УДК 519.642

В. М. Білецький (Львівський нац. ун-т ім. І. Франка)

ПОРІВНЯННЯ МЕТОДУ УЗАГАЛЬНЕНОГО РОЗДІЛЕННЯ ЗМІННИХ ТА МЕТОДУ КВАДРАТУР ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ БАГАТОВИМІРНИХ ІНТЕГРАЛЬНИХ РІВНЯНЬ

In this paper, we compare an iterative method of generalized separation of variables and a quadrature method for solving multidimensional integral equations. The computational complexity of methods algorithms and numerical results for multidimensional integral Fredholm equations of the second kind are given.

У роботі подано порівняння ітераційного методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур для розв'язування багатовимірних інтегральних рівнянь. Розглянуто обчислювальну складність алгоритмів, що реалізують дані методи. Наведено числові результати для багатовимірних інтегральних рівнянь Фредгольма другого роду.

Вступ. Розділення змінних дозволяє зменшити розмірність та досягнути компактності представлення розв'язку багатовимірної задачі. Ідею наближеного розділення змінних використовують для апроксимації операторів, функцій багатьох змінних та багатовимірних тензорів, а також при розв'язувані багатовимірних інтегральних рівнянь та крайових задач.

Ідея методу узагальненого розділення змінних [1, 2] полягає в представленні розв'язку багатовимірної задачі у вигляді суми доданків з розділеними змінними, які обчислюють послідовно з умови мінімуму відповідних функціоналів. У результаті вихідну задачу зводять до послідовності одновимірних задач. У [3] розвинуто метод узагальненого розділення змінних та запропоновано його модифікацію, що мінімізує на кожному кроці норму відхилення наближеного та точного розв'язків.

Схема методу для двовимірних інтергальних рівнянь подана у роботі [4]. У [5] доведено збіжність ітераційного процесу методу узагальненого розділення змінних для загального випадку лінійного операторного рівняння. Збіжність модифікації методу показана у [6].

У цій статті описано алгоритм методу узагальненого розділення змінних та наведено його порівняння з методом квадратур, який широко застосовують на практиці для розв'язування інтегральних рівнянь.

1. Метод узагальненого розділення змінних. Метод узагальненого розділення змінних запропоновано у [1, 2] для розв'язання багатовимірних інтегральних і матричних рівнянь та їх варіаційних аналогів. Метод дозволяє зменшити розмірність багатовимірної задачі, а також досягнути компактності представлення розв'язку. Опишемо алгоритм методу на прикладі d-вимірного інтегрального рівняння Фредгольма другого роду

$$Au \equiv \int\limits_D K(x, y)\, u(y)\, dy - \lambda u(x) = f(x)\,, \tag{1}$$

де $x = (x_1, \ldots, x_d)$, $y = (y_1, \ldots, y_d)$, $u, f \in \mathcal{L}_2(D)$, $K \in \mathcal{L}_2(D \times D)$, $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \neq 0$ та D обмежена прямокутна область у $\mathbb{R}^d$

$$D = [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_d, b_d].$$

Якщо λ не є власним значенням відповідного оператора Фредгольма

$$Fu \equiv \int\limits_D K(x,y)\,u(y)\,dy,$$

то згідно альтернативи Фредгольма [7] рівняння (1) має розв'язок для всіх $f(x)$.

Простір $\mathcal{L}_2(D)$ можна представити як тензорних добуток d просторів

$$\mathcal{L}_2(D) = \mathcal{L}_2([a_1,b_1]) \otimes \ldots \otimes \mathcal{L}_2([a_d,b_d]).$$

Ідея методу полягає у представленні розв'язку задачі (1) у вигляді суми доданків з розділеними змінними

$$u(x_1,\ldots,x_d) = \sum_{j=1}^{\infty}\prod_{l=1}^{d}\phi_l^{(j)}(x_l), \tag{2}$$

де $\phi_l^{(j)}(x_l) \in \mathcal{L}_2([a_l,b_l])$. k-им наближенням розв'язку рівняння вважають суму перших k доданків ряду (2)

$$u_k(x_1,\ldots,x_d) = \sum_{j=1}^{k}\prod_{l=1}^{d}\phi_l^{(j)}(x_l), \quad u_0 \equiv 0,$$

а $(k+1)$-ий доданок знаходять згідно умови мінімуму функціонала

$$J_{f_k}(\phi_1,\ldots,\phi_d) = \left\|f_k - A(\phi_1 \otimes \cdots \otimes \phi_d)\right\|^2 \to \min, \tag{3}$$

де $f_k = f - Au_k$. Доданки ряду (2) знаходять послідовно згідно (3), формуючи послідовність наближених розв'язків. Після k кроків методу ми розв'язуємо таке ж вихідне рівняння (1), проте з іншою правою частиною f_k. У [5] доведено збіжність послідовності наближених розв'язків $\{u_k\}$ до точно розв'язку рівняння (1).

Дамо формальне визначення *алгоритму методу узагальненого розділення змінних* таким чином:

Крок 1 Приймаємо $k = 0$ та $u_0 \equiv 0$ — початкове наближення розв'язку рівняння (1).

Крок 2 Збільшуємо k на одиницю та знаходимо k-ий доданок ряду (2) згідно умови (3).

Крок 3 Обчислюємо k-те наближення розв'язку рівняння (1).

Крок 4 Якщо виконується критерій зупинки алгоритму, то переходимо до кроку 5, інакше переходимо до кроку 2.

Крок 5 Приймаємо за наближений розв'язок рівняння (1) k-те наближення його розв'язку u_k та закінчуємо роботу алгоритму.

Як приклад критерію зупинки можна розглянути

$$\frac{\|f_k\|}{\|f\|} = \frac{\|f - Au_k\|}{\|f\|} < \epsilon \quad \text{або} \quad \frac{\|u_k - u_{k-1}\|}{\|u_{k-1}\|} < \epsilon,$$

де ϵ — параметр зупинки.

З необхідних умов мінімуму функціонала (3) отримаємо систему d одновимірних рівнянь Ейлера для функцій $\phi_l(x_l)$. Кожне з рівнянь такої системи є лінійним відносно однієї з функцій $\phi_l(x_l)$, а отже, його можна розглядати окремо як умову мінімуму функціонала (3) за цією функцією при фіксованих інших співмножниках. Таким чином циклічно-послідовне розв'язування рівнянь системи відносно $\phi_l(x_l)$, $j = 1, \ldots, d$ еквівалентне покомпонентній мінімізації функціонала (3). Такий спосіб мінімізації функціонала називають методом послідовних найменших квадратів, що також відомий як ALS метод (Alternating Least Squares), який є найпопулярнішим серед лінійних методів розв'язування подібних задач. Для мінімізації (3) можна також використати нелінійні підходи, наприклад, PMF3 метод [8] чи dGN метод (damped Gauss-Newton) [9].

2. Метод квадратур. Зведення задачі розв'язування інтегрального рівняння до системи лінійних алгебричних рівнянь, яку отримують шляхом заміни інтегралів скінченими сумами, є одним з найпопулярніших методів. Метод квадратур є апроксимаційним методом. Його широко застосовують на практиці, оскільки він є достатньо простим та застосовним як до лінійних та і до нелінійних інтегральних рівнянь.

Основна ідея методу полягає у заміні інтеграла деякою квадратурною формулою

$$\int\limits_D f(x)\,dx \approx \sum_{j=1}^{n} \alpha_j f(x_j),$$

де $\alpha_j \in \mathbb{C}$, $x_j \in D$, $j = 1, \ldots, n$. Тут $\{x_j\}$ — вузли квадратурної формули, а $\{\alpha_j\}$ — коефіцієнти, що не залежать від функції f. Для кратних інтегралів можна використати кубатурні формули [10], або повторно застосовувати квадратурні формули для одновимірних інтегралів. Існує багато квадратурних формул [11], що застосовують на практиці. Наприклад, можна використати формули прямокутників, трапецій, парабол, Сімпсона, трьох восьмих та ін.

Після застосування до інтегрального рівняння Фредгольма другого роду (1) квадратурної формули отримаємо

$$\lambda u(x) \approx \sum_{j=1}^{n} \alpha_j K(x, x_j)\, u(x_j) - f(x).$$

Прийнявши за наближення розв'язку рівняння функцію

$$\widehat{u}(x) = \frac{1}{\lambda}\left(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j K(x, x_j)\, \widehat{u}(x_j) - f(x)\right),$$
$$\widehat{u}(x_j) = u(x_j), \quad j = 1, \ldots, n,$$

та послідовно підставивши $x = x_j$, $j = 1, \ldots, n$, отримаємо систему n лінійних алгебричних рівнянь з n невідомими для знаходження значень наближеного розв'язку у вузлах квадратурної формули $\{\widehat{u}(x_j)\}$

$$\widehat{A}\widehat{X} = \widehat{B}. \tag{4}$$

Тут $\widehat{X}$ — вектор невідомих системи

$$\widehat{X}_j = \widehat{u}(x_j),$$

$\widehat{B}$ — вектор правої частини системи, що містить значення функції f у вузлах квадратурної формули

$$\widehat{B}_j = f(x_j),$$

$\widehat{A}$ — матриця розміру $n \times n$, елементи якої обчислюються згідно формули

$$\widehat{A}_{jk} = \delta_{jk} - \frac{1}{\lambda}\left(\alpha_k K(x_j, x_k)\right),$$

де δ_{jk} — символ Кронекера.

За наближений розв'язок інтегрального рівняння приймають функцію $\widehat{u}$, яку знаходять шляхом інтерполяції по її значеннях у вузлах квадратурної формули $\{x_j\}$.

3. Порівняння методів. Проведемо порівняння обчислювальних складностей та компактності представлення наближеного розв'язку для методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур. У подальших міркуваннях, що стосуються обчислювальної складності методів, елементарними операціями вважатимемо обчислення значення функції у деякій точці та елементарні арифметичні операції.

На практиці для використання алгоритму методу узагальненого розділення змінних рівняння (1) необхідно дискретизувати. Нехай внаслідок дискретизації задачі нескінченновимірний простір $\mathcal{L}_2([a_j, b_j])$, $j = 1, \ldots d$ ми замінили n_j-вимірним простором H_j. Тоді простір $\mathcal{L}_2(D)$ можна наблизити n-вимірним простором $H = H_1 \otimes \ldots \otimes H_d$, де

$$n = \prod_{j=1}^{d} n_j.$$

Чисельне представлення елемента простору H вимагає збереження інформації розміру

$$\mathcal{O}\left(\prod_{j=1}^{d} n_j\right). \tag{5}$$

Поряд з цим для представлення одного доданку наближеного розв'язку методу узагальненого розділення змінних достатнім є збереження інформації розміру

$$\mathcal{O}\left(\sum_{j=1}^{d} n_j\right). \tag{6}$$

Легко бачити, що з одночасним збільшенням розмірностей всіх просторів H_j, $j = 1, \ldots, d$ величина (5) зростає експоненціально, а величина (6) — лінійно.

Отже, за умови відносно невеликої кількості доданків наближеного розв'язку, метод узагальненого розділення змінних дає компактне представлення наближеного розв'язку рівняння (1) та дозволяє суттєво зменшити затрати обчислювальних ресурсів.

На відміну від методу квадратур, метод узагальненого розділення змінних враховує те, що простір $\mathcal{L}_2(D)$ можна представити як тензорний добуток просторів $\mathcal{L}_2([a_j, b_j])$, $j = 1, \ldots, d$, і завдяки цьому є більш ефективним. Оцінимо обчислювальну складність методу узагальненого розділення змінних у випадку, якщо для знаходження доданків наближеного розв'язку використовують метод послідовних найменших квадратів.

На кожному кроці методу послідовних найменших квадратів для всіх $j = 1, \ldots, d$ задача мінімізації функціонала зводиться до системи n_j лінійних алгебричних рівнянь з n_j невідомими. Оскільки ми вважаємо обчислення значень ядра K та правої частини f у деяких точках елементарними операціями, то для побудови такої системи алгебричних рівнянь необхідно виконати $\mathcal{O}(n^2)$ операцій, а для її розв'язання, наприклад методом Гауса, — $\mathcal{O}\left(n_j^3\right)$ операцій. Отже, сумарна обчислювальна складність одного кроку методу послідовних найменших квадратів рівна

$$\mathcal{O}\left(dn^2 + \sum_{j=1}^{d} n_j^3\right).$$

Розглянемо питання обчислювальної складності методу квадратур. Для побудови системи лінійних алгебричних рівнянь (4) знадобиться порядку $\mathcal{O}(n^2)$ операції, а для її розв'язання — $\mathcal{O}(n^3)$ операцій. Для представлення наближеного розв'язку знадобиться $\mathcal{O}(n)$ пам'яті.

Порівняння методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур наведено у таблиці 1. Для методу узагальненого розділення змінних вказані обчислювальна складність одного кроку методу послідовних найменших квадратів та обсяг пам'яті, необхідний для збереження одного доданку наближеного розв'язку. Нагадаємо, що $n = \prod_{j=1}^{d} n_j$.

Таблиця 1.

Порівняння обчислювальної складності та компактності представлення наближених розв'язків

	Обчислювальна складність	Компактність представлення наближеного розв'язку
Метод квадратур	$\mathcal{O}\left(n^3\right)$	$\mathcal{O}(n)$
Метод узагальненого розділення змінних	$\mathcal{O}\left(dn^2 + \sum_{j=1}^{d} n_j^3\right)$	$\mathcal{O}\left(\sum_{j=1}^{d} n_j\right)$

При $d > 1$ та за умови відносно невеликої кількості кроків алгоритму методу узагальненого розділення змінних, він є значно ефективнішим ніж метод квадратур як у плані швидкодії так і у плані компактності представлення розв'язку. Причому різниця стає більш відчутною із зростанням параметра d.

4. Числові результати. Для проведення практичних дослідів створено комплекс комп'ютерних програм, що реалізують алгоритми методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур. Для емпіричної оцінки ефективності методу узагальненого розділення змінних проведено ряд числових експериментів. Тут наведено числові результати деяких з них. Всі експерименти проведено на обчислювальній машині з процесором Intel Core i3 (тактова частота 2.5GHz) та оперативною пам'яттю об'ємом 4GB.

Оскільки при заданій точності наближеного розв'язку важко оцінити кількість ітерацій методу узагальненого розділення змінних, то порівняння методів зручно проводити шляхом оцінки часу виконання програм, що реалізують алгоритми цих методів.

За критерій зупинки методу узагальненого розділення змінних приймемо достатньо мале відносне значення нев'язки рівняння (1)

$$\frac{\|f - A\widehat{u}\|}{\|f\|} < \epsilon,$$

де $\widehat{u}$ — деяке наближення розв'язку рівняння.

Приклад 1.

$$\int\limits_0^1 \int\limits_0^1 \cos\left(\widehat{x}\widehat{y} + x^2 - y^2\right) u(\widehat{x}, \widehat{y}) d\widehat{x} d\widehat{y} - 4u(x, y) = \sin\left(x^2 + y^2\right). \tag{7}$$

Це рівняння є двовимірним інтегральним рівнянням Фредгольма другого роду. У таблиці 2 наведено порівняння часу виконання алгоритмів методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур при заданій точності $\epsilon = 10^{-7}$ *та різних розмірностях дискретизованої задачі.*

Таблиця 2.

Порівняння часу виконання реалізацій алгоритмів методів для задачі (7)

n	n_1	n_2	Метод квадратур	Метод узагальненого розділення змінних
900	30	30	4,12 сек.	1,98 сек.
2500	50	50	85,03 сек.	13,68 сек.
4500	60	75	489,81 сек.	44,47 сек.
9801	99	99	5109,12 сек.	197,54 сек.

Приклад 2.

$$\int\limits_1^{\pi/2} \int\limits_1^{\pi/2} \int\limits_1^{\pi/2} \ln\left(1 + x\widehat{x} + y\widehat{y} + z\widehat{z}\right) u\left(\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z}\right) d\widehat{x} d\widehat{y} d\widehat{z} + 7u(x, y, z) =$$

$$= \cos\left(x + y\right) \sin\left(y + z\right). \tag{8}$$

У цьому прикладі ми маємо тривимірне інтегральне рівняння Фредгольма другого роду. У таблиці 3 наведено порівняння часу виконання алгоритмів методу узагальненого розділення змінних та методу квадратур при заданій точності $\epsilon = 10^{-5}$ *та різних розмірностях дискретизованої задачі.*

Таблиця 3.

Порівняння часу виконання реалізацій алгоритмів методів для задачі (8)

n	n_1	n_2	n_3	Метод квадратур	Метод узагальненого розділення змінних
1000	10	10	10	7,33 сек.	6,59 сек.
3240	15	12	18	235,87 сек.	67,42 сек.
8000	20	20	20	3502,18 сек.	404,74 сек.

Легко бачити, що зі зростанням розмірності дискретизованої задачі час роботи методу квадратур зростає швидше ніж час роботи методу узагальненого розділення змінних. Можна помітити кубічну залежність часу виконання від розмірності дискретизованої задачі для методу квадратур та квадратичну — для методу узагальненого розділення змінних.

Числові результати свідчать про ефективність застосування методу узагальненого розділення змінних у порівнянні з методом квадратур при розв'язуванні багатовимірних інтегральних рівнянь Фредгольма другого роду.

1. *Баляш Ю. Г., Войтович Н. Н.* Приближенное вариационно-итерационное разделение переменных в многомерных задачах // Волны и дифракция-85: IX Всесоюзный симпозиум по дифракции и распространению волн.– 1985.– С. 122-124.
2. Баляш Ю. Г., Войтович Н. Н. Вариационно-итерационный метод решения многомерных интегральных уравнений // Интегральные уравнения в прикладном моделировании: Тез. докл. XX республ. конф. - Киев: Ин-т электродинамики АН УССР, 1986.– Ч. 2.– С. 23.
3. *Войтович М. М., Ярошко С. А.* Варіаційно-ітераційний метод узагальненого розділення змінних для розв'язання багатовимірних інтегральних рівнянь // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 1997.– 40, № 4.– С. 122-126.
4. *Білецький В.* Ітераційний метод узагальненого розділення змінних для розв'язання двовимірних інтегральних рівнянь // Вісник Львівського національного університету імені Івана Франка. Серія прикладна математика та інформатика.– 2009.– 15 – С. 33-42.
5. *Biletskyy V.* An iterative method of generalized separation of variables for solving linear operator equations // Journal of Numerical and Applied Mathematics.– 2010.– 1(100)– P. 2-9.
6. *Білецький В.* Модифікація методу узагальненого відокремлення змінних для розв'язування багатовимірних інтегральних рівнянь // Мат. методи та фіз.-мех. поля.– 2010.– 53, № 4.– С. 44-50.
7. *Треногин В. А.* Функциональный анализ: Учебник.– М.: Физматгиз, 2002. – 488 с.
8. *Paatero P.* A weighted non-negative least squares algorithm for three-way PARAFAC factor analysis // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems.– 1997.– 2(38)– P. 223-242.
9. *Tomasi G., Bro R.* A comparison of algorithms for fitting the PARAFAC model // Computational Statistics & Data Analysis.– 2006.– 6(50)– P. 1700–1734.
10. *Соболев С. Л.* Введение в теорию кубатурных формул.– М.: Наука, 1974.– 810 с.
11. *Цегелик Г. Г.* Чисельні методи.– Львів: Вид. ЛНУ ім. І. Франка, 2004.– 408 с.

Одержано 19.10.2012