Полностью симметричные квадратурные формулы на 2-, . . . , 6- мерных симплексах

Чулуунбаатар Галмандах

Объединённый институт ядерных исследований

March 19, 2024

Содержание

- Полностью симметричные квадратурные формулы на 2-, ..., 6-мерных симплексах
- Полностью симметричные квадратурные формулы для d-симплекса
- Решение системы нелинейных уравнений с выпуклыми ограничениями
- Оценки погрешностей полностью симметричных квадратурных формул
- Другая деятельность

Полностью симметричные квадратурные формулы на 2-, ..., 6-мерных симплексах

Схемы МКЭ высокого порядка дают высокоточные решения краевых задач благодаря их быстрой сходимости. Однако в настоящее время они не используются для решения многомерных задач, так как их реализация требует больших ресурсов. Это препятствие постепенно устраняется с развитием вычислительной техники. Краеугольным сдерживающим фактором при реализации схем МКЭ является вычисление интегралов. В результате применения МКЭ p-го порядка к решению задачи о дискретном спектре для эллиптического уравнения (Шрёдингера) определяются собственные функции и собственные значения с точностью порядка $p+1$ и $2p$ соответственно при условии, что все промежуточные величины вычисляются с достаточной точностью. Отсюда следует, что для реализации схемы МКЭ порядка p соответствующие интегралы должны быть вычислены с точностью не ниже порядка $2p$. Наиболее экономичный способ вычисления таких интегралов основан на использовании квадратур типа Гаусса.

Полностью симметричные квадратурные формулы для d-симплекса

Рассмотрим квадратурную формулу порядка p

$$\int_{\Delta_d} V(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = \frac{1}{d!} \sum_{j=1}^{N_{dp}} w_j V(x_{j1}, \ldots, x_{jd}), \tag{1}$$

$$\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_d), \quad d\boldsymbol{x} = dx_1 \ldots dx_d,$$

для интегрирования по стандартному единичному d-симплексу Δ_d с вершинами $\hat{\boldsymbol{x}}_j = (\hat{x}_{j1}, \ldots, \hat{x}_{jd})$, $\hat{x}_{jk} = \delta_{jk}$, $j = 0, \ldots, d$, $k = 1, \ldots, d$, которая точна для всех полиномов d переменных $x_1, \ldots, x_d$ степени не выше p. В уравнении (1) N_{dp} – количество узлов, w_j – веса, а $(x_{j1}, \ldots, x_{jd})$ – узлы.

Для построения полностью симметричных квадратурных формул используются барицентрические координаты $(y_1, \ldots, y_{d+1})$ узлов:

$$\sum_{k=1}^{d+1} y_k = 1. \tag{2}$$

Используя инвариантность полностью симметричных квадратурных формул относительно перестановок барицентрических координат $(y_1, \ldots, y_{d+1})$, формулу (1) можно представить в симметричном виде

$$\int_{\Delta_d} V(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = \frac{1}{d!} \sum_{j=1} w_j \sum_{k_1, \ldots, k_{d+1}} V(y_{jk_1}, \ldots, y_{jk_d} | y_{jk_{d+1}}), \tag{3}$$

где внутреннее суммирование по $k_1, \ldots, k_{d+1}$ ведется по различным перестановкам барицентрических координат $(y_{j1}, \ldots, y_{jd+1})$, а $V(y_{jk_1}, \ldots, y_{jk_d} | y_{jk_{d+1}})$ означает, что d-мерная подынтегральная функция $V(x)$ вычисляется для множества $y_{jk_1}, \ldots, y_{jk_d}$.

Следуя[1], под орбитой $S_{[i]} \equiv S_{m_1 \cdots m_{r_{di}}}$ понимается набор узлов барицентрические координаты которых, составляют все различные перестановки барицентрических координат

$$(y_1, \ldots, y_{d+1}) = (\overbrace{\lambda_1, \ldots, \lambda_1}^{m_1 \text{ раз}}, \ldots, \overbrace{\lambda_{m_{r_{di}}}, \ldots, \lambda_{m_{r_{di}}}}^{m_{r_{di}} \text{ раз}}), \tag{4}$$

$$\sum_{j=1}^{r_{di}} m_j = d+1, \quad \sum_{j=1}^{r_{di}} m_j \lambda_j = 1, \quad m_1 \geq \cdots \geq m_{r_{di}}. \tag{5}$$

Количества узлов орбит даны мультиномиальными коэффициентами

$$P_{di} = \frac{(d+1)!}{m_1! \cdots m_{r_{di}}!}. \tag{6}$$

[1] J.I. Maeztu, et al, Math. Comp. 64, 1171–1192 (1995).

Для любых перестановок $(l_1, \ldots, l_{d+1})$ из $(k_1, \ldots, k_{d+1})$ верна следующая формула:

$$\int_{\Delta_d} x_1^{l_1} \cdots x_{d+1}^{l_{d+1}} d\boldsymbol{x} = \frac{\prod_{i=1}^{d+1} k_i!}{\left(d + \sum_{i=1}^{d+1} k_i\right)!}, \tag{7}$$

где

$$x_{d+1} = 1 - \sum_{i=1}^{d} x_i. \tag{8}$$

Подставляя в (3) вместо $V(x)$ симметричные полиномы относительно переменных $x_1, \ldots, x_{d+1}$ степени не выше p и учитывая (7), получаем систему нелинейных алгебраических уравнений:

$$\int_{\Delta_d} s_2^{l_2} \times \cdots \times s_{d+1}^{l_{d+1}} \, d\boldsymbol{x} = \frac{1}{d!} \sum_{i=0}^{M_d} P_{di} \sum_{j=1}^{K_{di}} W_{i,j} s_{i,j2}^{l_2} \times \cdots \times s_{i,jd+1}^{l_{d+1}}, \tag{9}$$

$$2l_2 + \cdots + (d+1) l_{d+1} \leq p, \tag{10}$$

где для каждой орбиты $S_{[i]}$ используется множество K_{di} различных барицентрических координат. В (9) $K_{d0} = 0$ или 1 и $K_{di} \geq 0$, $i \neq 0$; $W_{i,j}$ соответствующие веса;

$$s_k = \sum_{l=1}^{d+1} x_l^k, \quad k = 2, \ldots, d+1, \tag{11}$$

– симметричный многочлен степени k, и

$$s_{i,jk} = \sum_{l=1}^{r_{di}} m_l \lambda_{i,jl}^k. \tag{12}$$

Table 1: Числа E_{dp} независимых уравнений для полностью симметричных квадратурных формул порядка p.

	E_{dp}				
p	$d=2$	$d=3$	$d=4$	$d=5$	$d=6$
4	4	5	5	5	5
6	7	9	10	11	11
8	10	15	18	20	21
10	14	23	30	35	38
12	19	34	47	58	65
14	24	47	70	90	105
16	30	64	101	136	164
18	37	84	141	199	248
20	44	108	192	282	364

Решение системы нелинейных уравнений с выпуклыми ограничениями

Перепишем систему нелинейных уравнений (9) с выпуклыми ограничениями в виде

$$f_i(\boldsymbol{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad \boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{X}. \tag{13}$$

Система (13) эквивалентна следующей задаче минимизации

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\|^2, \quad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), \dots, f_m(\boldsymbol{x}))^T, \tag{14}$$

где $\mathcal{X} \subseteq R^n$ – непустое, замкнутое и выпуклое множество.

Алгоритмы типа Левенберга-Марквардта представляют собой итерационные процессы, на каждой итерации которых решаются задачи линеаризации вида

$$\min_{\boldsymbol{x}^k+\boldsymbol{h}\in\mathcal{X}} G_k(\boldsymbol{h}), \tag{15}$$

с целевыми функциями

$$G_k(\boldsymbol{h}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) + \boldsymbol{J}_k\boldsymbol{h}\|^2 + \frac{1}{2}\mu_k(\boldsymbol{h}, \mathbf{D}_k\boldsymbol{h}), \tag{16}$$

где $\boldsymbol{x}^k$ – точка текущей итерации, $\mathbf{J}_k \in R^{m\times n}$ – якобиан $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ при $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k$, $\mathbf{D}_k \in R^{n\times n}$ является диагональной матрицей с положительными элементами, и μ_k – положительный параметр. Поскольку $G_k(\boldsymbol{h})$ – строго выпуклая квадратичная функция, решение подзадачи (15) всегда существует и единственно, в частности, для случая без ограничений имеем

$$\boldsymbol{h}^k = -(\mathbf{J}_k^T\mathbf{J}_k + \mu_k\mathbf{D}_k)^{-1}\mathbf{J}_k^T\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k). \tag{17}$$

В[2] предложен следующий алгоритм (с единичной матрицей $\mathbf{D}_k$) и доказана его локальная сходимость:

1. Выбираются $\boldsymbol{x}^0 \in \mathcal{X}$, $\nu > 0$, $\beta, \sigma, \gamma \in (0, 1)$, $\varepsilon > 0$ и $k = 0$.
2. Если $\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k)\| \leq \varepsilon$, то алгоритм останавливается.
3. Вычисляем $\mathbf{J}_k$, $\mu_k = \nu\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k)\|^2$ и $\boldsymbol{h}^k$ – решение задачи (15).
4. Если
$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{h}^k)\| \leq \gamma\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k)\|,$$
то $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{h}^k$, $k = k + 1$, и переходим на шаг 1; иначе переходим на шаг 5.
5. Вычисляем шаг $t = \max(\beta^l | l = 0, 1, 2, \ldots)$, такой, что
$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k(t))\|^2 \leq \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k)\|^2 + 2\sigma \boldsymbol{F}^T(\boldsymbol{x}^k)\mathbf{J}_k(\boldsymbol{x}^k(t) - \boldsymbol{x}^k),$$
где $\boldsymbol{x}^k(t) = P_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}^k - 2t\mathbf{J}_k^T\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k))$. Вычисляем $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k(t)$, $k = k + 1$ и переходим на шаг 2.

[2] Ch. Kanzow, et al, J. Comput. App. Math. 172, 375–397 (2004).

Table 2: Вычисленные минимальные числа N_{dp} узлов (тек.) для полностью симметричных квадратурных формул порядка p и сравнение с известными числами N_{dp}.

	N_{dp}								
p	$d=2$	$d=3$		$d=4$		$d=5$		$d=6$	
	тек., [3]	тек.	[4]	тек.	[5]	тек.	[6]	тек.	[12]
4	6	14	14	20	20	27	27	43	43
6	12	24	24	56	56	102	102	175	175
8	16	46	46	105	105	228	257	448	553
9	19	59	59	151	151	338		700	
10	25	79	81	210	210	479		1078	
12	33	123	168	370	445				
16	55	248	304	956	1055				
20	79	441	552						

[3] H. Xiao, et al, Comput. Math. App. 59, 663–676 (2010).
[4] J. Jaśkowiec, et al, Int. J. Numer. Methods Eng. 122, 148–171 (2021).
[5] C.V. Frontin, et al, App. Numer. Math. 166, 92–113 (2021).
[6] A.A. Gusev, ..., G. Chuluunbaatar, et al, LNCS 11077, 197–213 (2018).

Оценки погрешностей полностью симметричных квадратурных формул

Table 3: Невязки $\varepsilon^q_{\text{test}}$ и соответствующий коэффициент Рунге β в численных экспериментах (18) для 6-симплекса.

p	$\varepsilon^2_{\text{test}}$	$\varepsilon^4_{\text{test}}$	$\varepsilon^8_{\text{test}}$	β
4	$+7.91 \cdot 10^{-12}$	$+1.73 \cdot 10^{-13}$	$+2.90 \cdot 10^{-15}$	5.50
6	$-1.73 \cdot 10^{-14}$	$-7.35 \cdot 10^{-17}$	$-2.93 \cdot 10^{-19}$	7.88
8	$+2.09 \cdot 10^{-18}$	$+2.34 \cdot 10^{-21}$	$+2.35 \cdot 10^{-24}$	9.80
9	$-3.86 \cdot 10^{-20}$	$-5.12 \cdot 10^{-23}$	$-5.34 \cdot 10^{-26}$	9.56
10	$-1.18 \cdot 10^{-22}$	$-3.63 \cdot 10^{-26}$	$-9.35 \cdot 10^{-30}$	11.66

Для численного эксперимента был выбран класс интегралов

$$I_d = \int_{\Delta_d} (x_1 + \cdots + x_d) \exp(-x_1 - \cdots - x_d) dx_1 \cdots dx_d. \tag{18}$$

Представлены невязки $\varepsilon^q_{\text{test}} = I^q_d - I_d$, где I^q_d – численные результаты, полученные при разбиении симплекса Δ_d на q^d равных симплексов с интегрированием на каждом из них, и коэффициенты Рунге на трех дважды сгущенных сетках

$$\beta = \log_2 \left| (\varepsilon^q_{\text{test}} - \varepsilon^{2q}_{\text{test}}) / (\varepsilon^{2q}_{\text{test}} - \varepsilon^{4q}_{\text{test}}) \right|. \tag{19}$$

Другая деятельность

Педогогическая деятельность, публикации, участие в научных мероприятиях

1) Педогогическая деятельность:
   - Линейная алгебра
   - Математический анализ
   - Вычислительные методы в математическом моделировании
   - Программное обеспечение математического моделирования
   - Статистические методы и математическое моделирование в психологии
2) 25 публикаций
3) 13 выступлений на конференциях