УДК 517.521.8

Суммирование рядов гармонических функций

© А. О. Сыромясов[1]

Аннотация. Предлагается метод быстрого суммирования рядов, общий член которых – гармоническая функция, затухающая на бесконечности. По сравнению с прямым суммированием метод позволяет на порядки сократить число слагаемых ряда, необходимых для достижения заданной точности. Численные эксперименты подтверждают сходимость метода.
Ключевые слова: функциональный ряд, улучшение сходимости, гармоническая функция, мультиполь.

1. Введение

При моделировании гидродинамического, термодинамического или электромагнитного взаимодействия частиц в дисперсной среде может возникнуть необходимость решать уравнение Лапласа с периодическими граничными условиями.

Если число элементарных ячеек периодичности достаточно велико, то структуру, образуемую частицами взвеси, практически можно считать бесконечной [1]. В этом случае решением уравнения является функция, периодическая относительно существующей в дисперсной среде структуры и представимая в виде функционального ряда.

Для сходимости ряда требуется, чтобы его общий член на бесконечности стремился к нулю. Это значит, что в декартовой прямоугольной системе координат слагаемые бесконечной суммы являются линейными комбинациями т.н. мультиполей – функций вида

$$L_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial x_{i_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial x_{i_M}}\Big(\frac{1}{|\vec{x}|}\Big), \tag{1.1}$$

где M – ранг мультиполя, $\vec{x} = (x_1,\, x_2,\, x_3)$ – радиус-вектор точки относительно начала координат O.

Если дисперсные частицы образуют трехмерную решетку Бравэ с периодами $\vec{\tau}_1$, $\vec{\tau}_2$, $\vec{\tau}_3$, то центр любой из них имеет радиус-вектор вида $\vec{r}^n = n_s\vec{\tau}_s$, где n_s – целые числа. По одинаковым индексам здесь и ниже происходит суммирование в пределах от 1 до 3. В этом случае требуется найти

$$L^{\infty}_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty}\sum_{n_2=-\infty}^{\infty}\sum_{n_3=-\infty}^{\infty} L_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}-\vec{r}^n). \tag{1.2}$$

Иногда (например, под действием магнитного поля) частицы взвеси образуют одномерную цепочку [2]. Пусть она вытянута вдоль координатной оси Ox_1 и имеет период r. Тогда положения частиц задаются векторами $\vec{r}_N = (rN,\, 0,\, 0)$, где N – целое, и следует просуммировать ряд

$$L^{\infty}_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} L_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}-\vec{r}_N). \tag{1.3}$$

Наиболее простым подходом к вычислению значений функций вида (1.2), (1.3) служит прямое суммирование: общий член ряда остается прежним, а переменные n_1, n_2, n_3 или

[1] Доцент кафедры математики и теоретической механики, Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева, г. Саранск; syal1@yandex.ru.

N изменяются в больших, но конечных пределах, обеспечивающих достижение заданной точности. Например,

$$\sum_{N=-\infty}^{\infty} u_N \approx \sum_{N=-N_0}^{N_0} u_N. \tag{1.4}$$

В связи с тем, что скорость сходимости рядов при малых рангах мультиполей M невелика, такой метод малоэффективен.

При использовании многопроцессорных ЭВМ суммирование можно ускорить, назначив каждому узлу системы диапазон значений N, лежащий в рамках исходного $-N_0 \ldots N_0$. Но более эффективен способ ускорения сходимости, экономящий вычислительные ресурсы. Он основан на замене ряда другим, имеющим ту же сумму, при этом слагаемые полученного ряда убывают гораздо быстрее. С этой целью для рядов (1.2) может быть использовано тета-преобразование [3, 4].

Применение этого преобразования к суммам (1.3) затруднено, поскольку размерности пространства и периодической цепочки не совпадают: в трехмерное пространство "вкладывается" одномерная, а не трехмерная, как в (1.2), периодическая структура. Помимо этого, в случае трехмерной решетки аргумент $\vec{x}$ можно считать ограниченным ячейкой периодичности. Если гармоническая функция периодична относительно одномерной цепочки, то ограничена лишь одна из координат: $|x_1| \le r/2$.

В настоящей работе предлагается метод улучшения сходимости рядов (1.3), не основанный на тета-преобразовании.

2. Некоторые свойства мультиполей

Предварительно перечислим свойства функций (1.1), которые будут использованы впоследствии.

Очевидно, значение (1.1) не зависит от порядка дифференцирования по координатам, поэтому мультиполь симметричен по всем своим индексам.

Поскольку любой мультиполь есть гармоническая функция и

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} L_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x}) = L_{i_1 \cdots i_M jk}(\vec{x}),$$

то его свертка по двум любым индексам равна нулю:

$$L_{i_1 \cdots i_M jj}(\vec{x}) = 0. \tag{2.1}$$

Так как $|\vec{x}|$ – четная функция $\vec{x}$, то функции (1.1) являются четными, если M (число операций дифференцирования по координате) делится на 2, и нечетными в противном случае. Это утверждение справедливо и для функций (1.2), (1.3), причем для рядов (1.2) оно доказано в [5]. Доказательство для рядов (1.3) полностью аналогично; в нем используется бесконечность цепочки, по которой происходит суммирование.

В явном виде мультиполь M-го ранга (1.1) задается формулой

$$L_{i_1 \cdots i_M} = (-1)^M \sum_{k=0}^{\lceil M/2 \rceil} (-1)^k \frac{(2M-2k-1)!!}{|\vec{x}|^{2M-2k+1}} \delta_{(i_1 i_2} \ldots \delta_{i_{2k-1} i_{2k}} x_{i_{2k+1}} \ldots x_{i_M)}. \tag{2.2}$$

Здесь $\lceil y \rceil$ – целая часть y, взятая с избытком, δ_{jk} – дельта-символ Кронекера. По индексам, взятым в круглые скобки, производится симметризация без деления на число слагаемых.

В частности, при $M = 1, 2, 3$ равенство (2.2) дает

$$L_{i_1}(\vec{x}) = -\frac{x_{i_1}}{|\vec{x}|^3},\ L_{i_1 i_2}(\vec{x}) = 3\frac{x_{i_1 i_2}}{|\vec{x}|^5} - \frac{1}{|\vec{x}|^3}\delta_{i_1 i_2},$$
$$L_{i_1 i_2 i_3} = -15\frac{x_{i_1 i_2 i_3}}{|\vec{x}|^7} + \frac{3}{|\vec{x}|^5}(\delta_{i_1 i_2}x_{i_3} + \delta_{i_1 i_3}x_{i_2} + \delta_{i_2 i_3}x_{i_1}).$$

С увеличением M сложность выражений быстро растет.

Из (1.1) и (2.2) следует, что мультиполь M-го ранга есть однородная функция $\vec{x}$ порядка $-(M+1)$. Следовательно, существует такая константа $C(M)$, что

$$|L_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x})| \leq \frac{C(M)}{|\vec{x}|^{M+1}}. \tag{2.3}$$

Оценим эту постоянную.

Количество слагаемых, отвечающих каждому k в (2.2), равно

$$C_M^{M-2k} \cdot \frac{(2k)!}{(2!)^k k!} = \frac{M!}{2^k k!(M-2k)!}.$$

В самом деле, из M возможных индексов $M - 2k$ выделяются координатам вектора $\vec{x}$, а остальные $2k$ – символам Кронекера. Эти $2k$ номеров $i_1, \ldots, i_{2k}$ надо разбить на k пар и учесть симметрию дельта-символов, что и дает указанное выше число слагаемых.

Слагаемые (2.2) максимальны по модулю, если вектор $\vec{x} = (|\vec{x}|,\ 0,\ 0)$. В этом случае

$$L_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x}) = \frac{(-1)^M M!}{2^M |\vec{x}|^{M+1}} \sum_{k=0}^{\lceil M/2 \rceil} (-1)^k A_k,\ A_k = \frac{(2M-2k)!}{k!(M-k)!(M-2k)!}.$$

Поскольку все A_k положительны, сумма является знакочередующейся и по модулю не превышает A_{k_0} – наибольшего из A_k. Тем самым,

$$C(M) = \frac{M!}{2^M} \cdot \frac{(2M-2k_0)!}{k_0!(M-k_0)!(M-2k_0)!} \tag{2.4}$$

Чтобы вычислить k_0, найдем наибольшее значение k, при котором $A_{k+1}/A_k \geq 1$, и учтем, что $0 \leq k_0 \leq \lceil M/2 \rceil$. В итоге

$$k_0 = \left\{ \begin{array}{c} 0,\ M \leq 4; \\ \left\lceil \frac{2M-2-\sqrt{2M(M+1)}}{4} \right\rceil,\ M \geq 5. \end{array} \right. \tag{2.5}$$

3. Метод суммирования рядов

Основная идея предлагаемого метода быстрого суммирования заключается в том, что узлы цепочки, по которым происходит суммирование, разбиваются на “ближнюю” и “дальнюю” группы. По узлам “ближней” группы суммируются сами мультиполи, а по узлам “дальней” – их тейлоровские разложения по координатам $\vec{x}$:

$$L^{\infty}_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x}) \approx \sum_{N=-N_0}^{N_0} L_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \sum_{|N|>N_0} \sum_{K=0}^{D} \frac{1}{K!} L_{i_1 \cdots i_M j_1 \cdots j_k}(-\vec{r}_N) x_{j_1} \cdot \ldots \cdot x_{j_K}. \tag{3.1}$$

Число N_0, задающее границу двух групп, предполагается достаточно большим: разложения мультиполей в ряд Тейлора должны сходиться, а значит, $|\vec{x}|$ достаточно мал по сравнению с $|\vec{r}_N|$. Учет "дальних" слагаемых должен повысить точность вычислений по сравнению с методом прямого суммирования (1.4); при фиксированной точности это приведет к снижению количества задействованных узлов $2N_0+1$.

Избавимся от суммирования в бесконечных пределах. Для этого предварительно введем обозначение

$$L'_{i_1\cdots i_M}(\vec{0}) = \sum_{N\neq 0} L_{i_1\cdots i_M}(-\vec{r}_N). \tag{3.2}$$

Эта величина зависит лишь от набора индексов и от взаимного расположения цепочки узлов, по которым происходит суммирование. С целью более подробного ее исследования применим теорию тензорных функций [6].

Для изучаемой цепочки Ox_1 – поворотная ось бесконечного порядка. Координатные плоскости Ox_1x_2 и Ox_1x_3, проходящие через нее, служат плоскостями зеркальной симметрии. Зеркальной является и плоскость Ox_2x_3, перпендикулярная оси Ox_1. Тем самым, величина (3.2) имеет симметрию текстуры $m\cdot\infty : m$, которая задается тензорным базисом $\vec{\delta}$, $\vec{b}$. Здесь и далее $\vec{\delta} = \vec{e}_1^{\,2} + \vec{e}_2^{\,2} + \vec{e}_3^{\,2}$ – символ Кронекера, $\vec{b} = \vec{e}_1$, векторы $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$, $\vec{e}_3$ – орты координатных осей. С учетом равенства (2.1) и симметрии мультиполей по индексам можно записать

$$\begin{aligned} L'_{i_1i_2}(\vec{0}) &= \frac{A_2}{r^3}(\delta_{i_1i_2} - 3b_{i_1}b_{i_2}),\\ L_{i_1i_2i_3i_4}(\vec{0}) &= \frac{A_4}{r^5}(\delta_{(i_1i_2}\delta_{i_3i_4)} - 5\delta_{(i_1i_2}b_{i_3}b_{i_4)} + 35b_{i_1}b_{i_2}b_{i_3}b_{i_4}). \end{aligned} \tag{3.3}$$

Аналогичные выражения для мультиполей любого порядка могут быть легко получены методом неопределенных коэффициентов.

Чтобы найти множители A_2, A_4, надо подставить в (3.2) и (3.3) какой-либо конкретный набор индексов. Например,

$$L'_{11}(\vec{0}) = -\frac{2A_2}{r^3} = \sum_{N\neq 0}\frac{1}{|rN|^3}.$$

В итоге $A_2 = -2\zeta(3)$; дзета-функция Римана $\zeta(q)$ определяется равенством

$$\zeta(q) = \sum_{N=1}^{\infty} N^{-q}.$$

Таким же образом, $A_4 = 6\zeta(5)$; коэффициент A_6 для тензора 6-го ранга выражается через $\zeta(7)$ и т.д.

Очевидно, при нечетных рангах M значение (3.2) равно нулю.

Теперь можно преобразовать "дальнюю" часть (3.1):

$$\begin{aligned} L^{\infty}_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}) \;\approx\; & \sum_{N=-N_0}^{N_0} L_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}-\vec{r}_N) + \\ & + \sum_{\mathrm{even}(K+M),K\leq D}\frac{1}{K!}\Big[L'_{i_1\cdots i_Mj_1\cdots j_k}(\vec{0}) - 2\sum_{N=1}^{N_0} L_{i_1\cdots i_Mj_1\cdots j_k}(\vec{r}_N)\Big]x_{j_1}\cdot\ldots\cdot x_{j_K}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Здесь использовано свойство четности и нечетности мультиполей. Суммирование ведется лишь по таким K, что $K+M$ – четное число. В противном случае значения мультиполя

$(K+M)$-го порядка, просуммированные в симметричных пределах, дают нуль. Величины $L'_{i_1\cdots i_M j_1\cdots j_k}(\vec{0})$ уже известны из (3.3), а значения дзета-функций Римана могут быть вычислены заранее с любой требуемой точностью.

Оценим погрешность приближения (3.1) в зависимости от заданных $\vec{x}$, M и выбранных N_0, D:

$$R(\vec{x},M,D,N_0)=\left|\sum_{|N|>N_0}\left[L_{i_1\cdots i_M}(\vec{x}-\vec{r}_N)-\sum_{K=0}^{M}\frac{1}{K!}L_{i_1\cdots i_M j_1\cdots j_K}(-\vec{r}_N)x_{j_1}\cdot\ldots\cdot x_{j_K}\right]\right|.$$

Используя оценку остаточного члена формулы Тейлора для функции нескольких переменных в форме Лагранжа [7], получим

$$R(\vec{x},M,D,N_0)=\frac{1}{(D+1)!}\left|\sum_{|N|>N_0}L_{i_1\cdots i_M j_1\cdots j_{D+1}}(-\vec{r}_N+\theta_N\vec{x})x_{j_1}\cdot\ldots\cdot x_{j_{D+1}}\right|,$$

где $|\theta_N|\le 1$ для каждого узла N.

Число N_0 считается достаточно большим, поэтому определяющий вклад в значение мультиполя вносит слагаемое $-\vec{r}_N$ в аргументе; вектором $\theta_N\vec{x}$ можно пренебречь. Заменим мультиполь его наибольшим по модулю значением согласно (2.3). Поскольку свертка по индексам $j_1,\ldots,j_{D+1}$ происходит в пределах от 1 до 3, то

$$R(\vec{x},M,D,N_0)\le\frac{|x_1+x_2+x_3|^{D+1}}{(D+1)!}\sum_{|N|>N_0}\frac{C(M+D+1)}{|\vec{r}_N|^{M+D+2}}.$$

Наконец, учтем, что $|x_1+x_2+x_3|\le|\vec{x}|\sqrt{3}$, $|\vec{r}_N|=r|N|$, и заменим бесконечную сумму интегралом по dN в таких же пределах. В итоге

$$R(\vec{x},M,D,N_0)\le\frac{2}{r^{M+D+2}N_0^{M+D+1}}\cdot\frac{\left(|\vec{x}|\sqrt{3}\right)^{D+1}}{(D+1)!}\cdot\frac{C(M+D+1)}{M+D+1}\tag{3.5}$$

Итак, основной расчетной формулой является равенство (3.4), а погрешность оценивается согласно (3.5). Величина $C(M+D+1)$ определяется равенствами (2.4) и (2.5).

4. Реализация и тестирование метода

При программной реализации алгоритма исходными данными являются $\vec{x}$, M, набор индексов $i_1,\ldots,i_M$. Сюда же следует отнести и максимальный порядок производной D. Кроме того, пользователь вводит желаемую точность вычислений δ.

Для нахождения N_0 следует применить формулу (3.5): если $R(\vec{x},M,D,N_0)<\delta$, то

$$N_0>\left[\frac{2}{r^{M+D+2}}\cdot\frac{\left(|\vec{x}|\sqrt{3}\right)^{D+1}}{(D+1)!}\cdot\frac{C(M+D+1)}{M+D+1}\cdot\frac{1}{\delta}\right]^{1/(M+D+1)}.\tag{4.1}$$

При вычислении суммы ряда сначала следует найти N_0 из (4.1), а затем воспользоваться расчетной формулой (3.4).

Соответствующий код был написан в среде Delphi 2009 Embarcadero [8]. В программу были внесены значения дзета-функций $\zeta(3),\ldots,\zeta(9)$, а также явные выражения для мультиполей до 8-го ранга включительно. Предполагалось, что шаг решетки $r=1$.

Как отмечалось выше, сложность выражений (2.2) быстро растет с увеличением M, поэтому с целью сокращения времени вычислений были проделаны упрощения. Во-первых, одинаковые степени $|\vec{x}|$ и символы Кронекера выносились за скобку. Во-вторых, в (3.4) свертка по $j_1, \ldots, j_K$ "в лоб" привела бы к многократному вычислению мультиполей, у которых наборы индексов совпадают с точностью до перестановки. Вместо этого набор из K индексов разбивался всеми возможными способами на три подмножества: k_1 индексов "1", k_2 индексов "2", k_3 индексов "3". Для каждого набора $(k_1,\, k_2,\, k_3)$ надо вычислить значение выражения

$$L_{i_1 \cdots i_M 1 \cdots 12 \cdots 23 \cdots 3}(\vec{r}_N) x_1^{k_1} x_2^{k_2} x_3^{k_3}$$

и умножить его на количество однотипных слагаемых. Вместо такого умножения достаточно заменить множитель $1/K!$ в формуле (3.4) на $1/(k_1!k_2!k_3!)$.

С целью минимизировать погрешность, вызванную конечным представлением чисел в ЭВМ, суммирование в пределах от 1 до N_0 производилось в обратном порядке: `for N:=N0 downto 1 do...` Поскольку при увеличении $|N|$ аргумент мультиполя растет, само значение члена ряда убывает; поэтому обратный порядок суммирования позволяет "не потерять" малые слагаемые. При суммировании $L_{i_1 \cdots i_M}(\vec{x}-\vec{r}_N)$ число N также изменялось в пределах от N_0 до 1, на каждом шаге учитывались слагаемые с номерами N и $-N$. Случай $N=0$ рассматривался отдельно.

Для тестирования метода быстрого суммирования использовалась ЭВМ с процессором Intel Core i3 Duo 2.27GHz, 4 GB RAM под управлением Win 7 Home Basic (32bit). Требуемая точность вычислений составляла $\delta = 10^{-14}$ для векторов с длинами $|\vec{x}|$ в диапазоне от 1 до 10 и мультиполей 1–8 ранга с различными наборами индексов. Результаты вычислений сравнивались с аналогичными результатами, полученными методом прямого суммирования (1.4). Для контроля точности последнего применялось удвоение пределов суммирования N_0. В ходе сравнения были получены следующие выводы:

1. Результаты суммирования обоими методами сходятся к одним и тем же пределам. Поскольку сходимость метода прямого суммирования не вызывает сомнений, это подтверждает и корректность предлагаемого подхода.

2. При малых рангах M вычисления по формуле (3.4) многократно опережают метод прямого суммирования по быстродействию. Например, при $|\vec{x}| = 1$ для вычисления $L_1^\infty(\vec{x})$ по формуле (1.4) потребовалось около 7 секунд машинного времени, при этом $N_0 = 20480000$. Использование равенства (3.4) позволило получить результат практически мгновенно, причем значение N_0 составило 1708 (при $D=3$).

3. При использовании метода быстрого суммирования величина N_0 быстро уменьшается с ростом D. Так, для $M=1$ она составляет 1708 при $D=3$ и 41 – при $D=7$. При таком снижении числа узлов суммирования потери точности не произошло.

Итак, предлагаемый способ суммирования является достаточно точным и быстрым.

Работа выполнена в рамках проекта 14.B37.21.0176 ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 гг.

Список литературы

1. Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П., *Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов*, Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, М., 1984, 352 с.

2. Butter K., Bomans P. H. H., Frederic P. M., Vroege G. J. and Philipse A. P., "Direct observation of dipolar chains in iron ferrofluids by cryogenic electron microscopy", *Nature materials*, **2** (2003), 88–91.

3. Crandall R. E., *Fast evaluation of Epstein zeta sums*, `http://people.reed.edu/~crandall/papers/epstein.pdf` (Accessed 21 September 2012).

4. Сыромясов А. О., "Быстрое суммирование тройных рядов с общим членом специального вида", *Труды Средневолжского математического общества*, **11**:1 (2009), 190–198.

5. Бердичевский А. Л., Бердичевский В. Л., "Обтекание идеальной жидкостью периодической системы тел", *Известия АН СССР. Механика жидкости и газа*, 1978, № 6, 3–18.

6. Лохин В. В., Седов Л. И., "Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов", *Прикладная математика и механика*, **27**:3 (1963), 393–417.

7. Фихтенгольц Г. М., *Курс дифференциального и интегрального исчисления : в 3 т. Т. 1*, Лань, СПб., 2009, 608 с.

8. *Delphi Reference*, `http://docwiki.embarcadero.com/RADStudio/en/Delphi_Reference` (Accessed 10 August 2012).

Summing of harmonic functions' series.

© **A. O. Syromyasov**[2]

Abstract. Functional series with harmonic general term tending to zero when the argument tends to infinity are considered, and the fast summation method for such series is proposed. As compared with direct summation, the method decreases the number of series' terms required for obtaining given accuracy on several orders. Numeric experiments confirm the method's convergence.

Key Words: functional series, improvement of convergence, harmonic function, multipole.

[2] Associate Professor of Mathematics and Theoretical Mechanics Chair, Mordovian State University named after N. P. Ogaryov, Saransk; syal1@yandex.ru.