Секция «Вычислительная математика, математическое моделирование и численные методы»

Модификация вариационных методов решения системы линейных уравнений с использованием аппарата q-дифференцирования

Игнатьева Мария Николаевна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Кафедра физической химии, Москва, Россия

E-mail: mariyaignatieva@mail.ru

Задача корректного решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) является важным направлением в вычислительной математике. Специфичность свойств СЛАУ во многих прикладных задачах при наличии погрешности в исходных данных приводит к поиску адаптивных методов, способных получать результат решения с заданной погрешностью. К ним можно отнести итерационные методы, использующие концепцию последовательного улучшения решения [1,3].

Общая система организации итерационного процесса решения СЛАУ $A_x = b$ имеет вид [1]

$$X_{k+1} = X_k - \tau_k(AX_k - b), \tag{1}$$

где X_k, X_{k+1} —- приближения решения СЛАУ на k-й и $(k+1)$-й итерациях;
τ_k —- шаг итерационного процесса.

Важным классом методов решения СЛАУ являются вариационные методы, во многом использующие методы нелинейной оптимизации. Они построены на существовании функционала $\Phi(x)$, минимизация которого эквивалента решению самой СЛАУ. В итерационной постановке ищется минимум $\Phi(X_{k+1})$, причем в качестве переменной, от которой он зависит, используется шаг τ_k.

Необходимое условие существования минимума $\Phi(X_{k+1})$ имеет вид:

$$\frac{d\Phi(X_{k+1})}{d\tau_k} = 0. \tag{2}$$

В работе предложена модификация вариационных методов решения СЛАУ с использованием аппарата q-исчисления [2]. Она заключается в изменении подхода к расчету их параметров, таких, как шаг спуска.

Определение q-производной имеет следующий вид [2,4]:

$$D_q f(x) = \begin{cases} \dfrac{f(qx) - f(x)}{qx - x}, x \neq 0 \\ \\ \dfrac{df(0)}{dx}, x = 0 \\ \\ \dfrac{df(x)}{dx}, q = 1 \end{cases} . \tag{3}$$

В результате анализа свойств q-производной показано, что может быть сформулировано альтернативное условие существования экстремума вида

$$D_q\Phi(X_{k+1}) = 0, \tag{4}$$

где q —- порядок производной.

С использованием (4) были найдены формулы для оценки шага τ_k для метода наискорейшего спуска и минимальной невязки с учетом применения. Так, формула τ_k для метода наискорейшего спуска использованием (4) имеет вид:

$$\tau_k = \frac{2}{(q+1)} \frac{(r_k, r_k)}{(r_k, Ar_k)}, \tag{5}$$

где $r_k = b - AX_k$ —- невязка.

Формула расчета шага τ_k для метода минимальных невязок использованием (4) имеет вид:

$$\tau_k = \frac{2}{(q+1)} \frac{(r_k, Ar_k)}{(r_k, Ar_k)}. \tag{6}$$

Показано, что порядок q-производной, фигурирующей в итерационном процессе, может зависеть от дополнительных условий связи между решениями на текущей и следующей итерациях. Это делает метод близким к методикам решения СЛАУ, использующим сопряженные направления.

Так, в качестве условий связи можно использовать требование сопряженности невязок r_k и r_{k+1} относительно некоторой матрицы P. Тогда условие связи имеет вид [3]:

$$(r_{k+1}, P \cdot r_k) = 0. \tag{7}$$

Тогда оценка порядка q-производной может быть вычислена из (7) и будет иметь вид:

$$q = \left| \frac{2\tau_k}{(r_k, P \cdot r_k)} (Ar_k, P \cdot r_k) - 1 \right|. \tag{8}$$

При проведении численного эксперимента показано, что предложенный подход для ряда задач может повысить точность решения. Использование в процессе (1) модификаций (5), (6) с расчетом порядка q-производной согласно (7) позволяет снизить погрешность расчета на величину до 40% от исходной. Показана адекватность предложенной методики выбора шага τ_k при решении предобусловленных СЛАУ.

Источники и литература

1) Авхадиев Ф.Г. Численные методы анализа. Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2013
2) Гаврилов В.И. Математический анализ: Учебное пособие для студентов учреждений высшего профессионального образования / В.И. Гаврилов, Ю.Н. Макаров, В.Г. Чирский. - М.: ИЦ Академия, 2013
3) Калиткин Н.Н. Численные методы. Учеб. пособие. – 2-е изд., исправленное. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011
4) Кац В.Г., Чен П. Квантовый анализ. М.: МЦНМО, 2005
5) Шарый С.П. Курс вычислительных методов. Учеб. пособие. – Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т. , 2014
6) E. J. C. Gouvêa, A. C. Soterroni, M. C. Scarabello, I. Y. Sumida, F. R. Corrêa, R. L. Galski and F. M. Ramos “Generalization of the Conjugate Gradient Optimization method using q-calculus” // IPDO 2013 : 4th Inverse problems, design and optimization symposium, 2013 June 26-28, Albi, ed. by O. Fudym, J.-L. Battaglia, G.S. Dulikravich et al., Albi ; Ecole des Mines d’Albi-Carmaux, 2013
7) Ubaid M. Al-Saggaf, Muhammad Moinuddin, Muhammad Arif, Azzedine Zerguine. Theq-Least Mean Squares algorithm // Signal Processing 111 (2015), pp. 50-60
8) P. C. Hansen. Regularization of discrete ill-posed problem // Numerical Algorithms 46 (2007) , pp. 189-194
9) P. C. Hansen, Deconvolution and regularization with Toeplitz matrices // Numer. Algo. 29 (2002), pp. 323–378
10) C. T. H. Baker, The Numerical Treatment of Integral Equations, Clarendon Press, Oxford, 1977; p. 665.