План исследования

Темой исследований является приложение методов Монте-Карло и Квази Монте-Карло для решения систем линейных алгебраических уравнений.

Полученные в ходе исследований результаты могут быть применены для решения задач математической физики, сводимых к интегральным уравнениям второго рода, в теории массового обслуживания, опционного ценообразованиия, телекоммуникации и прочих областей.

Проведенные исследования

- Был предложен и обоснован стохастический метод для экспериментальной оценки погрешности методов квази Монте-Карло (далее КМК).

  Как известно, метод КМК для оценки интеграла состоит в применении кубатурной формулы, узлы которой являются квазислучайными векторами. Одной из сложностей в применении метода КМК является тот факт, что трудно получить теоретическое значение оценки погрешности метода $R_N[f]$, где

  $$R_N[f] = \int\limits_{[0,1]_s} f(X)dX - \sum_{j=1}^{N} A_j f(X_j).$$

  Предлагается следующий стохастический метод оценки погрешности. Берется оценка метода КМК $J_0 = \frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} f(X_j)$, где X_j – квазислучайные вектора (размерности s). Для оценки ее погрешности строится набор стохастических оценок вида

  $$J = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f(\{X_j + \Xi\}),$$

  где $\Xi \in [0,1]^s$ – случайный вектор размерности s, компоненты которого независимы и равномерно распределены на [0,1], {} - операция взятия дробной части. Полученные стохастические оценки усредняются, и для искомой оценки погрешности строится доверительный интервал. Полученная стохастическая оценка сверху для ошибки КМК имеет практическую полезность, так как теоретическая оценка через неравенство Коксма-Хлавки сложна для вычисления.

- Предложена и изучена модификация методов Монте-Карло (МК) и квази Монте-Карло (далее - КМК) для решения систем линейных алгебраических уравнений, применимая, в том числе, при нарушении условия мажорантной сходимости для методов МК; указаны методы оптимизации предложенных оценок.

  Известно, что существуют определенные ограничения, налагаемые на класс задач, которые могут быть решены путем моделирования траекторий случайных процессов. Во-первых, это естественные ограничения, связанные с возможностью представления решения в виде интеграла по траекториям. Во-вторых, это ограничения, связанные с известным невысоким порядком убывания погрешности стохастических методов – для достижения точности порядка ε требуется проследить порядка $1/\varepsilon^2$ траекторий. Чтобы ослабить первое ограничение может быть использована предлагаемая модификация метода МК. Для ослабления второго ограничения эта модификация применяется для метода КМК по аналогии, что увеличивает скорость сходимости.

Идея модификации. Рассмотрим задачу решения системы линейных алгебраических уравнений вида $X = AX + F$. Применение метода МК предполагает оценку суммы ряда Неймана $X = \sum_{i=0}^{\infty} A^i F$. Модификация метода МК заключается в вычислении суммы конечного числа k слагаемых этой суммы:

$$X = F + AF + \ldots + A^k F + \varepsilon_k,$$

где ε_k – систематическая погрешность, такая, что $\|\varepsilon_k\| \leq \|A\|^{k+1} \frac{\|F\|}{1-\|A\|} \mapsto 0$ при $k \mapsto \infty$, если в качестве нормы взять спектральный радиус.

Если вектор X_0 есть начальное приближение для рассматриваемой системы линейных уравнений, то алгоритм модифицированного метода имеет следующий вид:

– $Z \leftarrow AX_0 + F$;
– на первом шаге вычисляется оценка $\xi_1 = \overline{AY}$, где $Y = AX_0 - X_0 + F$, $Z \leftarrow Z + \xi_1$;
– на втором шаге оценивается $\xi_2 = \overline{AY}$, где $Y = \xi_1$ – оценка, полученная на первом шаге, $Z \leftarrow Z + \xi_2$;
– на шаге k оценивается $\xi = \overline{AY}$, где $Y = \xi_{k-1}$ – оценка, полученная на шаге k-1, $Z \leftarrow Z + \xi_k$.

В качестве оценки X берется Z. Конструкция $\overline{AY}$ обозначает оценку произведения матрицы A и вектора Y, полученную с помощью метода МК.

- Было доказано, что предложенная модификация уменьшает конструктивную размерность, что упрощает применение квазислучайных чисел и увеличивает скорость сходимости по сравнению с квази Монте-Карло при решении систем линейных алгебраических уравнений.

  Также было доказано, что что модифицированный метод КМК точнее, чем модифицированный метод МК в $O(\frac{\sqrt{N}}{\ln N})$ и точнее, чем обычный КМК в $O(\ln^{s-1} N)$ раз, где s - средняя длина траектории в методе КМК.

- Была показана эффективность применения методов Монте-Карло и квази Монте-Карло совместно с методом верхней релаксации в ряде случаев.

Применение модифицированных методов МК и КМК дает следующие преимущества:

- ослабляется условие мажорантной сходимости, то есть при решении уравнения $X = AX + F$ условие $|\lambda_1(|A|)| < 1$ заменяется менее строгим условием $|\lambda_1(A)| < 1$, где λ_1 – максимальное собственное число матрицы системы, $|A|$ — матрица, составленная из модулей компонент матрицы A;

- остаток модифицированного метода КМК убывает быстрее, чем остаток КМК;

- свойства параллелизма алгоритма, унаследованные им от МК и КМК, имеют место за счет введения крупнозернистого параллелизма, что позволяет ускорить вычисления с помощью модифицированного метода КМК при наличии нескольких процессоров;
- модифицированные методы МК и КМК могут сочетаться с методами увеличения скорости сходимости итерационного процесса (в частности, с методом верхней релаксации).

Проект будущих исследований

- Приложение методов Монте-Карло к методам Метрополиса и моделированию наноструктур. Исходная система линейных алгебраических уравнений вида $X = AX + F$ эквивалентна системе с новой переменной

  $$\lambda X = AX + Fy,$$
  $$\lambda y = y.$$

  Собственные числа новой системы уравнений есть все собственные числа матрицы A и единица. После такого преобразования в цепи Маркова, использованной для нахождения решения исходной системы, появляется неоднородность:

  $$P = y + p\mathcal{P}$$

  . Здесь p – начальное распределение, $\mathcal{P}$ – матрица переходных вероятностей, $P = p\mathcal{P}$ – исходная цепь Маркова, y – поглощающее состояние. Таким образом, система линейных алгебраических уравнений может быть решена аналогом метода Метрополиса, с использованием случайного поиска экстремума: минимизируется сумма квадратов невязок системы.
- Сравнение трудоемкостей метода квази Монте-Карло и метода квази Монте-Карло, примененного совместно с методом верхней релаксации.
- "Применение модифицированных методов Монте-Карло и квази Монте-Карло совместно со стохастическим аналогом многосеточного метода для решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. То есть первое приближение решения системы линейных алгебраических уравнений рассматривается грубо на крупной сетке. Потом сетка измельчается, получаем второе приближение. И так далее.

Список литературы

[1] *Ермаков С.М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы //Изд 2-е, М., Наука, 472с, 1975.

[2] *Ermakov S.M., Danilov D.L.* On the comparative complexity of the Monte-Carlo method for solving systems of linear equations// Comput. Math. Mat. Phys., є5, pp.35-40, 1995.

[3] *Ермаков С.М., Данилов Д.Л.* Асимптотическая сложность оценки по столкновениям для решения линейных систем// Журнал Вычислительной Математики и Мат. Физики, є5, т.37, стр.515-523, 1997.

[4] *Вагнер В., Ермаков С.М.* Monte-carlo difference schemes for the wave equations // Monte-Carlo Methods and Appl., Vol.18, pp.1-19, 2002.

[5] *Вагнер В., Ермаков С.М.* Стохастическая устойчивость и параллелизм метода Монте-Карло // ДАН. 2001, 179 є4., стр.438-441, 2001.

[6] *Д.Кнут, Э.Яо* Сложность моделирования неравномерных распределений // Кибернетический сборник, Новая серия, вып. 19, М., Мир, 1983, стр.97-158

[7] *Danilov D.L., Ermakov S.M., Halton J.H.* Asymptotic complexity of Monte Carlo methods for solving linear systems. //J.Statistical Planning and Inference, 2000, p.p. 5-18.

[8] *Ермаков С.М.* Дополнение к одной работе по методу Монте-Карло, Ж.Выч. Математики и Мат. Физики, 2001, т.41, н.6.

[9] *Адамов А.В., Ермаков С.М.* О стохастической устойчивости метода Монте-Карло(случай операторов)// Вестник С-Петербургского университета, сер.1, вып.2, стр.3-7, 2004.

[10] *Ermakov S.M.* Neumann-Ulam scheme and particle methods // IV-th IMACS Seminar on Monte-Carlo Methods: Abstracts(SEptember 15-19, 2003, Berlin), Berlin, WIAS, p.55,2003.

[11] *Forsith G.E. Leibler R.Z.* Matrix inversion by a Monte-Carlo methods // Math tables and other aids to computation,4, 1950, pp.127-120.

[12] *Maskagni M, Karavainova A.* A Parallel QMC Method for Solving of Linear Equations// Amsterdam, Lecture Notes in Computer Science, vol.2330, pp.598-608, 2008.

[13] *Maskagni M, Karavainova A.* Matrix Computation Using Quasirandom Sequences// Amsterdam, Lecture Notes in Computer Science, Springer, vol.1988, pp.552-559, 2001.

[14] *Maskagni M, Yaohang Li.* Grid Based Quasi-Monte-Carlo Applications// Monte-Carlo Methods and Appl., Vol.11, pp.39-55, 2005.

[15] *Dimov I., Aleksandrov V., Karaivanova* Resolvent Monte-Carlo Methods for Linear Algebra Problems// Mathematics and Computers in Simulation, Vol.55, pp.25-36, 2001.

[16] *Sabelfeld K, Shalimova I.* Random walk on spheres methods for iterative solution of elastisity problems// Monte-Carlo Methods and Appl., Vol.8, pp.171-202, 2002.

[17] *Сабельфельд К.К.* Методы Монте-Карло в краевых задачах// Новосибирск, "Наука 280с., 1989 The Jons Hopkins Univ. Press,Baltimore, 1996

[18] *Sabelfeld K, Shalimova I., Levikin A.* Random walk on fixed spheres methods for Laplace and Lame equations// Monte-Carlo Methods and Appl., Vol.12, pp.55-93, 2006.

[19] *Ермаков С.М.,Рукавишникова А.И.* Квази Монте-Карло алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений// Мат. модели. Теория и приложения под ред. Чиркова 2005. Выпуск 6, стр.3-27.

[20] *Ermakov S.M., Rukavishnikova A.I.* Quasi Monte-Carlo Algorithms for Solving Linear Algebraic Equation// MC Methods and Applications. 2006. Vol.12, є5, pp.363-384.

[21] *Рукавишникова А.И.* Оптимизация алгоритма Квази Монте-Карло решения систем линейных алгебраических уравнений// Вестник С-Петербургского университета, сер.1, вып.1, стр.73-78, 2008.

[22] *Ермаков С.М., Тимофеев К.А., Рукавишникова А.И.* О некоторых стохастических и квазистохастических методах решения уравнений// Вестник С-Петербургского университета, сер.1, вып.4, стр.75-85, 2008.

[23] *Товстик Т.М.* Сравнение некоторых статистических свойств квазислучайных и псевдослучайных последовательностей// Вестник С-Петербургского университета, сер.1, вып.2, стр.62-70, 2006.

[24] *G.H.Golub, C.F. Van Loon* Matrix Computations// The Jons Hopkins Univ. Press, Baltimore, 1996.

[25] *Соболь И.М.* Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара// М., Наука, 288с., 1969

[26] *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло// М., Наука, 1973.

[27] *J.H. Halton* Sequential Monte-Carlo Techniques for the Solution of Linear Systems // SIAM Journal of Scientific Computing, Vol.9,pp213-257,1994

[28] *Halton J.H.* On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multidimensional integrals// Numer. Math., vol.2, pp.84-90, 1960

[29] *Halton J.H.* Quasi-probability // Monte-Carlo Methods and Appl., vol.11, є3, pp.203-350.

[30] *Михайлов Г.А. Войтишек А.В.* Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло // М., Академия, 367с, 2006.

[31] *Ripley B.D.* Stochastic Simulation // Wiley, New-York,1987

[32] *Ермаков С.М. Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование // М., Наука, 2-е изд., доп., 1982.

[33] *Hammersley T.M. Handscomb D.C.* Monte-Carlo methods // John Wiley and Sons, N.Y., London, Sydney, Methuen, 1964.

[34] *Niederreiter H.* Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods // SIAM, Phil., Pensilvania, 1992.

[35] *Темам Р.* Уравнения Навье-Стокса // М., Мир, 1981.

[36] *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики // М., Наука, 456с., 1977.

[37] G.H.Golub, C.F. Van Loon Matrix Computations// The Jons Hopkins Univ. Press,Baltimore, 1996