Секция «Вычислительная математика, математическое моделирование и численные методы»

Применение гиперкомплексной алгебры к численному дифференцированию

Научный руководитель – Кошелкин Андрей Васильевич

Симановский Марк Анатольевич

Студент (бакалавр)

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Факультет экспериментальной и теоретической физики, Москва, Россия

E-mail: marksimanovskiy@gmail.com

Зачастую в процессе решения некоторой проблемы перед исследователем ставится задача нахождения оптимальных параметров изучаемого объекта. Многие методы оптимизации тесно связаны с дифференцированием. Когда целевая функция имеет сложный для аналитического дифференцирования вид или не имеет аналитического выражения вовсе, а задана таблично или является детерминированным черным ящиком, применяются численные алгоритмы приближенного дифференцирования [1].

Среди численных методов дифференцирования выделяют односторонние и двусторонние разности, являющиеся следствиями из теоремы Лагранжа, с линейной или полиномиальной интерполяцией. Неустойчивость этого метода, а также способы борьбы с ней, основанные на сглаживании и регуляризации, обсуждались в работах [1-3]. Также встречается применение символьных методов дифференцирования [4], но их использование возможно лишь для аналитически заданных выражений, кроме того, оно сопряжено со значительным повышением времени работы и требуемых ресурсов ЭВМ.

В настоящей работе предлагается иной подход к решению данной проблемы.

Было рассмотрено разложение аналитической функции в ряд Тейлора вблизи точки, возмущенной на некоторую величину δ, не принадлежащей вещественной прямой. Из бинома Ньютона получено разбиение ряда на линейную комбинацию рядов по базису степеней этой величины. Учитывая факториалы в знаменателях членов разложения до $O(x^n)$, построена таблица умножения базисных гиперкомплексных единиц для n-мерной алгебры с делителем нуля над полем вещественных чисел Φ^n (таблица 1). Очевидно, что данная алгебра над полем является линейным пространством над вещественными числами, кроме того, эта алгебра также является кольцом. Тогда значение такой функции можно разложить по базису в соответствии с (1).

$$\vec{f}(x_0+\delta) = \sum_{j=0}^{n} \frac{d^j f}{dx^j}\,|_{x=x_0}\, \vec{\delta}_j \tag{1}$$

Таким образом производной i-ого порядка функции $f(x)$ в точке x_0 является проекция вектора $f(x_0+\delta)$ на ось i-ого базиса гиперкомплексной единицы δ_i n-мерного пространства Φ^n. Выражение (1) может быть обобщено для функций многих переменных и функций комплексного переменного. Источниками погрешности данного метода являются погрешность аппроксимации функции и погрешность округления машинной арифметики, определяемая методами хранения чисел в ЭВМ и операциями над ними.

Метод может быть использован для повышения устойчивости и точности алгоритмов, использующих дифференцирование, и может найти применение в задачах оптимизации и машинного обучения.

Источники и литература

1) Бахвалов Н., Жидков Н., Кобельков Г. Численные методы. СПб.: Физматлит, 2003.
2) В. М. Вержбицкий. О неустойчивости порядка симметричных формул численного дифференцирования и интегрирования // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2015, том 55, № 6, с. 928–932
3) Wang, Z., Wang, H., & Qiu, S. A new method for numerical differentiation based on direct and inverse problems of partial differential equations. // Applied Mathematics Letters, 2015, 43, 61–67.
4) Новиков М.Ю. Использование символьных вычислений в задачах конечномерной оптимизации // Инновации в науке: сб. ст. по матер. XLIII междунар. науч.-практ. конф. No 3(40). – Новосибирск: СибАК, 2015.

Таблица 1. Умножение базисных единиц

$\times$	$\boldsymbol{1}$	δ_1	δ_2	δ_3	$\ldots$	δ_j	δ_n
1	1	δ_1	δ_2	δ_3	$\ldots$	δ_j	δ_n
δ_1	δ_1	$2\delta_2$	$3\delta_3$	$4\delta_4$		$\ldots$	0
δ_2	δ_2	$3\delta_3$	$6\delta_4$	$10\delta_5$			$\ldots$
δ_3	δ_3	$4\delta_4$	$10\delta_5$	$20\delta_6$			
$\ldots$	$\ldots$				$\ddots$		
δ_i	δ_i	$\ldots$				$C_{i+j}^{j}\delta_{i+j}$, $i+j \leq n$	
δ_n	δ_n	0	$\ldots$				0