полуплоскости. В результате получим

$$\varphi_{\text{верх}}(M_0) = \gamma G(M_h, M_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(G(P, M_0) \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \frac{\partial\varphi_{\text{нижн}}(P)}{\partial y} - \varphi_{\text{нижн}}(P) \frac{\partial G(P, M_0)}{\partial y} \right). \quad (63)$$

Поскольку мы знаем напряженность поля нижней среды, мы можем выразить нормальную производную потенциала через неё. Однако удобней будет связать эту производную с нормальной компонентой вектора индукции:

$$\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \frac{\partial\varphi_{\text{нижн}}(P)}{\partial y} = -\frac{1}{\varepsilon_1} D_{\text{нижн}}^n(P). \quad (64)$$

Такая запись удобна, поскольку имеет единообразный вид для линейного и нелинейного случаев. Вектор индукции определяется формулой (46). Тогда его нормальная компонента (проекция на ось y) на границе раздела будет равна

$$D_{\text{нижн}}^n(P) = \frac{C}{\sqrt{x^2 + h^2}} \sin \varphi = C \frac{h}{x^2 + h^2}. \quad (65)$$

Теперь найдем производную от фундаментального решения оператора Лапласа

$$\frac{\partial G(P, M_0)}{\partial y} = -\frac{1}{2\pi} \frac{y_j}{(x_i - x)^2 + y_j^2}. \quad (66)$$

Подставим (66), (65), (64) в (63) и получим окончательную формулу, которую и будем использовать для дальнейших расчетов

$$\varphi_{\text{верх}}(M_0) = \gamma G(M_h, M_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(-G(P, M_0) \frac{C}{\varepsilon_1} \frac{h}{x^2 + h^2} + \varphi_{\text{нижн}}(P) \frac{1}{2\pi} \frac{y_j}{(x_i - x)^2 + y_j^2} \right). \quad (67)$$

Интегрирование в (67) ведется по всей числовой прямой. Очевидно, что в неограниченной области невозможно ввести равномерную сетку с конечным числом интервалов. Поэтому мы будем использовать следующую замену переменных:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \left| \begin{array}{l} x = \frac{\xi}{(1 - \xi^2)^m} \\ dx = \frac{1 - \xi^2 + 2m\xi^2}{(1 - \xi^2)^{m+1}} d\xi \end{array} \right| = \int_{-1}^1 f \left(\frac{\xi}{(1 - \xi^2)^m} \right) \frac{1 - \xi^2 + 2m\xi^2}{(1 - \xi^2)^{m+1}} d\xi. \quad (68)$$

Здесь m – числовой параметр. Было выбрано $m = 1.1$. Замена переменных (68) сводит интегрирование по всей прямой к интегрированию по отрезку $[-1, 1]$, на котором уже можно ввести равномерную сетку и использовать классические квадратурные формулы.

Теперь убедимся в правильности формулы (67) на простом примере.

4.9. Верификация (верхняя полуплоскость)

Как уже было сказано выше, в случае малых полей аналитическое решение хорошо известно (53), (54). Возьмем решение для нижней среды (53), подставим его в третью формулу Грина (67). Результат интегрирования должен совпасть с (54) с точностью до погрешности численного интегрирования.

На рис. 10 приведено численное решение в верхней полуплоскости, найденное по формуле (67) с заменой переменных (68). Величина относительной разности численного решения и решения линейной задачи (54) показана на рис. 11. Под относительной разностью мы понимаем величину

$$\eta \equiv \left| \frac{\varphi_{\text{числ}} - \varphi_{\text{теор}}}{\varphi_{\text{теор}}} \right|. \quad (69)$$

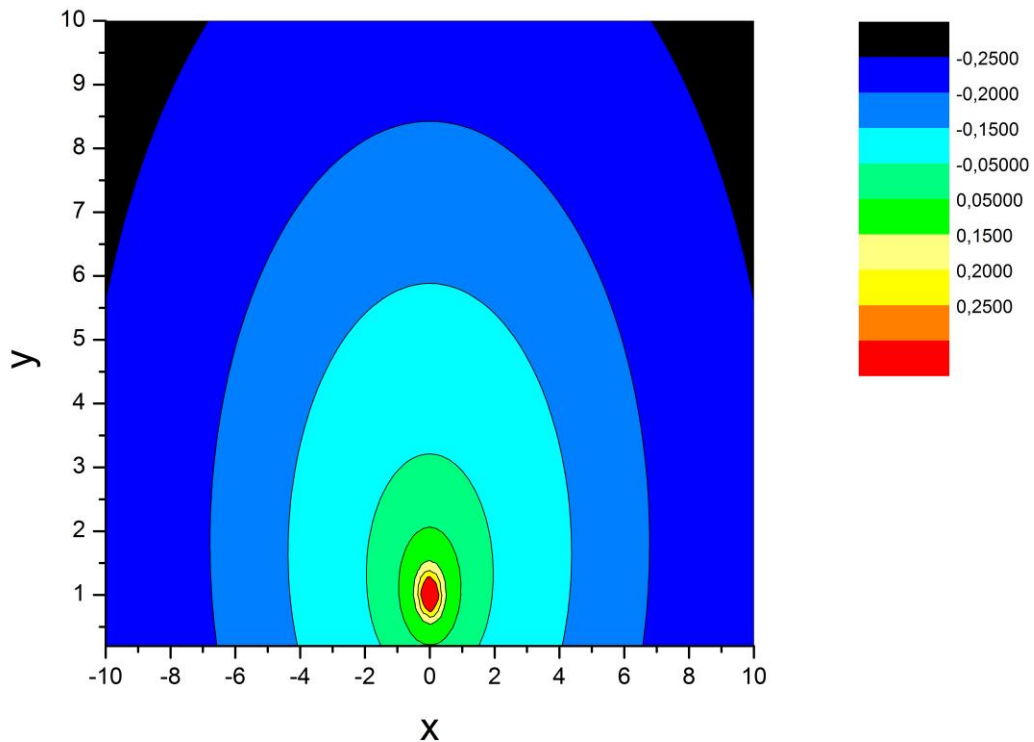


Рис. 10. Верификация. Численное решение в верхней среде.

Как видно из рис. 11, относительная разность численного и аналитического решений практически во всей области не превышает 0.1%. Следовательно, третья формула Грина применима в данной задаче для поиска решения в

верхней полуплоскости. Вернемся к исходной нелинейной задаче и отыщем решение в верхней среде.

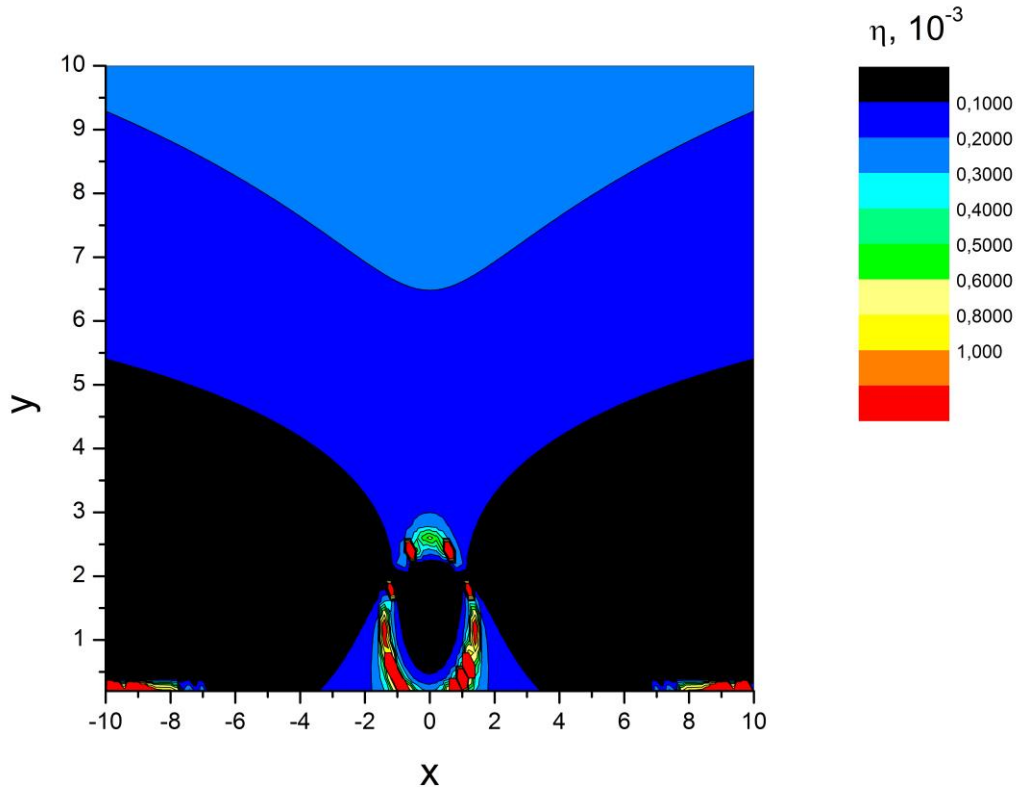


Рис. 11. Верификация. Относительная погрешность решения в верхней среде.

4.10. Примеры

Напомним еще раз алгоритм решения нелинейной задачи. Уравнение (50) численно решается методом Ньютона, в результате чего получается массив сеточных значений поля в нижней среде. С помощью (48) находятся значения потенциала нижней среды на всей сетке. Затем значения потенциала на границе подставляются в интеграл (67), который считается численно с заменой переменных (68). После данной процедуры мы отыщем потенциал поля верхней среды. Таким образом, задача полностью решена.

Графики распределения численно найденного потенциала во всем пространстве и относительной разности решений (69) приведены на рис. 12-19. Как и в параграфе 4.9, в качестве аналитического решения для сравнения были

выбраны малые поля (53), (54). При этом еще раз проверяется переход решения в асимптотику «малых» полей на достаточно большом расстоянии от заряда.

Из графиков видно, что при малом γ и (или) достаточном удалении заряда от границы раздела нелинейность незначительна. В этих случаях (рис. 17 и 19) численный расчет и аналитическое решение для малых полей (53), (54) достаточно близки. Относительная разность решений практически во всей области не превышает 5%. В других случаях (рис. 13 и 15) нелинейность значительна, и численное и аналитическое для малых полей решения сильно различаются. Однако видно, что при достаточном удалении от заряда вклад нелинейности уменьшается, и относительная разность решений становится меньше.

Отметим, что на границе раздела поле преломляется. Напряженность испытывает излом, а потенциал – разрыв. Это хорошо видно на приведенных далее рисунках.

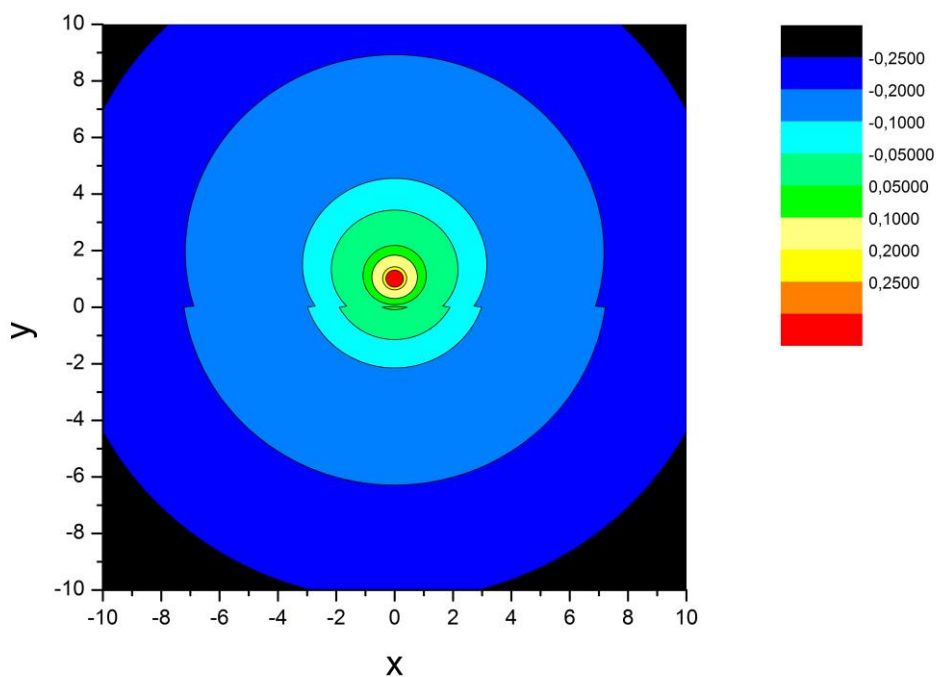


Рис. 12. Распределение потенциала; $h = 1$, $\gamma = 1$.

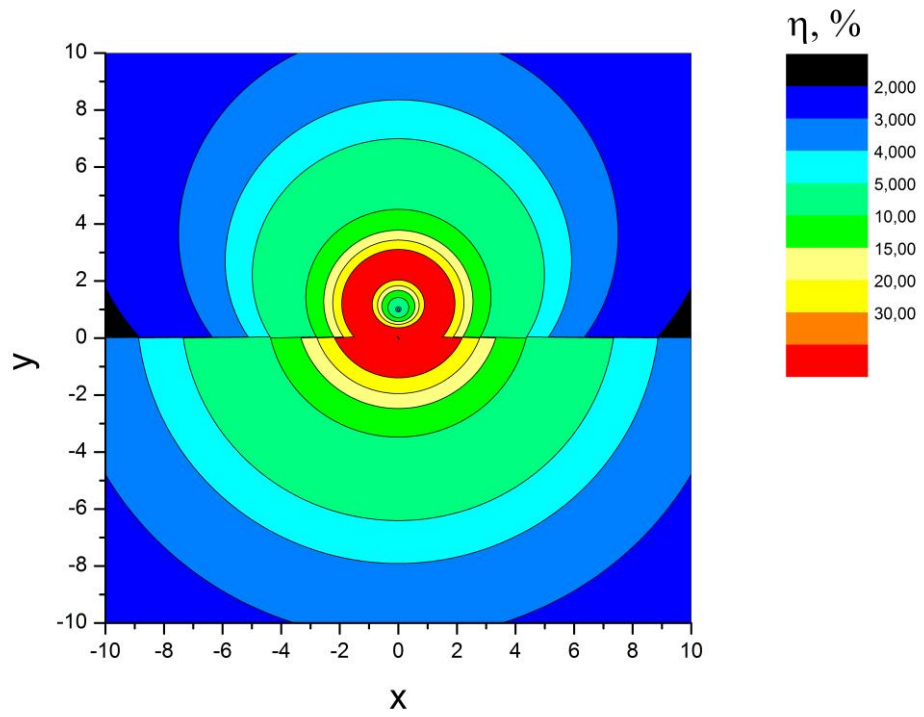


Рис. 13. Относительная разность решений; $h = 1, \gamma = 1$.

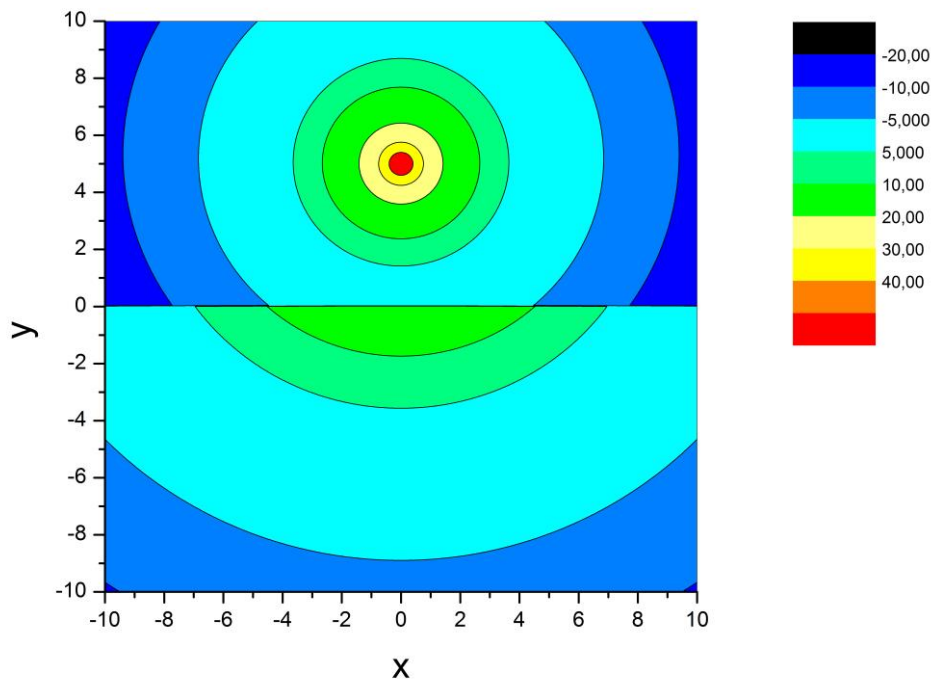


Рис. 14. Распределение потенциала; $h = 5, \gamma = 100$.

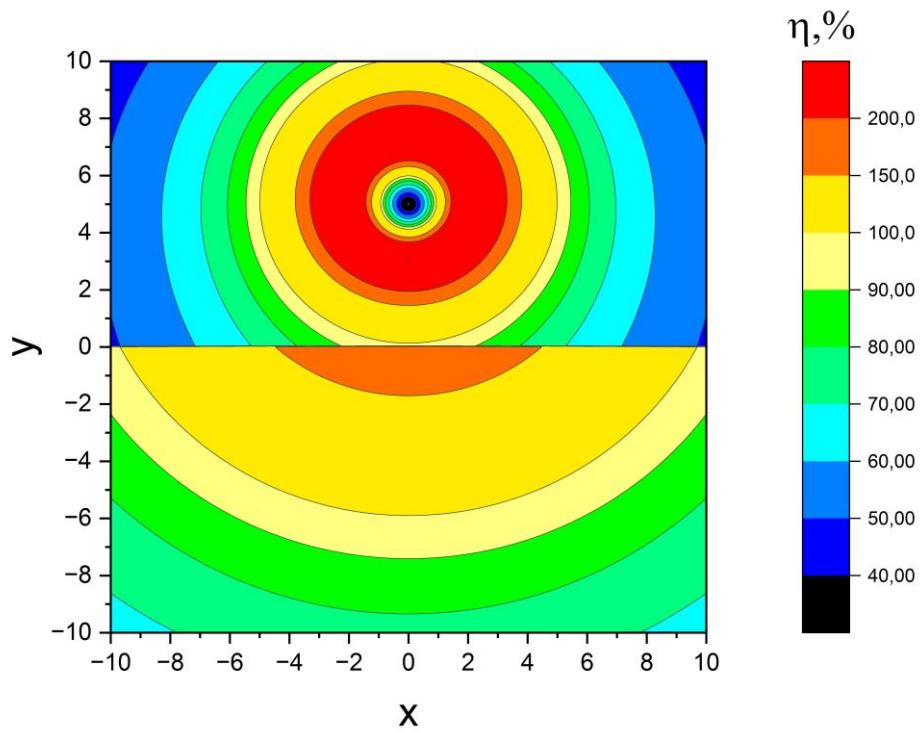


Рис. 15. Относительная разность решений; $h = 5$, $\gamma = 100$.

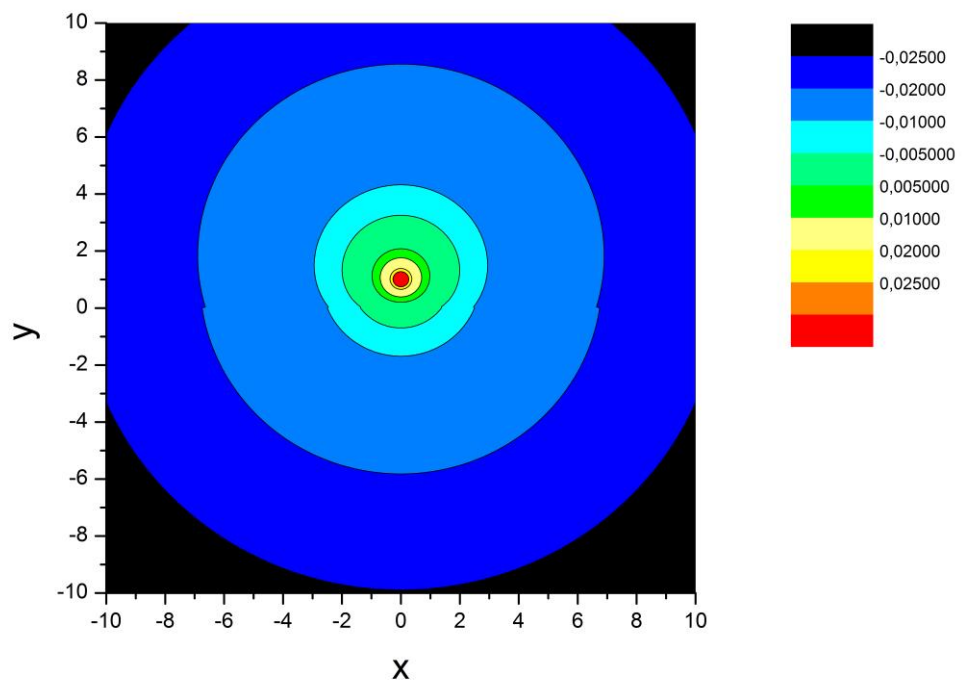


Рис. 16. Распределение потенциала; $h = 1$, $\gamma = 0.1$.

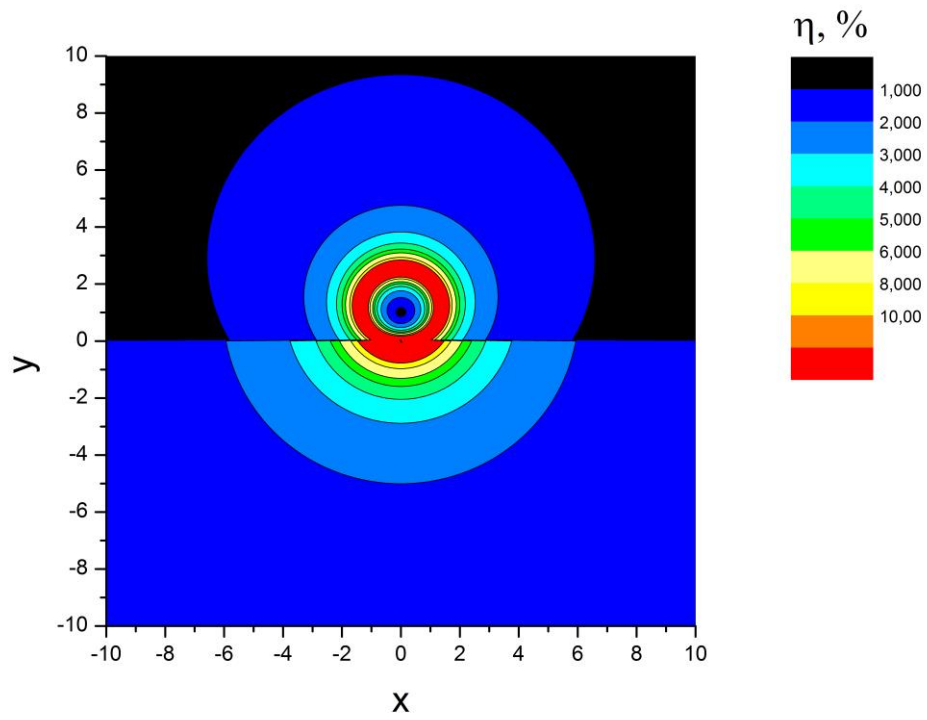


Рис. 17. Относительная разность решений; $h = 1$, $\gamma = 0.1$.

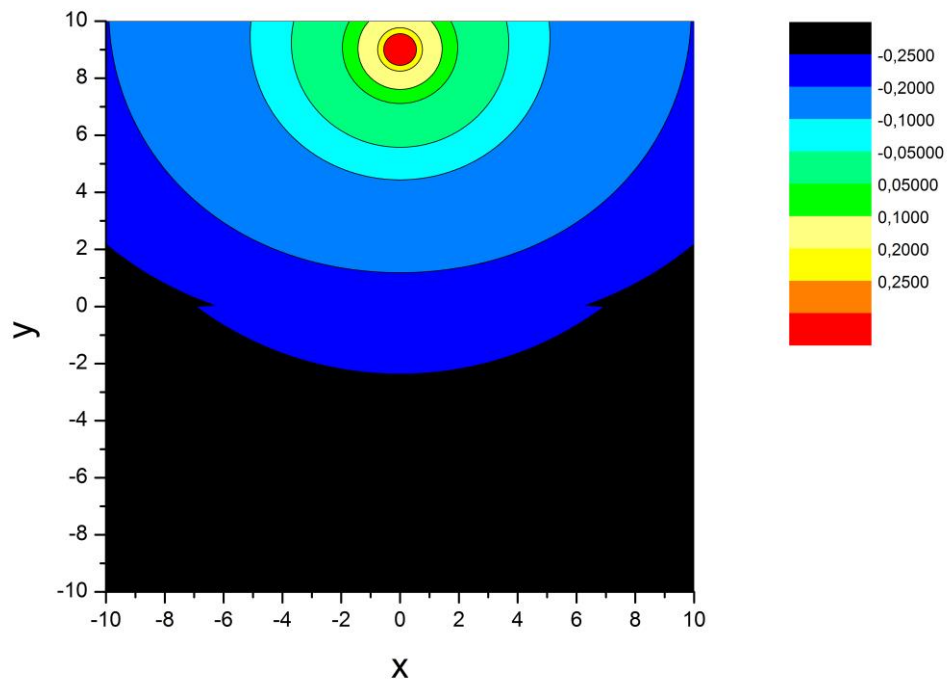


Рис. 18. Распределение потенциала; $h = 9$, $\gamma = 1$.

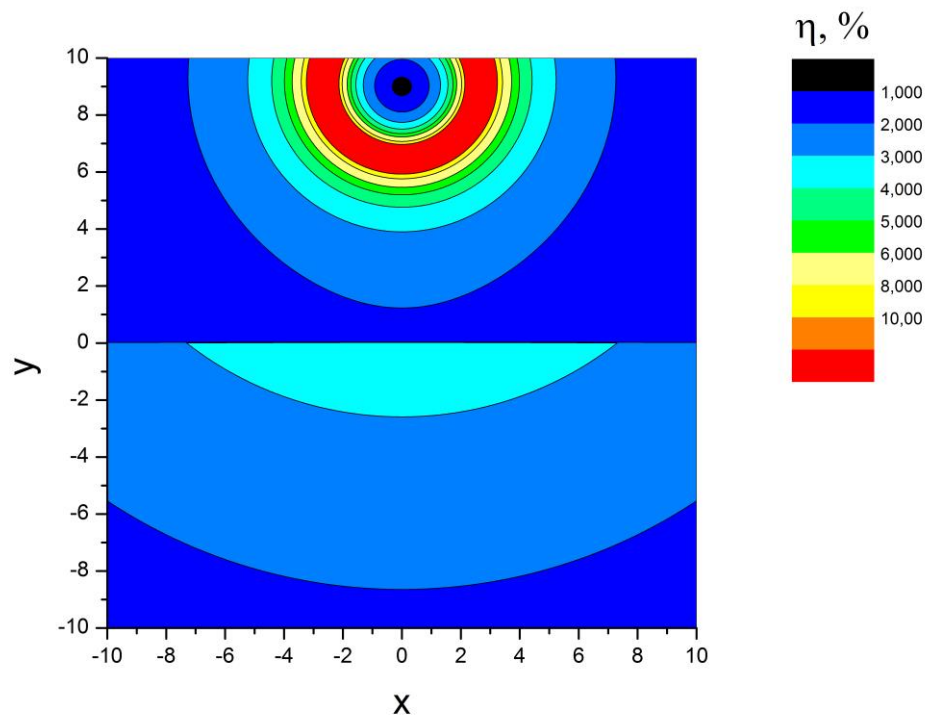


Рис. 19. Относительная разность решений; $h=9$, $\gamma=1$.

Заключение

В данной работе впервые предложены одномерные и многомерные квадратуры со сверхстепенной сходимостью для гладких подынтегральных функций, в том числе и неперiodических. Они основаны на использовании РЭ-замены переменных в интеграле. Применение РЭ-замены совместно с исключением разрывов производных (двойная замена) позволило еще больше ускорить сходимость.

Благодаря достижению сверхстепенной сходимости удалось построить апостериорные оценки точности, практически неотличимые от фактической погрешности. В методах МК такие оценки ранее были неизвестны.

Для вычисления многомерных кубатур были предложены усовершенствованные сетки Коробова, названные экстремальными. Их узлы распределены в гиперкубе существенно более равномерно, чем узлы классических сеток Коробова. Это положительно сказалось на точности вычисления кубатур. Для экстремальных сеток были найдены параметры, достаточные для вычисления интегралов размерности $2 \leq s \leq 12$ с точностью вплоть до ошибок округления.

Наконец, была рассмотрена прикладная задача о распределении электростатического поля, которое создается бесконечно тонкой заряженной нитью над плоской границей раздела «воздух-сегнетоэлектрик». Построено новое решение этой задачи в квадратурах. Эти квадратуры вычисляются с помощью предложенных в данной работе математических методов.

Список литературы

1. Калиткин Н.Н., Альшина Е.А. Численные методы. Т. 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
3. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
4. Дональд Кнут. Искусство программирования, том 2. Получисленные алгоритмы — М.: «Вильямс», 2007.
5. Fishman George S. Monte Carlo: concepts, algorithms and applications. — Springer, 1996.
6. Makoto Matsumoto, Takuji Nishimura. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator // ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS), Jan. 1998, v.8, №1, p. 3-30.
7. Takuji Nishimura. Tables of 64-bit Mersenne Twisters // ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation, October 2000, v. 10, № 4, p. 348-357.
8. Mersenne Twister Home Page [Электронный ресурс]. — URL <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/emt.html>
9. Park S.K., Miller K.W. Random Number Generators: Good Ones Are Hard to Find // Communications of the ACM. 1998. Vol. 31, No. 10. P. 1192–1201.
10. Mascagni, M., Srinivasan A. Parameterizing Parallel Multiplicative Lagged-Fibonacci Generators // Parallel Computing. 2004. Vol. 30. P. 899–916.
11. L'Ecuyer P. Good Parameter Sets for Combined Multiple Recursive Random Number Generators // Operations Research. 1999. Vol. 47, No. 1. P. 159–164.
12. Salmon, J.K., Moraes M.A., Dror R. O., Shaw D. E. Parallel Random Numbers: As Easy as 1, 2, 3 // Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC11). New York, NY: ACM, 2011.
13. Marsaglia G., Tsang W.W. The ziggurat method for generating random variables // Journal of Statistical Software. 2000. Vol. 5, P. 1–7.

14. Marsaglia, G., Zaman A. A new class of random number generators // *Annals of Applied Probability*. 1991. Vol. 1, No. 3. P. 462–480.
15. Wichmann B.A., Hill I.D. An efficient and portable pseudo-random number generator // *Applied Statistics*. 1982. Vol. 31, No. 2. P. 188–190.
16. Е.А. Цветков, Эмпирическое исследование статистических свойств некоторых генераторов псевдослучайных чисел // *Матем. Моделирование*. 2011. Т. 23, № 5, С. 81–94.
17. The Marsaglia Random Number CDROM including the Diehard Battery of Tests of Randomness [Электронный ресурс]. – URL <https://web.archive.org/web/20160125103112/http://stat.fsu.edu/pub/diehard/>
18. P. L'Ecuyer, R. Simard. TestU01: A C library for empirical testing of random number generators // *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, v. 33, issue 4, August 2007.
19. Rukhin, A., Soto J., Nechvatal. J. A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications. National Institute of Standards and Technology, NIST Special Publication 800-22.
20. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, М.А. Тинтул, Визуальная верификация генераторов псевдослучайных чисел // *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша*. 2019. № 137, С. 1-28.
21. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, М.А. Тинтул, Ненадежность известных генераторов псевдослучайных чисел // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2020. Т. 60, № 11, С. 1-8.
22. И.М. Соболев, Равномерно распределенные последовательности с дополнительным свойством равномерности // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1976. Т. 16, № 5, С. 1332–1337.
23. High dimensional Sobol' sequences [Электронный ресурс]. – URL <https://www.broda.co.uk/software.html>
24. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, М.А. Тинтул, Многомерные кубатуры на

- последовательностях Соболя // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2021. № 8, С. 1-24.
25. Коробов Н.М. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963.
26. Sag T.W., Szekeres G. Numerical Evaluation of High-Dimensional Integrals // Mathematics of Computation. 1964. Vol. 18, P. 245-253.
27. Sidi A. A new variable transformation for numerical integration // International Series of Numerical Mathematics. 1993. Vol. 112, P. 359-373.
28. Iri M., Moriguti S., Takasawa Y. On a certain quadrature formula // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1987. Vol. 17, P. 3-20.
29. Mori M. An IMT-Type Double Exponential Formula for Numerical Integration // Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University. 1978. Vol. 14, P. 713-729.
30. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, В.С. Хохлачев, Улучшенные оценки погрешности для экспоненциально сходящихся квадратур // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. № 75, С. 1-24.
31. В.С. Хохлачев, А.А. Белов, Н.Н. Калиткин, Улучшение оценок погрешности экспоненциально сходящихся квадратур // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Т. 85, № 2, С. 282-288.
32. Н.Н. Калиткин, П.В. Корякин, Одномерные и двумерные бикомпактные схемы в слоистых средах // Матем. моделирование. 2009. Т. 21, № 8, С. 44-62.