Kaip matematiniai paketai gali pagelbėti matematikams

R. Čiegis

Vilniaus Gedimino technikos universitetas
Saulėtekio al. 11, Vilnius, Lietuva
e-mail: rc@vgtu.lt

Seminaras "Skaičiavimo matematika ir matematinis modeliavimas" 6 (246)

Matematiniai paketai ir įrankiai – vakar, šiandien, rytoj

Matematiniai paketai ir programavimo įrankiai (pvz. C++) išplečia mūsų kūrybines, teorines bei taikymų galimybes. Jie sudaro labai svarbią profesionalaus matematiko naudojamų įrankių dalį (toolbox).

- Bendra tendencija: siekiama "nestabdyti" matematinių metodų galimybių dėl rutininių veiksmų gausos ir pertvarkymų klaidų triukšmo. Atvirkščiai, siekiama smarkiai išplėsti matematikos rezultatų aprėptį.

Matematiniai paketai ir įrankiai – vakar, šiandien, rytoj

Matematiniai paketai ir programavimo įrankiai (pvz. C++) išplečia mūsų kūrybines, teorines bei taikymų galimybes. Jie sudaro labai svarbią profesionalaus matematiko naudojamų įrankių dalį (toolbox).

- Bendra tendencija: siekiama "nestabdyti" matematinių metodų galimybių dėl rutininių veiksmų gausos ir pertvarkymų klaidų triukšmo. Atvirkščiai, siekiama smarkiai išplėsti matematikos rezultatų aprėptį.
- V. Bradžio "Keturženklės matematinės lentelės", logaritminė liniuotė.

Matematiniai paketai ir įrankiai – vakar, šiandien, rytoj

Matematiniai paketai ir programavimo įrankiai (pvz. C++) išplečia mūsų kūrybines, teorines bei taikymų galimybes. Jie sudaro labai svarbią profesionalaus matematiko naudojamų įrankių dalį (toolbox).

- Bendra tendencija: siekiama "nestabdyti" matematinių metodų galimybių dėl rutininių veiksmų gausos ir pertvarkymų klaidų triukšmo. Atvirkščiai, siekiama smarkiai išplėsti matematikos rezultatų aprėptį.
- V. Bradžio "Keturženklės matematinės lentelės", logaritminė liniuotė.
- Kalkuliatoriai, programuojami kalkuliatoriai.

Matematiniai paketai ir įrankiai – vakar, šiandien, rytoj

Matematiniai paketai ir programavimo įrankiai (pvz. C++) išplečia mūsų kūrybines, teorines bei taikymų galimybes. Jie sudaro labai svarbią profesionalaus matematiko naudojamų įrankių dalį (toolbox).

- Bendra tendencija: siekiama "nestabdyti" matematinių metodų galimybių dėl rutininių veiksmų gausos ir pertvarkymų klaidų triukšmo. Atvirkščiai, siekiama smarkiai išplėsti matematikos rezultatų aprėptį.
- V. Bradžio "Keturženklės matematinės lentelės", logaritminė liniuotė.
- Kalkuliatoriai, programuojami kalkuliatoriai.
- Kompiuteriai, Maple, Matlab, Mathematica.

Apibendrintoji Šredingerio lygtis (WIAS, Berlynas):

$$i\partial_z\psi + \sum_{m=2}^{M} \frac{\beta_m}{m!}(i\partial_\tau)^m\psi + \frac{n_2}{c}\big(\omega_0 + i\partial_\tau\big)|\psi|^2\psi = 0.$$

Vienakryptis Maksvelo lygties artinys

$$(\partial_z + \widehat{\beta})u + \frac{4n_2}{3c}\partial_t(u^3) = 0,$$

nelokalus operatorius $\widehat{\beta}$ apibrėžtas taip:

$$\widehat{\beta}u(z,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(\omega)U(z,\omega)e^{-i\omega t}\frac{d\omega}{2\pi},$$

čia ω yra kampinis dažnis.

Pseudo-spektrinis Galiorkino metodas

Sprendžiame netiesinį uždavinį skaidymo metodu, tada jo tiesinė dalis Furje koeficientams aprašoma paprastomis diferencialinėmis tiesinėmis lygtimis

$$\frac{dU}{dz} + \beta(\omega) U(z, \omega) = 0.$$

Tokias lygtis integruojame tiksliai bet kokiam dažniui visame z kitimo intervale.

Furje transformacija

Tiesioginė transformacija (fizikų pasirinkimas)

$$\widehat{F}(\widetilde{\omega}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{i2\pi\widetilde{\omega}t} dt.$$

Atvirkštinė transformacija

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{F}(\widetilde{\omega})\, e^{-i2\pi\widetilde{\omega}t} d\widetilde{\omega}.$$

Fastest Fourier Transform in the West FFTW

KaDeWe (Kaufhause des Westens) Berlyne!

Forward transform

$$Y_k = \sum_{n=0}^{N-1} X_n \, e^{-i2\pi kn/N}, \quad k = 0, \dots, N-1.$$

Backward transform

$$Y_k = \sum_{n=0}^{N-1} X_n \, e^{i2\pi kn/N}, \quad k = 0, \dots, N-1.$$

Modeliavimo algoritme įprastinius dažnius turime perskaičiuoti į kampinius dažnius, bet kokius?

Teigiami ir neigiami kampiniai dažniai

Forward transform

$$Y_k = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} X_n \, e^{-i2\pi kn/N}, \quad k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1.$$

Backward transform

$$Y_k = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} X_n \, e^{i2\pi kn/N}, \quad k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1.$$

!!! FFTW numeracija ($N = 8$):

$$0,\ 1,\ 2,\ 3,\ -4,\ -3,\ -2,\ -1,$$
$$n = -(N - n'), \quad \text{kai} \ \ n' \geq N/2.$$

Furje eilutės

Funkcija $f(t)$ nelygi nuliui tik intervale $[-T/2, T/2]$:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \, e^{-i2\pi(n/T)t},$$

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \, e^{i2\pi(n/T)t} dt.$$

Taigi $c_n = \frac{1}{T}\widehat{F}(\widetilde{\omega}_n)$, $\widetilde{\omega}_n = n/T$, $\triangle\widetilde{\omega} = \widetilde{\omega}_{n+1} - \widetilde{\omega}_n = 1/T$:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{F}(\widetilde{\omega}_n) \, e^{-i2\pi\widetilde{\omega}_n t} \triangle\widetilde{\omega}.$$

$$
\begin{aligned}
c_n &= \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} f(t)\, e^{i2\pi(n/T)t} dt \\
&\approx \frac{1}{T}\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} f_k\, e^{i2\pi(n/T)k\triangle t}\triangle t \\
\left(\triangle t = \frac{T}{N}\right) &= \frac{1}{N}\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} f_k\, e^{i2\pi nk/N} = \widehat{F}_n.
\end{aligned}
$$

Taigi

$$
f_k = f(t_k) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \widehat{F}_n\, e^{-i2\pi nk/N}
$$

1 pavyzdys. Apskaičiuokime spektrinį skleidinį lazerio bangos

$$b(t) = g(t)\, e^{-i(\omega_L - \omega_R)}, \quad -512 \le t \le 512,$$

čia $\omega_L = 0.6$ bangos kampinis dažnis, o $\omega_R = 1.658$ yra etaloninis dažnis (reference frequency).

Funkcijos spektras turi grupuotis apie $\omega = -1.058$ reikšmę.

$N = 256$

0.478602	0.00040674
0.484738	0.000526614
0.490874	0.000667044
0.49701	0.000815933
0.503146	0.000947675
0.509282	**0.00102703**
0.515418	0.00102657
0.521553	0.000946462
0.527689	0.000814353
0.533825	0.000665444
0.539961	0.000525193

Neteisingas dažnis, net ir ženklas skiriasi. Bet kodėl?

- Pasirinktas $N = 256$ yra per mažas, kad aprašytume mus dominantį spektro intervalą.

- Pasirinktas $N = 256$ yra per mažas, kad aprašytume mus dominantį spektro intervalą.
- Dabar matome tik spektrą intervale [-0.785398, 0.785398].

- Pasirinktas $N = 256$ yra per mažas, kad aprašytume mus dominantį spektro intervalą.
- Dabar matome tik spektrą intervale [-0.785398, 0.785398].
- Didesnio dažnio modos sujungiamos su periodo liekanų klasės žemomis modomis

$$\omega_S = -1.058 + 1.5708 = 0.512.$$

N= 512

−1.11674	0.000132729
−1.1106	0.000176663
−1.09833	0.000310057
−1.08606	0.000526614
−1.07379	0.000815933
−1.06151	**0.00102703**
−1.04924	0.000946462
−1.03697	0.000665444
−1.0247	0.000405569
−1.01243	0.000233841
−1.00016	0.000132317

Globaliosios optimizacijos uždaviniai

Sprendžiame nelokalųjį uždavinį

$$L^{\alpha} u = f, \quad X \in \Omega$$

$0 < \alpha < 1$, o L yra elipsinis operatorius

$$Lu = -\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k(X) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right).$$

Funkciją $g(t) = t^{\beta-\alpha}$, $\beta = 1, 2$ aproksimuojame geriausia racionalia trupmena.

Sprendžiame globaliosios optimizacijos uždavinį

$$\min_{p_j, q_j} \left\| g - \frac{P_m}{Q_k} \right\|_\infty = \min_{p_j, q_j} \max_{0 \le t \le 1} \left| g(t) - \frac{p_0 t^m + p_1 t^{m-1} + \ldots + p_m}{t^k + q_1 t^{k-1} + \ldots + q_k} \right| .$$

Net du globaliosios optimizacijos uždaviniai (2 in 1, dar daugiau skonio!)

Bendruoju atveju tikslo funkcijos globaliojo optimumo radimui nežinome jokių konstruktyvių sąlygų (lokaliojo ekstremumo atveju situacija esmingai komfortiškesnė).

Jeigu

$$\left\| g - \frac{P_m}{Q_k} \right\|_\infty \leq \varepsilon$$

tai funkcija ($\beta = 1$):

$$U_r = c_0 A^{-1} f + \sum_{i=1}^{k} c_i (A - d_i I)^{-1} f$$

aproksimuoja nelokalaus uždavinio sprendinį tikslumu:

$$\|U_r - U\|_A \leq \varepsilon \|f\|_{A^{-1}}.$$

Teorema, kuri išduoda paslaptį, tik... reikia suprasti jos žinią.

THEOREM

Jeigu $g \in C[0,1]$*, tai egzistuoja geriausia jos aproksimacija racionalia trupmena. Šios aproksimacijos paklaidos modulis bent* $(m+k+2)$ *taškuose* t_j *yra lygus didžiausiai paklaidai, o ženklai alternuoja.*

Teorema, kuri išduoda paslaptį, tik... reikia suprasti jos žinią.

Theorem

Jeigu $g \in C[0,1]$, *tai egzistuoja geriausia jos aproksimacija racionalia trupmena. Šios aproksimacijos paklaidos modulis bent* $(m+k+2)$ *taškuose* t_j *yra lygus didžiausiai paklaidai, o ženklai alternuoja.*

- NP sudėtingumo uždaviniai.

Teorema, kuri išduoda paslaptį, tik... reikia suprasti jos žinią.

Theorem

Jeigu $g \in C[0,1]$*, tai egzistuoja geriausia jos aproksimacija racionalia trupmena. Šios aproksimacijos paklaidos modulis bent* $(m+k+2)$ *taškuose* t_j *yra lygus didžiausiai paklaidai, o ženklai alternuoja.*

- NP sudėtingumo uždaviniai.
- Lengva patikrinti, ar duotoji funkcija yra sprendinys, bet labai sunku surasti patį sprendinį.

1 pavyzdys. Patikrinkime, ar Maple suranda optimalų sprendinį, kai $\beta = 1$, $\alpha = 0.5$, $m = k = 1$.
Dėkui Olgai ir Andrejui už skaičiavimų atlikimą, nepriklausomomi ekspertai garantuoja objektyvumą.

$$\frac{P_1(t)}{Q_1(t)} = \frac{1.33981t + 0.0183679}{t + 0.420077}.$$

- Kiek lokalių ekstremumų turi paklaidos funkcija?

1 pavyzdys. Patikrinkime, ar Maple suranda optimalų sprendinį, kai $\beta = 1$, $\alpha = 0.5$, $m = k = 1$.
Dėkui Olgai ir Andrejui už skaičiavimų atlikimą, nepriklausomomi ekspertai garantuoja objektyvumą.

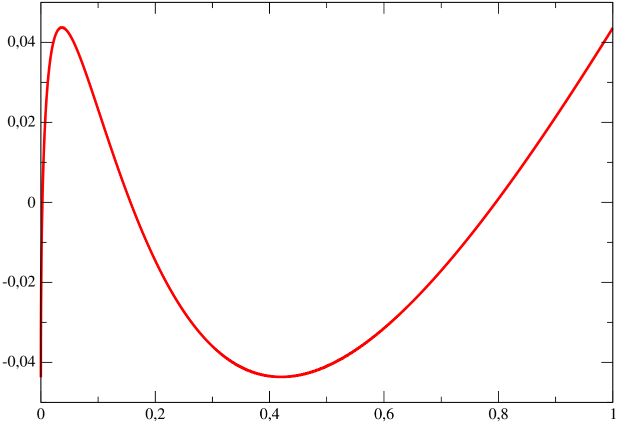
$$\frac{P_1(t)}{Q_1(t)} = \frac{1.33981t + 0.0183679}{t + 0.420077}.$$

- Kiek lokalių ekstremumų turi paklaidos funkcija?
- Ar didžiausio modulio ekstremumai alternuoja?

1 pavyzdys. Patikrinkime, ar Maple suranda optimalų sprendinį, kai $\beta = 1$, $\alpha = 0.5$, $m = k = 1$.
Dėkui Olgai ir Andrejui už skaičiavimų atlikimą, nepriklausomomi ekspertai garantuoja objektyvumą.

$$\frac{P_1(t)}{Q_1(t)} = \frac{1.33981t + 0.0183679}{t + 0.420077}.$$

- Kiek lokalių ekstremumų turi paklaidos funkcija?
- Ar didžiausio modulio ekstremumai alternuoja?
- Ar ekstremumų moduliai sutampa?



4 alternuojantys ekstremumai!

- Lokalieji ekstremumai:

$$E_1 = -0.0437251, \quad E_2 = 0.0437127, \quad E_3 = -0.0436341,$$
$$E_4 = \ \ 0.0435886.$$

- Lokalieji ekstremumai:

$$E_1 = -0.0437251, \quad E_2 = 0.0437127, \quad E_3 = -0.0436341,$$
$$E_4 = \ \ 0.0435886.$$

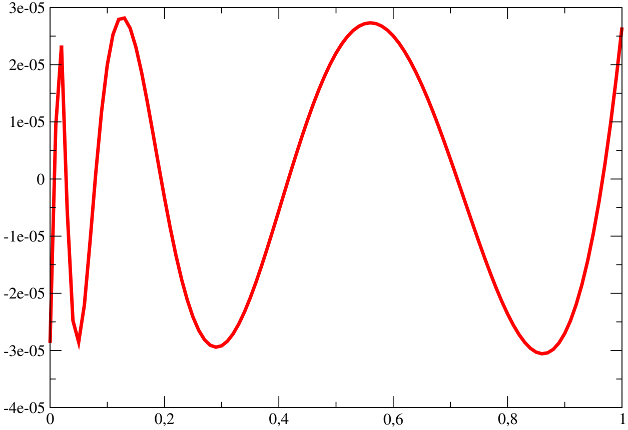
- Andrejus atliko paiešką simplekso metodu:

$$E_1 = -0.043689, \quad E_2 = 0.0436886, \quad E_3 = -0.0436909,$$
$$E_4 = \ \ 0.0436865.$$

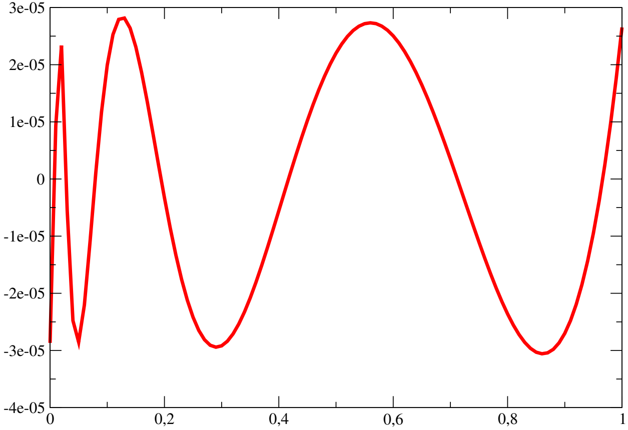
2 pavyzdys. Patikrinkime, ar uždavinio $\beta = 1$, $\alpha = 0.25$, $m = k = 5$ optimalus sprendinys yra:

$$c_0 = 2.86755e-5;\ c_1 = 1.27509e-3;\ c_2 = 9.58752e-3;$$
$$c_3 = 4.86842e-2;\ c_4 = 2.55382e-1;\ c_5 = 8.92729;$$
$$d_0 = 0;\ d_1 = 1.59055e-4;\ d_2 = 3.96701e-3;$$
$$d_3 = 4.47241e-2;\ d_4 = 0.397136;\ d_5 = 10.7506;$$

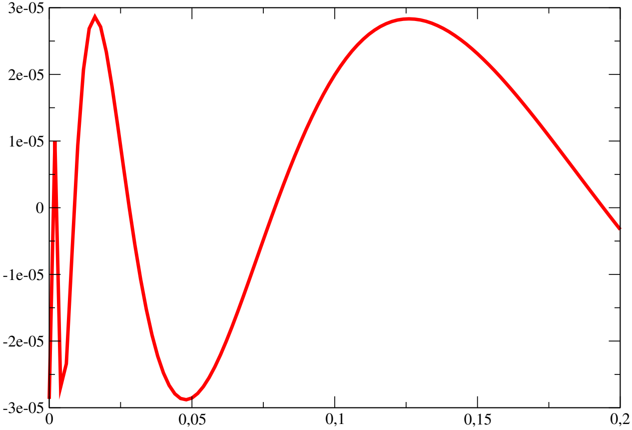
Bent 12 alternuojančių ekstremumų.



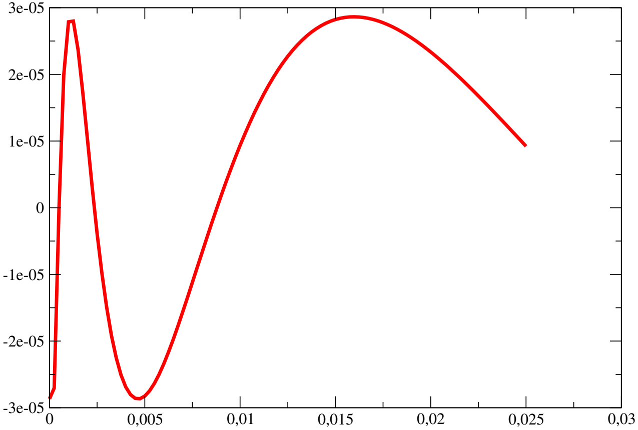
- Alternuojančių ekstremumų tikrai per mažai...



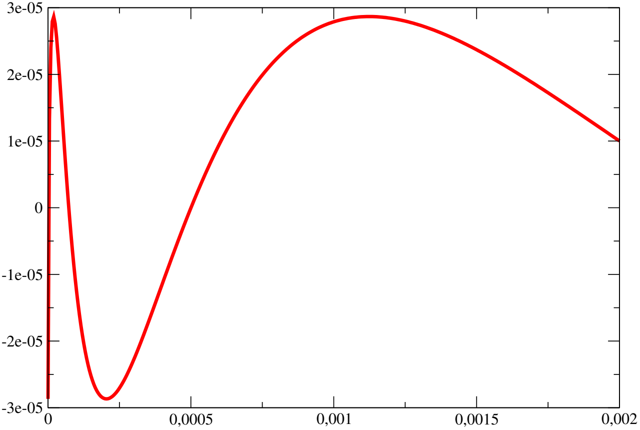
- Alternuojančių ekstremumų tikrai per mažai...
- O gal mes nematome, to, kas padėta? Patikrinkime!



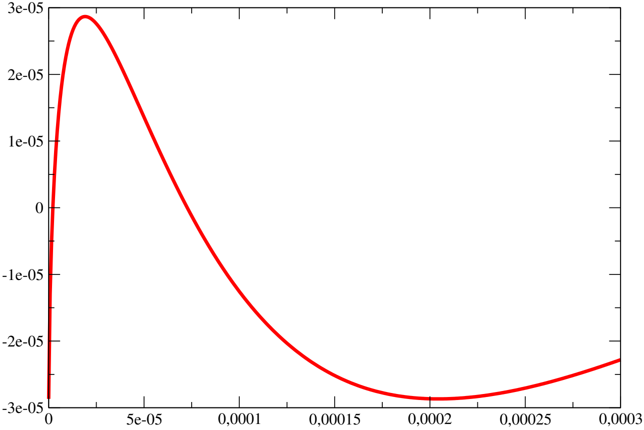
Radome 6 alternuojančius ekstremumus, kai $t > 0.025$



Radome 8 alternuojančius ekstremumus, kai $t > 0.0025$



Radome 10 alternuojančių ekstremumų, kai $t > 0.0001$.



Radome visus 12 alternuojančių ekstremumų!

Globaliojo ekstremumo sąlyga !!!

$$\begin{cases} P_m(\tilde{t}_j) + (-1)^j Q_k(\tilde{t}_j) E = g(\tilde{t}_j), \\ j = 1, 2, \ldots, k + m + 2, \\ \tilde{t}_j = \tilde{t}_j(p_0, \ldots, p_m, q_1, \ldots, q_k). \end{cases}$$

Gavome netiesinių lygčių sistemą (panašiai, kaip lokaliojo ekstremumo atveju), tik sąlygos taškams $\tilde{t}_j$ nėra užrašytos funkcine forma (tai polinomo alternuojančių ekstremumų taškai).

Algoritmas

1. Pasirenkame pradinius taškus $\tilde{t}_j^0$, $n = 0$.
2. Kol nepasiektas reikiamas tikslumas, atliekame ciklą:

 2.1 Sprendžiame netiesinių lygčių sistemą imdami $\tilde{t}_j^n$, randame $R_{m,k}^{n+1}(t)$.

 2.2 Patiksliname $R_{m,k}^{n+1}(t)$ paklaidų alternuojančių ekstremumų taškų aibę $\tilde{t}_j^{n+1}$.

 2.3 Randame funkcijos $R_{m,k}^{n+1}(t)$ paklaidų globaliojo ekstremumo tašką ir, jei reikia, patiksliname $\tilde{t}_j^{n+1}$ aibę.

 2.4 Padidiname $n = n + 1$.