На правах рукописи

Рахматуллин Джангир Ялкинович

ИНТЕГРИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ ПО ВЫПУКЛЫМ ОБЛАСТЯМ РЕШЕТЧАТЫМИ КУБАТУРНЫМИ ФОРМУЛАМИ НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

01.01.07 — вычислительная математика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Красноярск — 2006

Работа выполнена в Институте математики с вычислительным центром Уфимского научного центра РАН.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор **Рамазанов Марат Давидович**
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, доцент **Осипов Николай Николаевич**
	доктор физико-математических наук, доцент **Васкевич Владимир Леонтьевич**
Ведущая организация:	Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (г. Москва)

Защита состоится 21 декабря 2006 в 14 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета К 212.098.03 при Красноярском государственном техническом университете по адресу: 660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд. Г 4-17, факс (8-3912) 43-06-92, тел. 49-76-46.

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале библиотеки Красноярского государственного технического университета.

Автореферат разослан «____» ноября 2006.

Ученый секретарь
диссертационного совета **К. В. Сафонов**

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. *Кубатурной формулой* $K_N^{\Omega}(f)$ называется линейный функционал, задающий приближенное значение интеграла $I^{\Omega}(f) \stackrel{def}{=} \int\limits_{\Omega} dx f(x)$ по многомерной области Ω в виде линейной комбинации значений функции f в N произвольных точках — узлах кубатурной формулы:

$$I^{\Omega}(f) \approx K_N^{\Omega}(f) \stackrel{def}{=} \sum_{k=1}^{N} c_{k,N} f(x^{(k)}), \quad \left\{x^{(k)}\right\}_{k=\overline{1,N}} \in \mathbb{R}^n. \qquad (0.1)$$

Теория кубатурных формул и их одномерных аналогов — квадратурных формул является хорошо развитой областью математического анализа и вычислительной математики. Данным научным направлением занималось множество математиков — известны работы И. Ньютона, Л. Эйлера, К. Гаусса, Ш. Эрмита, русских и советских математиков П. Л. Чебышева, С. Н. Бернштейна, С. Л. Соболева, С. Н. Никольского и других. Теория квадратурных и кубатурных формул продолжает интенсивно развиваться и на сегодняшний день — по данной тематике публикуется множество работ и регулярно проводятся научные конференции.

Весомый вклад в разработку теории приближенного интегрирования внес С. Л. Соболев. Важное место в его исследованиях занимало применение методов функционального анализа к оценкам погрешностей интегрирования.

Многие ученые, в частности, Н. С. Бахвалов, В. Н. Белых, О. В. Бесов, И. В. Бойков, В. Л. Васкевич, Я. М. Жилейкин, М. В. Носков, Н. Н. Осипов, В. И. Половинкин, М. Д. Рамазанов, Г. Н. Салихов, И. М. Соболь, Ц. Б. Шойнжуров занимались разработкой теории квадратурных и кубатурных формул в функциональных пространствах.

Несмотря на множество работ по данной теме, на сегодняшний день существуют актуальные задачи, связанные как непосредственно с теорией формул С. Л. Соболева, так и с ее приложениями в компьютерных вычислениях.

В частности, актуальной является проблема приближенного вычисления интегралов большой кратности, для решения которой в данный момент используются, в основном, методы интегрирования типа Монте-Карло, имеющие, однако, слабые стороны.

Поэтому главной проблемой, решаемой в диссертации, является необходимость программной реализации какого-либо из развитых на данный момент теоретических методов, преодолевающая недостатки программ интегрирования, использующихся на сегодняшний день.

Актуальность проблемы обусловлена следующими факторами:

1) большой прикладной значимостью приближенного вычисления интегралов по областям больших размерностей

2) потребностью в реализации алгоритмов, имеющих гарантированные оценки точности результатов вычислений и высокую скорость сходимости

3) необходимостью эффективного использования современной вычислительной техники

4) потребностью в стандартных прикладных программах, вычисляющих интегралы с достаточной точностью за разумное время

Результаты диссертации послужили основой отчетов по Программе № 17 фундаментальных исследований Президиума РАН «Параллельные вычисления на многопроцессорных вычислительных системах», по грантам РФФИ № 03-07-90077-в «Создание библиотек программ для персональных и суперЭВМ» и № 02-01-01167-а «Теория приближенного вычисления многомерных интегралов».

Целью работы является:

1) Решение задачи численного интегрирования функций по многомерным областям. В качестве теоретической базы используется аппарат решетчатых кубатурных формул с ограниченным пограничным слоем. Посредником, обеспечивающим преобразование математического алгоритма в машинный, является язык программирования C++ с библиотекой параллельных функций MPI[1] . Конечным результатом

[1] См. Рахматуллин Д.Я. «Введение в MPI». - Уфа: РИЦ БашГУ, 2006., Том 1.

является стандартная параллельная программа, предназначенная для использования в суперкомпьютерах с MPP (Massively Parallel Processing - массовый параллелизм) архитектурой — многопроцессорных системах с распределенной памятью.

2) Теоретическое исследование решеток узлов, дающих наилучший порядок приближения для оптимальных кубатурных формул в неизотропном пространстве $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$

Научная новизна. В диссертации получены следующие основные научные результаты:

1) *Модифицирован алгоритм* М. Д. Рамазанова нахождения коэффициентов кубатурной формулы с ограниченным пограничным слоем, имеющей универсальные асимптотические свойства на классе пространств.

2) Предложенный алгоритм *преобразован* в алгоритм для использования на многопроцессорных вычислительных системах; он реализован в виде параллельной программы, эффективно использующей возможности передовых технологий (суперкомпьютеров), языков программирования (C++ и MPI) и превосходящей имеющиеся аналоги по показателям точности, быстродействия, а также размерности пространства интегрирования.

3) Предложен новый способ построения решеток узлов в пространстве неизотропной гладкости $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$, на которых оптимальные формулы имеют наилучший порядок приближения. При этом обнаружено новое явление, связанное с приближением функций из неизотропных классов функциями дискретных аргументов на изотропных решетках. Исследованы свойства нового способа в сравнении с уже существующими, сделаны оценки его вычислительных свойств, которые подтверждены вычислительным экспериментом.

Основные полученные результаты являются новыми.

Методика исследования. В диссертации используются методы функционального анализа, вычислительной математики и теории приближенного интегрирования.

Теоретическая и практическая ценность. Результаты диссертации могут быть использованы в задачах, требующих достаточно быстрого и точного счета многомерных интегралов с размерностями до 10. Предложенный способ построения решеток узлов в пространстве неизотропной гладкости $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$ может использоваться как в теоретических исследованиях, так и вычислительных разработках.

Личный вклад автора. Все исследования и разработки программ выполнены автором лично и опубликованы впервые. В работах, выполненных в соавторстве, вклады соавторов примерно равны.

Апробация результатов. Основные результаты работы были доложены и получили положительную оценку на следующих конференциях: «Кубатурные формулы и их приложения», VIII Международный семинар-совещание 15-22 августа 2005 года. г. Улан-Удэ; «V Региональная школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике и физике», Уфа, БашГУ, 27-28 октября 2005 года; «Международная уфимская зимняя школа-конференция по математике и физике с участием студентов, аспирантов и молодых ученых», Уфа, БашГУ, 30 ноября - 06 декабря 2005 года; «VI Всероссийская молодежная школа-конференция „Численные методы решения задач математической физики"», Казань, НИИММ, 26 июня – 1 июля 2006 года.

Публикации. Основное содержание диссертации отражено в 5 научных работах, одна из которых опубликована в научном журнале, включенном в Перечень ВАК.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, двух разделов, заключения, библиографического списка, включающего 50 наименований, и 2 приложений. Работа изложена на 114 листах машинописного текста, содержит 17 рисунков и 13 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении определяются объект, предмет, цели и методы исследования, дается краткая история вопроса и обзор существующих методов построения кубатурных формул, их достоинства и недостатки.

Существующие недостатки порождают проблему: необходима программная реализация какого-либо из развитых на данный момент теоретических методов, преодолевающая слабые стороны существующих программ. Излагаются основные положения актуальности проблемы. Перечисляются результаты, выносимые на защиту.

1. Численное интегрирование по многомерным областям

В первом разделе дается общая постановка проблемы, алгоритм решетчатых кубатурных формул с ограниченным пограничным слоем, приводится описание составленной программы, вычислительные эксперименты и анализ результатов тестирования.

Пусть задана ограниченная область $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ с гладкой границей $\partial\Omega$.

Рассмотрим пространство Соболева $\widetilde{W}_p^m(Q),\ p > 1,\ m > \frac{n}{p}$ периодических функций, интегрируемых с p-ой степенью вместе с производными до m-го порядка включительно, в одной из эквивалентных норм:

$$\|g\|_{\widetilde{W}_p^m(Q)} \overset{def}{=} \left(|g_0|^p + \int\limits_Q dx \left| \sum_{k\in\mathbb{Z}^n\setminus\{0\}} g_k \ (1+|2\pi k|)^{m/2} e^{2\pi i x k} \right|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \tag{0.2}$$

$$g(x) \overset{def}{=} \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} g_k e^{2\pi i x k}, \qquad g_k \overset{def}{=} \int\limits_Q dx\ g(x) e^{-2\pi i x k}, \tag{0.3}$$

где Q — единичный гиперкуб: $Q \overset{def}{=} \{x :\ x_i \in [0;\,1),\ i = \overline{1,n}\,\}$.

Взяв это пространство за основу, построим новое пространство $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ с нормой

$$\|f\|_{\widetilde{W}_p^m(\Omega)} \overset{def}{=} \inf_{\substack{g|_\Omega = f|_\Omega,\\ g\in\widetilde{W}_p^m(Q)}} \|g\|_{\widetilde{W}_p^m(Q)}. \tag{0.4}$$

Требуется приближенно вычислить интеграл произвольной функции $f \in \widetilde{W}_p^m(\Omega)$ по области $\Omega \subset Q$.

Мы решаем эту задачу путем приближения интеграла решетчатыми кубатурными формулами с ограниченным пограничным слоем (ОПС-формулами). Поясним эти термины.

Решеткой узлов назовем множество $\{hHk\}_{k\in\mathbb{Z}^n}$, где $h\in\mathbb{R}$, $h>0$, H — матрица $n\times n$, $\det H = 1$. Устремив h к нулю, получим последовательность решеток со сгущающимися узлами. Мы будем рассматривать частный случай — $H\equiv I$, т.е. последовательность решеток $\{hk\}_{k\in\mathbb{Z}^n}$, называемую *прямоугольной (кубической)*. Заметим, что выбор решетки вполне согласуется с изотропностью нашего пространства — функции из него по всем направлениям имеют одну и ту же гладкость m.

Кубатурной формулой (КФ) $K_N^\Omega(f)$ назовем линейный функционал, задающий приближенное значение интеграла $I^\Omega(f)\stackrel{def}{=}\int\limits_\Omega dx f(x)$ в виде линейной комбинации значений функции $f\in\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ в N произвольных точках — узлах кубатурной формулы:

$$K_N^\Omega(f)\stackrel{def}{=}\sum_{k=1}^N c_{k,N}f(x^{(k)}),\quad \left\{x^{(k)}\right\}_{k=\overline{1,N}}\in\mathbb{R}^n. \tag{0.5}$$

КФ называется *решетчатой*, если ее узлы лежат на решетке узлов.

Мы будем рассматривать последовательности решетчатых кубатурных формул $\left\{K_h^\Omega(f)\right\}$, соответствующие последовательностям решеток со сгущающимися узлами $\{hk\}_{k\in\mathbb{Z}^n}$, $h\to 0$:

$$K_h^\Omega(f)=h^n\sum_{hk\in\Omega}c_k(h)f(hk),\quad h\to 0. \tag{0.6}$$

Здесь за знак суммы вынесен масштабный множитель h^n, равный объему элементарной (наименьшей) ячейки, образуемой узлами решетки.

Для согласовывания решетки узлов с периодичностью функции из пространств $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ накладывается ограничение, носящее технический характер: $h\to 0$ так, что $\frac{1}{h}$ остается целым числом.

Будем говорить, что КФ обладает *ограниченным пограничным слоем* (ОПС), если выполнены следующие два условия:

1) коэффициенты КФ равномерно ограничены по k и h :

$$\exists\ L_1:\quad \sup_{k,\ h}|c_k(h)|<L_1\ ; \tag{0.7}$$

2)
$$\exists\, L_2: \quad \forall h,\ k: (\rho(hk, \mathbb{R}^n \backslash \Omega) \geqslant L_2 h) \Rightarrow c_k(h) = 1, \tag{0.8}$$
т.е. при любом фиксированном h все коэффициенты, соответствующие узлам решетки, расположенным внутри области Ω достаточно глубоко — на расстоянии, не меньшем $L_2 h$ от границы, равны единице.

Отметим, что выбор решетчатых КФ позволяет достичь необходимой универсальности и единообразия в интегрировании по областям произвольных форм вследствие того, что последовательности решеток не зависят от форм областей интегрирования. Использование же КФ с ОПС позволяет, не сильно сужая выбор КФ, использовать алгоритмы вычисления коэффициентов формул с хорошими и теоретически обоснованными аппроксимационными свойствами.

Для оценки качества КФ введем понятие функционала погрешности (ФП). *Функционалом погрешности* $l_h^\Omega(f)$, соответствующим КФ $K_h^\Omega(f)$, называется линейный функционал, представляющий собой разность точного значения интеграла $I^\Omega(f)$ функции по области Ω и кубатурной формулы $K_h^\Omega(f)$:
$$l_h^\Omega(f) \stackrel{def}{=} I^\Omega(f) - K_h^\Omega(f) \tag{0.9}$$
или в виде обобщенной функции:
$$l_h^\Omega(x) = \chi_\Omega(x) - \sum_{\substack{hk\in\Omega,\\ k\in\mathbb{Z}^n}} c_k(h)\delta(x - hk), \tag{0.10}$$
где $\chi_\Omega:\ f \mapsto \int dx \chi_\Omega(x) f(x) \equiv \int\limits_\Omega dx f(x)$.

Мы также будем опускать слово «последовательность» для последовательностей функционалов погрешности, соответствующих последовательностям кубатурных формул (ПКФ), отмечая лишь стремление h к нулю.

В качестве численного показателя точности приближения интеграла кубатурной формулой берется норма соответствующего ФП в пространстве, сопряженном пространству подынтегральных функций:
$$\|l_h^\Omega\|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}. \tag{0.11}$$

Желание использовать лучшие для данной последовательности решеток кубатурные формулы приводит нас к понятию оптимальной КФ, а также асимптотически оптимальной и оптимальной по порядку КФ.

КФ, минимизирующая при любом фиксированном h нормы элементов соответствующего ФП, называется *оптимальной*:

$$K_h^{\Omega,opt} \stackrel{def}{=} \arg \min_{K_h^\Omega} \left\| I^\Omega - K_h^\Omega \right\|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*} \equiv \arg \min_{K_h^\Omega} \left\| l_h^\Omega \right\|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}. \tag{0.12}$$

На практике оптимальные КФ трудновычислимы, поэтому часто ограничиваются рассмотрением КФ, имеющим оптимальные свойства лишь в пределе, при $h \to 0$.

КФ $K_h^{\Omega,as}$ называется *асимптотически оптимальной*, если выполняется равенство:

$$\lim_{h\to 0} \frac{\| I^\Omega - K_h^{\Omega,as} \|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}}{\| I^\Omega - K_h^{\Omega,opt} \|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}} = 1. \tag{0.13}$$

КФ $K_h^{\Omega,ord}$ называется *оптимальной по порядку*, если

$$\exists\, C: \ \overline{\lim_{h\to 0}} \frac{\| I^\Omega - K_h^{\Omega,ord} \|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}}{\| I^\Omega - K_h^{\Omega,opt} \|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*}} \leqslant C. \tag{0.14}$$

Зададимся произвольным целым числом M, таким, что $M > \frac{n}{p}$. М. Д. Рамазановым создан **алгоритм** вычисления КФ, оптимальной по порядку на каждом из пространств $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ с $m = \left(\frac{n}{p}, M\right)$, т.е. *универсально оптимальной по порядку* на этом классе пространств. Как следствие, для любого из этих пространств будет верна следующая оценка нормы соответствующего ФП:

$$\exists\, C: \quad \| l_h^\Omega \|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*} \leqslant C h^m, \quad h \to 0. \tag{0.15}$$

Такая КФ также будет являться *универсально асимптотически оптимальной.*

Теорема (М.Д. Рамазанов)**.** *ПКФ с ОПС асимптотически оптимальна на каждом пространстве из множества*

$$\left\{ \widetilde{W}_p^m(\Omega) \right\}_{\substack{m\in(m_1,m_2),\\ p\in(p_1,p_2)}} \tag{0.16}$$

тогда и только тогда, когда она оптимальна на каждом из них по порядку, при $\frac{n}{p} < m_1 < m_2 < M,\ 1 < p_1 < p_2 < \infty.$

Алгоритм дает явные выражения коэффициентов последовательности кубатурных формул для ограниченной области Ω с кусочно гладкой границей. При этом область предполагается разбитой на участки, каждый из которых имеет явную формулу для границы, которая может быть гладко и взаимнооднозначно спроектирована на одну из координатных плоскостей.

Алгоритм был доработан и оптимизирован диссертантом. Приведем его окончательный вид.

Пусть Ω — выпуклая область, лежащая внутри единичного гиперкуба вместе с замыканием: $\overline{\Omega} \subset \operatorname{int} Q$, а параметр h стремится к нулю по одной из последовательностей, каждый член которой можно представить в виде N^{-1}, где $N \in \mathbb{N}$.

Алгоритм основан на сведении задачи интегрирования по области с гладкими границами к нескольким однотипным задачам интегрирования по единичному гиперкубу. Эту последнюю задачу решает функционал погрешности

$$q_h^Q(x) \stackrel{def}{=} \sum_{hk\in Q} \lambda\left(\frac{x}{h} - k\right), \tag{0.17}$$

где

$$\lambda(x) \stackrel{def}{=} \chi_Q(x) - \sum_{s\in S} a_s\delta(x-s). \tag{0.18}$$

Здесь $x \in \mathbb{R}^n,\ S \subset \mathbb{Z}^n,\ S$ — конечное множество, в качестве которого мы берем

$$S \stackrel{def}{=} S_1 \times \ldots \times S_n, \quad S_1 \equiv \ldots \equiv S_n \stackrel{def}{=} \{1, \ldots, M+1\}. \tag{0.19}$$

На функционал $\lambda(x)$ накладывается ограничение — он должен иметь порядок M, т.е. удовлетворять условию

$$(\lambda(x), x^\alpha) \equiv 0, \quad |\alpha| \leqslant M, \tag{0.20}$$

где α — мультииндекс.

Тогда ФП $q_h^Q(x)$ является оптимальным по порядку на функциях из пространств $W_p^m(\mathbb{R}^n), \widetilde{W}_p^m(Q)$ и имеет порядок $O(h^m)$:

$$\|q_h^Q\|_{(\widetilde{W}_p^m(Q))^*} \asymp O(h^m), \tag{0.21}$$

где символ $\asymp$ обозначает двустороннюю оценку.

Случай Ω — произвольной области с гладкой границей $\partial\Omega$, вложенной в единичный гиперкуб Q, сводится к разобранному случаю следующим образом.

Для нашей области всегда можно подобрать специальное разбиение единицы — конечный набор функций (будем называть их *срезывающими*), удовлетворяющий условиям:

1) они являются периодическими с основным периодом Q и в сумме составляют функцию, тождественно равную единице в периодически продолженной с основным периодом Q фиксированной окрестности $\hat{\Omega}$ области Ω, целиком лежащей в гиперкубе Q;

2) они принадлежат пространству $\widetilde{C}^M(Q)$;

3) носитель[1] одной из срезывающих функций лежит полностью внутри области Ω, не пересекаясь с ее границей; пересечение носителя каждой из остальных срезывающих функций с границей $\partial\Omega$ непусто и гладко (класса C^M) и взаимно однозначно проектируется на одну из координатных гиперплоскостей;

Примем количество срезывающих функций за $\mathrm{T}+1$. Обозначим их как

$$\{\varphi_\tau(x)\}_{\tau=0}^{\mathrm{T}}, \qquad \sum_{\tau=0}^{\mathrm{T}} \varphi_\tau(x)|_{x\in\hat{\Omega}} \equiv 1. \tag{0.22}$$

Функцию $\varphi_0(x)$ подберем так, чтобы множество точек E_{φ_0}, где она равна единице, находилось не ближе, чем на расстоянии $\varepsilon_0 < \frac{1}{2}$ от границы области:

$$\rho(E_{\varphi_0}, \mathbb{R}^n \backslash \Omega) \geqslant \varepsilon_0, \quad E_{\varphi_0} \stackrel{def}{=} \{x : \ \varphi_0(x) \equiv 1\}. \tag{0.23}$$

Введем обозначения $\Upsilon_\tau \stackrel{def}{=} \operatorname{supp}\varphi_\tau \cap \overline{\Omega}$ и $\Gamma_\tau \stackrel{def}{=} \operatorname{supp}\varphi_\tau \cap \partial\Omega$.

[1]Для удобства под носителем срезывающей функции будем иметь ввиду лишь одну из ее связных компонент, лежащую в гиперкубе Q.

Интеграл $\int\limits_{\Omega} dx f(x)$ можно представить в виде суммы интегралов:

$$\int\limits_{\Omega} dx f(x) \equiv \sum_{\tau=0}^{\mathrm{T}} \int\limits_{\Upsilon_\tau} dx\ \varphi_\tau(x) f(x). \tag{0.24}$$

Для удобства программной реализации, область Ω будем задавать неявно — как множество точек, где неотрицательна гладкая функция $\Phi(x)$:

$$\Omega \stackrel{def}{=} \{x:\ \Phi(x) \geqslant 0\}, \quad \Phi(x) \in C^M(Q). \tag{0.25}$$

При этом граница задается как

$$\partial\Omega \stackrel{def}{=} \{x:\ \Phi(x) = 0\}. \tag{0.26}$$

Пусть градиент функции $\Phi(x)$ на границе не обращается в ноль:

$$\nabla\Phi(x)|_{\partial\Omega} \neq 0. \tag{0.27}$$

Наложенных на $\Phi(x)$ условий достаточно для того, чтобы уравнение для каждого из участков границы в достаточно малой окрестности каждой точки границы можно было разрешить относительно координаты, задающей направление, ортогональное гиперплоскости, на которую мы гладко проектируем Γ_τ :

$$\forall\tau\ \exists j_\tau,\ \exists\gamma_\tau(\hat{x}_{j_\tau}): \quad \Gamma_\tau \equiv \{x \in \Upsilon_\tau:\ x_{j_\tau} = \gamma_\tau(\hat{x}_{j_\tau})\}, \tag{0.28}$$

где $\hat{x}_{j_\tau} \stackrel{def}{=} (x_1, \ldots, x_{j_\tau - 1}, x_{j_\tau + 1}, \ldots, x_n)$.

Если каждой области Υ_τ сопоставить ФП

$$l_h^{\Upsilon_\tau}(x) \stackrel{def}{=} \chi_{\Upsilon_\tau}(x) - \sum_{\substack{hk \in \Upsilon_\tau, \\ k \in \mathbb{Z}^n}} c_k^\tau(h)\delta(x - hk), \tag{0.29}$$

то общий функционал погрешности можно собрать из таких функционалов следующим образом:

$$l_h^\Omega(x) \stackrel{def}{=} \sum_{\tau=0}^{\mathrm{T}} \varphi_\tau(x) l_h^{\Upsilon_\tau}(x). \tag{0.30}$$

При этом коэффициенты $c_k(h)$ функционала погрешности $l_h^\Omega(x)$ получаются следующим образом:

$$c_k(h) = \sum_{\tau=0}^{\mathrm{T}} \varphi_\tau(x) c_k^\tau(h). \tag{0.31}$$

Так как в определении ФП $l_h^{\Omega}(x)$ каждый ФП $l_h^{\Upsilon_\tau}(x)$ умножен на срезывающую функцию $\varphi_\tau(x)$, мы можем в дальнейшем доопределять $l_h^{\Upsilon_\tau}(x)$ вне $\operatorname{supp} \varphi_\tau(x)$, не изменяя итоговой суммы.

Для того, чтобы ФП $l_h^{\Omega}(x)$ был оптимальным по порядку в $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$, достаточно оптимальности по порядку каждого из функционалов $l_h^{\Upsilon_\tau}(x)$. Ниже для произвольного τ подберем коэффициенты $c_k^\tau(h)$ так, чтобы выполнялось $\|l_h^{\Upsilon_\tau}\|_{(\widetilde{W}_p^m(\Omega))^*} \asymp O(h^m)$.

Для определенности, во-первых, будем предполагать, что уравнение для границы Γ_τ задается функцией, выражающей последнюю координату вектора x через остальные:

$$\Gamma_\tau \stackrel{def}{=} \{x \in \Upsilon_\tau : \ x_n = \gamma(x')\}, \quad x' \stackrel{def}{=} (x_1, \ldots, x_{n-1}). \tag{0.32}$$

Во-вторых, пусть

$$x_n \geqslant \gamma(x'), \quad \forall x \in \Upsilon_\tau. \tag{0.33}$$

Тогда искомые коэффициенты локальной КФ выражаются следующей формулой[1]:

$$c_k^\tau(h) = \begin{cases} \sum\limits_{p=1}^{M+1} \frac{1}{p} \sum\limits_{i=1}^{M+1} \eta^{i-1} \sum\limits_{z=1}^{\min\{k_n-\sigma-1, M+1\}} v_{zi} \sum\limits_{r=1}^{\min\{k_n-\sigma-z, M+1\}} v_{rp}, & k_n \geqslant 2+\sigma \\ 0, & k_n \leqslant 1+\sigma. \end{cases} \tag{0.34}$$

Здесь $\{v_{ij}\}_{ij}^{M+1}$ — элементы матрицы, обратной к матрице, имеющей определитель Вандермонда:

$$\begin{pmatrix} 1^0 & 2^0 & \ldots & (M+1)^0 \\ 1^1 & 2^1 & \ldots & (M+1)^1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1^M & 2^M & \ldots & (M+1)^M \end{pmatrix}, \tag{0.35}$$

а σ и η — целая и дробная части числа $\frac{\gamma(hk')}{h}$.

Итоговые коэффициенты находятся по формуле (0.31).

[1] См. Рамазанов М.Д. Лекции по теории кубатурных формул. — Уфа: Изд-во БашГУ, 1973. — 177 с.

Формула (0.34) для ускорения счета изменена диссертантом следующим образом:

$$c_t^\tau(h) = \begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{\min\{t_n, M\}} A_{t_n-i} \sum\limits_{l=0}^{M} \eta^l \tilde{v}_{il}, & t_n \geqslant 0 \\ \\ 0, & t_n < 0. \end{cases} \tag{0.36}$$

Здесь $t' \stackrel{def}{=} k',\ t_n \stackrel{def}{=} k_n - \sigma - 2;\quad \tilde{v}_{ij} \stackrel{def}{=} v_{i+1,\ j+1},\ i, j = \overline{0, M};$

$$A_i \stackrel{def}{=} \sum_{p=0}^{M} \frac{1}{p+1} \sum_{j=0}^{i} \tilde{v}_{jp}, \quad i = \overline{0..M} \tag{0.37}$$

Заметим, что, в отличие от формулы (0.34), в формуле (0.36) явно выделены множители A_i, которые для каждого M можно вычислить заранее, избавившись от необходимости пересчитывать четыре вложенные суммы в правой части (0.34) в каждой точке.

Диссертантом были придуманы и построены срезывающие функции для произвольной n-мерной выпуклой области, содержащей центр гиперкуба Q. Вычислительный эксперимент показал, что построенные срезывающие функции имеют хорошие вычислительные свойства.

По алгоритму была написана многопроцессорная программа на языке C++ с библиотекой параллельных функций MPI. Расчеты проводились со следующими входными данными:

- Количество процессоров P — от 1 до 1000.
- Подынтегральная функция $f(x) \equiv 1$.
- Размерность n — от 2 до 10.
- Гладкость M — от 2 до 6.
- Функция, задающая область $\Omega:\ \Phi(x) = 1 - \sum\limits_{i=0}^{n-1} (2x_i - 1)^2$
- Число точек на ребре гиперкуба $N \equiv \frac{1}{h}$ — от 10 до 10^5.

В таблице 1 приведены погрешности вычислений для двумерного случая, в таблице 2 — для четырехмерного, в таблице 3 — для десятимерного.

Таблица 1. $n = 2$

$N \setminus M$	2	3	4	5	6
100	2.92E-06	4.64E-05	2.31E-04	6.35E-04	6.18E-03
1000	4.04E-09	1.61E-11	8.50E-13	4.00E-15	5.44E-15
2000	5.00E-10	1.51E-12	2.04E-14	1.78E-15	2.22E-15
3000	1.48E-10	3.40E-13	1.55E-15	4.44E-16	0.00E+00
4000	6.26E-11	1.33E-13	3.33E-16	1.78E-15	1.44E-15
5000	3.21E-11	4.87E-14	1.33E-15	2.22E-16	5.55E-16
10000	4.03E-12	0.00E+00	1.11E-16	1.11E-16	1.11E-16

Таблица 2. $n = 4$

$N \setminus M$	2	3	4	5	6
60	4.78E-06	1.18E-05	9.68E-05	1.32E-04	1.67E-03
70	3.84E-07	5.42E-09	1.28E-09	9.87E-10	5.12E-08
80	1.13E-07	6.51E-10	4.56E-11	2.87E-10	3.49E-10
90	4.78E-08	1.24E-11	5.18E-11	5.37E-11	7.98E-11
100	2.22E-08	1.33E-11	7.57E-11	4.55E-11	8.06E-11
150	1.48E-08	1.74E-11	3.35E-11	1.52E-11	1.32E-11
200	8.47E-09	9.85E-11	1.92E-11	7.21E-12	8.68E-12
250	2.81E-09	1.04E-11	1.31E-13	1.55E-12	1.65E-12

Таблица 3. $n = 10$

$N \setminus M$	2
10	4.19E-05
11	1.15E-04
12	8.51E-05

Анализ результатов вычислений показал, что точность счета во многих случаях не уступает теоретической, а порой даже превосходит ее на несколько порядков. Исключение составляют случаи, когда M велико при малом N (т.е. слишком широк пограничный слой толщины $2Mh$). Естественное ограничение на точность вычислений налагается конечным количеством верных цифр (15) типа данных `double`. С ростом размерности увеличивается количество множителей и слагаемых, из которых составляются срезывающие функции, что также ухудшает точность. Однако эксперимент с десятимерным интегралом показывает, что при малом M можно добиться удовлетворительного результата даже при $N = 10$.

Перейдем теперь к анализу быстроты счета и качества распараллеливания программы. Рассмотрим, для примера, результаты счета для $n = 3, M = 2, N = 1000$. Для анализа качества распараллеливания введем понятия ускорения и эффективности программы:

$$S_P = \frac{T_1}{T_P} \quad \text{(ускорение)}, \qquad E_P = \frac{S_P}{P} \quad \text{(эффективность)},$$

где T_P — время, за которое задача выполняется на P процессорах. Будем варьировать P от 100 до 1000 с шагом 100. При этом положим $T_1 = 100\ T_{100}$. На рис. 1 показано отклонение экспериментального ускорения S_P (темная ломаная) от идеального ускорения (светлая прямая).

2. Наилучший порядок приближения интегралов функций из $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$

Второй раздел диссертации посвящен теоретическому результату, полученному совместно М.Д. Рамазановым и Д.Я. Рахматуллиным. В отличие от пространства $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ функций, имеющих одинаковую по всем направлениям гладкость m, здесь рассматривается неизотропное пространство $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$, $\overline{m} = (m_1, m_2)$ размерности 2. Исследуются после-

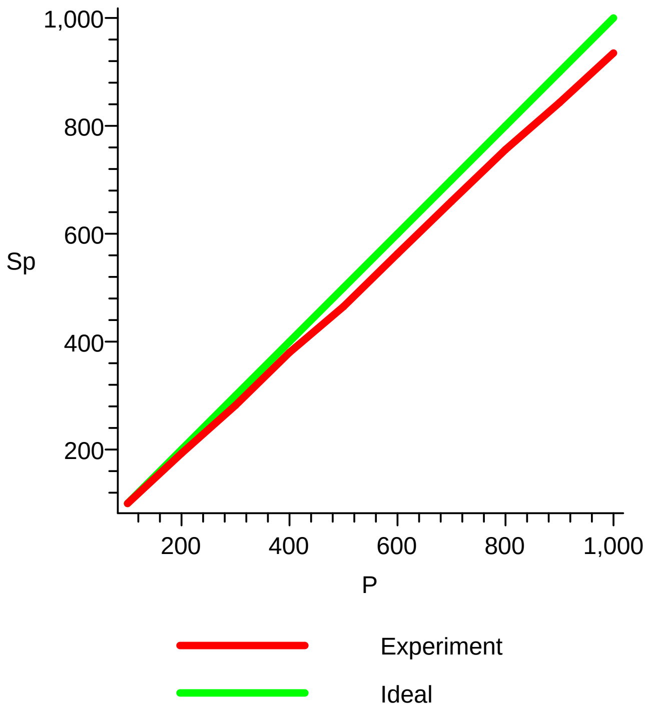

Рис. 1. Зависимость ускорения от числа процессоров (n=3)

довательности кубатурных формул, имеющие на этом пространстве не только оптимальный порядок сходимости, но и *наилучший*.

Последовательность кубатурных формул

$$K_N^{\Omega,best}(f) \equiv \sum_{k=1}^{N} c_{k,N} f(x^{(k)}), \;\; N \to \infty \tag{0.38}$$

где функции f принадлежат банаховому пространству B, называется *наилучшей*, если при любом фиксированном N она минимизирует норму ее разности с точным значением интеграла I^Ω как по набору коэффициентов $\{c_{k,N}\}$, так и по расположению узлов $\{x^{(k)}\}$:

$$K_N^{\Omega,best} \stackrel{def}{\equiv} \arg \min_{K_N^\Omega} \left\| K_N^\Omega - I^\Omega \right\|_{B^*} \equiv \arg \min_{\{x^{(k)}\},\{c_{k,N}\}} \left\| K_N^\Omega - I^\Omega \right\|_{B^*}. \tag{0.39}$$

ПКФ $K_N^{\Omega,bord}$ называется *наилучшей по порядку*, если выполняется неравенство:

$$\exists\, C : \; \overline{\lim_{N\to\infty}} \frac{\|I^\Omega - K_N^{\Omega,bord}\|_{B^*}}{\|I^\Omega - K_N^{\Omega,best}\|_{B^*}} \leqslant C. \tag{0.40}$$

Известен наилучший возможный порядок приближения в n-мерном пространстве $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^n)$, $\overline{m} = (m_1, \ldots, m_n)$ интегралов по ограниченной области с помощью кубатурных формул вида (0.38):

$$\left\| K_N^{\Omega,best} \right\|_{(W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^n))^*} \equiv \min_{\{x^{(k)}\},\{c_{k,N}\}} \left\| K_N^{\Omega} \right\|_{(W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^n))^*} = C\, N^{-\frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{n} \frac{1}{m_j}}}. \qquad (0.41)$$

С исследованиями, проведенными в первом разделе диссертации, тему второго раздела роднит тот факт, что наилучший порядок может достигаться на **решетчатых** формулах. В частности, установлено[1], что такой порядок достигается, если взять векторный шаг решетки, подчиненный заданной гладкости подынтегральной функции. В направлениях большей гладкости следует брать бо́льшие шаги решетки:

$$h \stackrel{def}{=} (h_1, \ldots, h_n), \quad h_1^{m_1} = \ldots = h_n^{m_n}.$$

Еще большее родство с темой первого раздела диссертации дает выносимый на защиту результат. Оказывается, в двумерном случае наилучший порядок аппроксимации достигается и на **кубических** решетках за счет поворота на угол θ, тангенс которого есть «золотое сечение», $\alpha \stackrel{def}{=} \operatorname{tg}\theta = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. То есть следует взять последовательность решеток узлов (не зависящую от параметров гладкости m_1 и m_2).

$$\{hHk\},\ k \in \mathbb{Z}^2,\ H \stackrel{def}{=} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \equiv \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & 1 \end{pmatrix}. \qquad (0.42)$$

Таким образом, использование последовательностей кубических решеток оказывается удобным не только в смысле простоты их использования в компьютерных программах, но и в теоретически обоснованных хороших свойствах — на их основе можно строить кубатурные формулы наилучшие как на изотропных классах функций (Раздел 1), так и на неизотропных (Раздел 2).

Приведем теперь формальную постановку задачи. Пусть $\overline{\Omega}$ обладает кусочно-гладкой границей и лежит в круге $\{x : |x| < \phi < 1\}$.

Функционал погрешности кубатурной формулы с кубической решеткой узлов $\{hHk\}, k \in \mathbb{Z}^2$, где H находится из (0.42), имеет вид

$$l_h^{\Omega,H}(x) \stackrel{def}{=} \chi_\Omega(x) - h^2 \sum_{\substack{k\in\mathbb{Z}^2,\\ hHk\in\Omega}} c_{k,h}\, \delta(x - hHk). \qquad (0.43)$$

[1]См. Соболев С.Л., Васкевич В.Л. Кубатурные формулы. Новосибирск: Изд-во ИМ СО РАН, 1996. Стр. 239

В работе показывается, что вычисление порядка сходимости ФП (0.43) в пространстве $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$ сводится к оценке суммы

$$\zeta(h) \overset{def}{=} \sum_{k\in\mathbb{Z}^2\setminus\{0\}} \frac{1}{1+\left|\frac{k_1+\alpha k_2}{h}\right|^{2m_1}+\left|\frac{-\alpha k_1+k_2}{h}\right|^{2m_2}} \quad \text{при } h\to 0.$$

для которой при условии $m_2 \geqslant m_1 \geqslant \frac{3}{2}$ получаем искомую оценку сверху

$$\zeta(h) \leqslant C\, h^{\frac{4m_1m_2}{m_1+m_2}} = C\, N^{-\frac{2m_1m_2}{m_1+m_2}}.$$

Теорема. *Решетчатые кубатурные формулы вида*

$$K_h^{\Omega}(f) \equiv \sum_{hHk\in\Omega} c_k(h) f(hHk), \quad h\to 0 \tag{0.44}$$

с узлами на кубической решетке

$$\{hHk\},\ k\in\mathbb{Z}^2,\ H \overset{def}{=} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \equiv \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & 1 \end{pmatrix} \tag{0.45}$$

и оптимальные по порядку в неизотропном пространстве

$$W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2), \quad \overline{m}=(m_1,m_2), \quad \min\{m_1,m_2\} \geqslant \frac{3}{2}$$

являются в нем ***наилучшими по порядку****.*

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Одной из важных проблем, возникающих при решении некоторых прикладных задач математической физики, квантовой химии, механики является приближенное интегрирование функций по многомерным областям с кривыми границами.

В диссертации предложен, реализован и проанализирован один из самых быстрых и точных способов приближенного интегрирования по многомерным выпуклым областям с гладкими границами по функциям различной гладкости (из пространства $\widetilde{W}_p^m(\Omega)$ с $m = 2..6$). За основу берется алгоритм[1] М.Д. Рамазанова, модифицированный и реализованный в виде стандартной параллельной программы автором диссертации.

Полученный результат обладает как вычислительными достоинствами (точностью, быстродействием, эффективностью, масштабируемостью

[1]См., например, Соболев С.Л., Васкевич В.Л. Кубатурные формулы. Новосибирск: Изд-во ИМ СО РАН, 1996. 484с. С. 254—263.

на произвольное количество процессоров, переносимостью на любые платформы, совместимые с библиотекой MPI), так и теоретическими — строгим обоснованием алгоритма и гарантированной оценкой погрешности вычислений. Теоретическое обоснование стало возможным благодаря достижениям теории кубатурных формул, развитой С.Л. Соболевым и продолженной его последователями, в частности М.Д. Рамазановым.

Результат является новым как по форме (программа предназначена для современных многопроцессорных вычислительных систем), так и по содержанию (алгоритм дополнен и оптимизирован).

Практическая польза заключается в создании альтернативы имеющимся на сегодняшний день программам интегрирования для многомерных областей, в частности методам типа Монте-Карло.

Второй результат, изложенный в диссертации, является продолжением исследования хороших свойств кубатурных формул, построенных на основе последовательностей кубических решеток. М.Д. Рамазановым и автором диссертации совместно был установлен неожиданный факт достижения наилучшего порядка приближения интегралов в неизотропных пространствах (размерности 2) кубатурными формулами с кубической решеткой узлов, не зависящей от параметров гладкости, а лишь только повернутой на фиксированный угол.

Для практической проверки теоретического результата диссертантом была написана программа сравнения точности вычислений с тремя видами решеток: обычной кубической решетки, прямоугольной решетки с векторным шагом и кубической решетки, повернутой на специальный угол. Вычислительный эксперимент продемонстрировал хорошие вычислительные свойства предложенной решетки.

Авторы результата предполагают, что он может оказаться полезным как в теоретическом, так и в практическом плане, инициировать дальнейшие исследования.

ПУБЛИКАЦИИ

Основное содержание диссертации изложено в публикациях:

1) Рамазанов М. Д., Рахматуллин Д. Я. Достижение наилучшего порядка приближения интегралов функций из $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$ на решетчатых

кубатурных формулах за счет поворота решетки узлов // Материалы VIII международного семинара-совещания 15–22 августа 2005 г., ВСГТУ, г. Улан-Удэ. — 2005. — С. 109–116.

2) Рахматуллин Д. Я. Вычисление интегралов по многомерным областям на многопроцессорных вычислительных системах // Международная уфимская зимняя школа-конференция по математике и физике с участием студентов, аспирантов и молодых ученых, БашГУ, Уфа, 30 ноября — 06 декабря 2005 года. — Уфа: РИО БашГУ, 2005. — С. 151–157.

3) Рахматуллин Д. Я. Достижение наилучшего порядка приближения интегралов функций из $W_2^{\overline{m}}(\mathbb{R}^2)$ в частных случаях // V Региональная школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике и физике: Тезисы докладов. — Уфа: РИО БашГУ, 2005. — С. 20.

4) Рахматуллин Д. Я. Вычисление интегралов по многомерным областям на многопроцессорных вычислительных системах // Вычислительные технологии. 2006. — Т. 11, № 3. — С. 118–125.

5) Рахматуллин Д. Я. Интегрирование на суперкомпьютере. Математика. Механика. Информатика: Тез. докл. Всерос. науч. конф., Челябинск, 19–22 сентября 2006 г. — С. 114.