ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2023, том 514, с. 107–111

УДК 519.6

МНОГОМЕРНЫЕ КУБАТУРЫ СО СВЕРХСТЕПЕННОЙ СХОДИМОСТЬЮ

А. А. Белов[1,2,*], М. А. Тинтул[1,]**

Представлено академиком Е.Е. Тыртышниковым
Поступило 06.03.2023 г.
После доработки 18.09.2023 г.
Принято к публикации 15.11.2023 г.

Во многих приложениях возникают многомерные интегралы по единичному гиперкубу, которые вычисляют с помощью методов Монте-Карло. Сходимость лучших из них оказывается довольно медленной. В данной работе предложены принципиально новые кубатуры со сверхстепенной сходимостью, основанные на усовершенствованных сетках Коробова и специальной замене переменной. Построены апостериорные оценки погрешности, практически неотличимые от фактической точности. Приведены примеры расчетов, иллюстрирующие преимущества предложенных методов.

Ключевые слова: многомерные интегралы, метод Монте-Карло, сверхстепенная сходимость, сетки Коробова

DOI: 10.31857/S2686954323600118, **EDN:** DAUIMM

1. ПРОБЛЕМА

1° Рассмотрим вычисление s-мерного интеграла от гладкой функции по единичному гиперкубу

$$I = \int f(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int_0^1 \ldots \int_0^1 f(x_1 \ldots x_s)dx_1 \ldots dx_s. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{x} = (x_1,\ldots x_s)$ – s-мерный вектор. Например, в статистической физике требуется вычислять моменты одночастичной функции распределения, которая зависит от $s = 6$ переменных. Коэффициент теплопроводности среды выражается через интегралы рассеяния, кратность которых равна $s = 12$. Возникают задачи и с бóльшим числом переменных.

2° Для размерностей $s \leqslant 3$ применяют многомерные варианты сеточных квадратур средних, трапеций и Симпсона [1]. Их погрешность δ зависит от шага сетки по одной координате по степенному закону. Пусть N есть число точек многомерной сетки. Тогда $\delta \sim N^{-q/s}$, где q – порядок точности квадратуры. Такая скорость сходимости быстро убывает с ростом s.

Для интегралов более высокой размерности наиболее эффективны методы Монте-Карло (МК). Они основаны на использовании равномерно распределенных случайных чисел. На практике используют детерминированные наборы чисел, имитирующие свойства случайных последовательностей. Лучшими являются квазислучайные последовательности Соболя [2] и теоретико-числовые сетки Коробова [3]: для непериодической функции погрешность $\delta \sim N^{-1}$ независима от s. Однако даже такая сходимость довольно медленна, и расчеты с высокой точностью требуют больших объемов вычислений.

3° Важным аспектом является апостериорный контроль погрешности расчета. Для сеточных методов известны асимптотически точные оценки погрешности по Ричардсону [4]. Для методов МК таких оценок не предложено.

4° В данной работе 1) предложены кубатуры со сверхстепенной сходимостью для гладких подынтегральных функций, в том числе непериодических. Они основаны на использовании сеток Коробова и специальной замены переменных в интеграле. Предложенный подход кардинально (на много порядков) повышает точность расчета. Он является принципиально новым. 2) Построены апостериорные оценки точности, практически неотличимые от фактической погрешности. В методах МК такие оценки ранее были неизвестны. 3) Предложены усовершенствованные сетки Ко-

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Российский университет дружбы народов, факультет физико-математических и естественных наук, Москва, Россия*
**E-mail: aa.belov@physics.msu.ru*
***E-mail: maksim.tintul@mail.ru*

робова, названные экстремальными. Их узлы распределены в гиперкубе существенно более равномерно при заметно меньшей трудоемкости нахождения параметров сеток. Найдены параметры таких сеток, достаточные для вычисления интегралов размерности $2 \leqslant s \leqslant 12$ с точностью вплоть до ошибок округления.

2. ТЕОРЕТИКО-ЧИСЛОВЫЕ СЕТКИ

1° Эти сетки были предложены Коробовым [3, 5]. Напомним их определение. Узлы имеют вид

$$M_k = (\{a_1 k N^{-1}\}, \ldots, \{a_s k N^{-1}\}), \quad k = 1, \ldots, N. \quad (2)$$

Здесь $\{x\}$ – дробная часть числа x; a_1, ..., a_s – так называемые оптимальные коэффициенты. В [3] предложен следующий алгоритм их вычисления. Пусть $N = N_1 N_2$, где N_1, N_2 – простые числа, причем $N_2 \sim \sqrt{N_1}$. Рассмотрим

$$H_1(z) = 3^s N_1^{-1} \sum_{k=1}^{N_1} \prod_{q=0}^{s-1} (1 - 2\{k z^q N_1^{-1}\})^2, \quad (3)$$

где z – целые числа, $1 \leqslant z \leqslant N_1$. Пусть оно достигает минимума $\min_z H_1$ при $z = a$. Далее рассмотрим выражение

$$H_2(z) = 3^s N_1^{-1} N_2^{-1} \times \\ \times \sum_{k=1}^{N_1 N_2} \prod_{q=0}^{s-1} \left(1 - 2\{(N_1 z^q + N_2 a^q) k N_1^{-1} N_2^{-1}\}\right). \quad (4)$$

Здесь z – целые, $1 \leqslant z \leqslant N_2$. Пусть оно имеет минимум $\min_z H_2$ при $z = b$. Тогда оптимальные коэффициенты имеют вид

$$a_q = N_1 b^{q-1} + N_2 a^{q-1}, \quad 1 \leqslant q \leqslant s. \quad (5)$$

2° В данной работе предложено усовершенствование алгоритма (3)–(5). Рассмотрим (4) как функцию двух целочисленных переменных z и a, $1 \leqslant z \leqslant N_2$, $1 \leqslant a \leqslant N_1$, и найдем ***одновременный*** минимум $\min_{z,a} H_2$ по этим переменным. Координаты минимума обозначим b_0, a_0 соответственно. Далее вычислим коэффициенты (5), заменяя $a \to a_0$, $b \to b_0$, и узлы сетки M_k согласно (2). Назовем такие сетки ***экстремальными сетками Коробова***.

3° Величина $\min H_2$ характеризует качество сетки. Чем она меньше, тем равномернее распределены точки M_k в гиперкубе и тем выше точность кубатуры (6). 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. 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.

4° Видно, что число арифметических операций при вычислении $H_1(z)$ и $H_2(z)$ при всех указанных z равно $\sim N^{4/3}$. В [6] предложен алгоритм вычисления оптимальных коэффициентов с трудоемкостью $\sim N$ операций.

В предлагаемом алгоритме для вычисления $H_2(z,a)$ при всех указанных значениях аргументов требуется $\sim N^{4/3}$ арифметических операций. Однако функция $H_2(z,a)$ имеет несколько минимумов. Они имеют одинаковую глубину, и соответствующие b_0, a_0 дают эквивалентные сетки. Эти минимумы реализуются уже при $a \leqslant 20 \ll N_1$. Поэтому фактическая трудоемкость есть $\sim 20 N^{2/3}$ операций, что экономичнее известных алгоритмов. Для типичных $N \sim 10^6$ выигрыш составляет $\sim$5 раз.

5° Найдены параметры N_1, N_2, b_0, a_0 экстремальных сеток Коробова для размерностей $2 \leqslant s \leqslant 12$. Они приведены в табл. 1. Последняя сетка для каждого s соответствует точности порядка ошибок компьютерного округления для кубатуры. Табллица 1 рекомендуется к использованию в расчетах.

3. КУБАТУРЫ СО СВЕРХСТЕПЕННОЙ СХОДИМОСТЬЮ

1° Кубатура для интеграла (1) на сетке (2) имеет вид

$$I_N = N^{-1} \sum_{k=1}^{N} f(M_k). \quad (6)$$

Для периодических подынтегральных функций, имеющих r непрерывных производных, кубатура (6) сходится с точностью $O[(\ln N)^\gamma / N^r]$, где γ – некоторое число [3]. Такая сходимость близка к степенной.

2° Пусть f есть гладкая, но непериодическая функция. Для ускорения сходимости применяют замены переменных интегрирования [7]. Известна полиномиальная замена $x_q \in (0,1) \to \xi_q \in (0,1)$, $1 \leqslant q \leqslant s$, которая обращает в нуль несколько низших производных функции f на гранях гипер-

Таблица 1. Параметры экстремальных сеток Коробова

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					

куба [3]. Это повышает порядок точности кубатуры, но сходимость остается степенной.

3° В данной работе предложена следующая замена переменных:

$$x_q(t_q) = 0.5 + 0.5\,\mathrm{th}\,t_q,$$
$$t_q(\xi_q) = (\xi_q - 0.5)\xi_q^{-1}(1-\xi_q)^{-1}, \quad 1 \leqslant q \leqslant s. \tag{7}$$

Тогда интеграл (1) принимает вид

$$I = \int_0^1 \ldots \int_0^1 \tilde{f}(\xi_1, \ldots, \xi_s)\, d\xi_1 \ldots d\xi_s,$$
$$\tilde{f}(\xi_1, \ldots, \xi_s) = f(x_1(\xi_1), \ldots, x_s(\xi_s)) \times \tag{8}$$
$$\times \prod_{q=1}^{s} (dx_q/dt_q)(dt_q/d\xi_q),$$

$$dx_q/dt_q = 0.5(\mathrm{ch}\,t_q)^{-2}$$
$$dt_q/d\xi_q = (\xi_q^2 - \xi_q + 0.5)(\xi_q - \xi_q^2)^{-2}. \tag{9}$$

Легко видеть, что $\lim_{\xi_q \to 0+0} \tilde{f} = \lim_{\xi_q \to 1-0} \tilde{f} = 0$. То же верно для всех производных $\tilde{f}$, т.е. эта функция допускает гладкое периодическое продолжение за пределы отрезка [0, 1] по каждой переменной. Поэтому все степенные слагаемые в остаточном члене кубатуры (6) сокращаются. Тем самым верна

Теорема. *Кубатура* (6) *для интеграла* (8) *на экстремальных сетках Коробова сходится по сверхстепенному закону.*

Таким образом, предлагаемый подход позволяет строить прецизионные кубатуры со сверхстепенной сходимостью для многомерных интегралов от произвольных гладких функций, в том числе непериодических. Такая скорость сходимости кардинально превосходит традиционную степенную.

4° Грани гиперкуба (т.е. точки $\xi_q = 0,\ 1$; $1 \leqslant q \leqslant s$) становятся существенно особыми точками функции $\tilde{f}$. Точка $\mathbf{x} = (0, \ldots, 0)$ является узлом сетки (2). Доопределим в ней $\tilde{f} = 0$.

Считается [8], что наличие существенно особых точек не позволяет добиться сходимости. В данной работе впервые показано, что это не препятствует сходимости, и замена (7) позволяет реализовать сверхстепенную сходимость. Поэтому предлагаемый подход является принципиально новым.

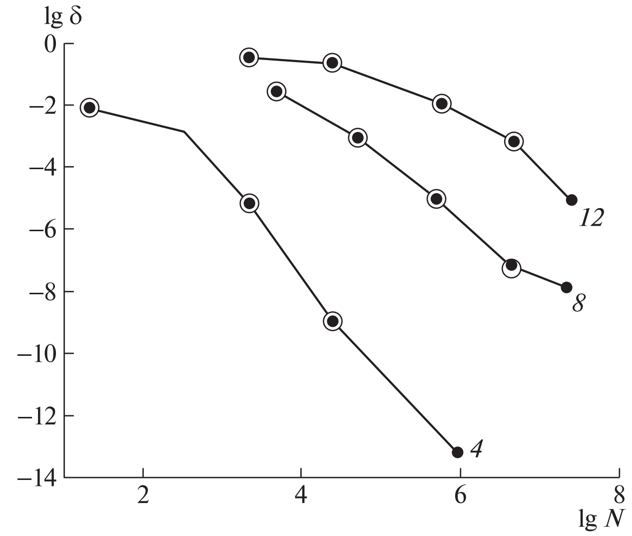

Рис. 1. Погрешность расчета в тесте (11) на экстремальных сетках Коробова с заменой переменных (7). ● – погрешность относительно точного ответа, ○ – апостериорная оценка (11). Цифры около линий – размерность s.

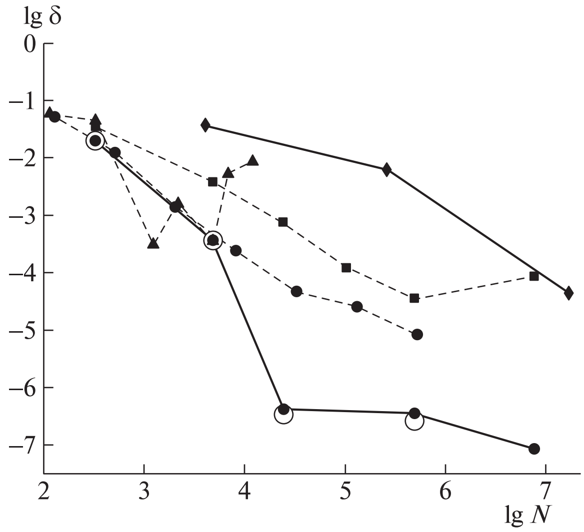

Рис. 2. Сравнение методов в тесте (11). Сплошные линии – замена переменных (7), штриховые – без замены. Темные маркеры – погрешность относительно точного ответа, светлые – апостериорная оценка (10). ● – экстремальная сетка Коробова, ▲ – классическая сетка Коробова, ■ – точки Соболя, ♦ – формула средних.

4. КОНТРОЛЬ ТОЧНОСТИ

Проведем расчет на наборе сеток из табл. 1. Точность кубатуры I_{end} на последней сетке сопоставима с ошибками компьютерного округления. Поэтому погрешность δ_N на предыдущих сетках N можно оценить сравнением с последней сеткой

$$\delta_N = I_{\text{end}} - I_N. \tag{10}$$

В методах МК такие оценки ранее были неизвестны.

5. АПРОБАЦИЯ

1° Рассмотрим пример. Пусть

$$f = \prod_{q=1}^{s} f_q(x_q), \quad f_q(x_q) = e^{-x_q} x_q^{\alpha-1}/\gamma(1,\alpha), \quad \alpha = 1.7. \tag{11}$$

Здесь γ – нижняя неполная гамма-функция. Точное значение этого интеграла есть $I = 1$. Эффективная размерность интеграла равна s (т.е. совпадает с формальной), поэтому такой тест достаточно представителен.

2° Были проведены расчеты интеграла от (11) для различных $s = 4,8,12$. Погрешность определялась как разность кубатуры и точного значения I. Полученные погрешности приведены на рис. 1. Масштаб графика двойной логарифмический. Прямая линия соответствует степенной сходимости, а линия, убывающая быстрее прямой (выпуклая вверх), – сверхстепенной.

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. 1 приведены апостериорные оценки (10). Видно, что они практически неотличимы от фактической погрешности. Это показывает высокую практическую ценность предлагаемых оценок.

3° Проведем сравнение различных методов: кубатуры (6) на экстремальных сетках Коробова с заменой переменных (7) и без нее, на классических сетках Коробова [3], на сетках Соболя, а также многомерная формула средних с заменой (7). Пусть подынтегральная функция имеет вид (11) при $s = 6$. Погрешности данных методов приведены на рис. 2. График выполнен в двойном логарифмическом масштабе.

Видно, что экстремальные сетки Коробова позволяют достигать существенно более высокой точности по сравнению с классическими сетками Коробова. Введение замены переменных (7) резко ускоряет сходимость и существенно повышает количественную точность. При этом формула трапеций с заменой (7) сильно уступает по точности кубатуре на экстремальных сетках Коробова с той же заменой. Видно также, что совокупность предлагаемых подходов – экстремальные сетки Коробова и замена переменных (7) – 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.

Работа поддержана грантом РНФ № 22-71-00028.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калиткин Н.Н., Альшина Е.А.* Численные методы. Т. 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
2. *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1975.
3. *Коробов Н.М.* Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963.
4. *Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В.* Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
5. *Демидов С.С. и др.* // Чеб. сборник. 2017. Т. 18. № 4. С. 6.
6. *Коробов Н.М.* // ДАН. 1982. Т. 267. № 2. С. 289.
7. *Гельфанд И.М. и др.* // Изв. ВУЗов. Матем. 1958. Т. 6. № 5. С. 32.
8. *Iri M., Moriguti S., Takasawa Y.* // J. Comp. Appl. Math. 1987. V. 17. P. 3.

MULTIDIMENSIONAL CUBATURES WITH SUPER-POWER CONVERGENCE

A. A. Belov[a,b] and M. A. Tintul[a]

[a] *M.V. Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, Russian Federation*

[b] *Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS E. E. Tyrtyshnikov

In many applications, multidimensional integrals over the unit hypercube arise, which are calculated using Monte Carlo methods. The convergence of the best of them turns out to be quite slow. In this paper, fundamentally new cubatures with super-power convergence based on the improved Korobov grids and special variable substitution are proposed. A posteriori error estimates are constructed, which are practically indistinguishable from the actual accuracy. Examples of calculations illustrating the advantages of the proposed methods are given.

Keywords: multidimensional integrals, Monte Carlo method, super-power convergence, Korobov grids