

УДК 517.957

М.Д. Бабич (Держ. ун-т фінансів та міжнародної торгівлі)

О.М. Гецько (Ужгородський нац. ун-т)

ОПТИМІЗАЦІЯ ОБЧИСЛЕНЬ ПРИ ГЛОБАЛЬНОМУ РОЗВ'ЯЗУВАННІ НЕЛІНІЙНИХ ЗАДАЧ

We consider the question of optimization of calculations in the implementation of the combined method of separation and iterative refinement of all solutions of nonlinear problems.

Розглядається питання оптимізації обчислень при реалізації комбінованого методу відокремлення та ітераційного уточнення всіх розв'язків нелінійних задач.

Вступ. Відомо, що дослідження складних природних процесів і явищ здійснюється за допомогою математичних моделей, які їх відображають і описують. Такими математичними моделями можуть бути нелінійні задачі глобальної оптимізації, нелінійні функціональні рівняння (диференціальні, інтегральні) та системи нелінійних скалярних рівнянь. Останні можуть бути також дискретними аналогами попередніх задач.

Характерною особливістю таких нелінійних задач є те, що в залежності від своєї структури та елементів, які їх породжують вони можуть мати єдиний розв'язок, скінченну або нескінченну множину розв'язків, або не мати їх взагалі. Розрізнення цих випадків, як і знаходження усіх розв'язків, є задачею надто складною. Оскільки, як правило, нелінійні задачі мають складну структуру, то безпосереднє застосування до їх глобального розв'язування відомих чисельних методів є проблематичним як з точки зору їх функціональної реалізації, так і з точки зору обчислення необхідних елементів, що забезпечують виконання достатніх умов теорем існування розв'язків, збіжності методів та оцінок відповідних похибок. У зв'язку з цим для розв'язування таких нелінійних задач застосовуються елементи загальної теорії наближених методів. Ця теорія передбачає побудову для вихідної (точної) задачі послідовність наближених задач, доведення відповідних теорем про зв'язок цих задач і збіжність методу переходу від точної задачі до послідовності наближених задач, та проведення апостеріорного аналізу отриманих (при фіксованому значенні параметру апроксимації) з допомогою реалізації чисельного методу на ЕОМ наближених розв'язків, що еквівалентно відокремленню всіх ізольованих розв'язків вихідної задачі.

Відомо, що процес наближеного розв'язування складних задач передбачає їх апроксимацію або дискретизацію, в результаті чого вихідна задача зводиться до більш простої, яка розв'язується відповідним чисельним методом із застосуванням комп'ютера. Цей процес викликає появу різного роду похибок, які впливають на загальну характеристику точності наближених розв'язків, а звідси і на обчислювальну складність та інформаційну ємність чисельного алгоритму, що забезпечує задану точність розв'язків.

Безпосереднє чисельне розв'язування нелінійних задач, що апріорі мають багато розв'язків в заданій обмеженій області, складається з двох етапів: відокремлення всіх ізольованих розв'язків і їх ітераційного уточнення. Оскільки

чисельні методи реалізації цих етапів є різними, то природно говорити про комбінований метод глобального розв'язування нелінійних задач та оптимізацію обчислень.

Слід відмітити, що оптимізація обчислень – поняття широке [1]. Складовими його є об'єкти, на яких оптимізація здійснюється, критерії, за якими вона реалізується, та методи і способи, за допомогою яких вона досягається. Об'єктами при оптимізації обчислень можуть бути класи задач, класи чисельних методів або обчислювальних алгоритмів та класи програм, що їх реалізують на ЕОМ. Критеріями оптимізації можуть служити такі характеристики: точність, швидкодія, тобто час реалізації алгоритму на ЕОМ, або його обчислювальна складність, необхідна пам'ять ЕОМ та інші, властиві різним обчислювальним алгоритмам. Способи і методи побудови оптимальних алгоритмів можуть бути теоретичними, на основі доведення відповідних теорем, та практичними в результаті тестування алгоритмів на множинах їх функціональних параметрів та вихідних даних задач.

У даній роботі досліджуються питання організації та оптимізації обчислень при застосуванні комбінованого методу до глобального наближеного розв'язування деяких класів нелінійних задач. Об'єктами дослідження будуть деякі класи нелінійних операторних і функціональних рівнянь та їх дискретні аналоги – системи нелінійних скалярних рівнянь (СНСР), а також деякі класи задач глобальної оптимізації, що зводяться до розв'язування відповідних їм СНСР. Предметом дослідження будуть оцінки точності та обчислювальної складності ϵ -алгоритму [2] відокремлення всіх розв'язків таких задач та деяких ітераційних методів їх уточнення, а також оптимізація обчислень при реалізації комбінованого методу в цілому.

Апріорна інформація і характеристики задач, чисельних методів та обчислювальних алгоритмів. Нехай задача $P(I)$ із деякого класу розв'язується обчислювальним алгоритмом (о.а.) $A(X)$ на комп'ютері $C(Y)$. Надалі I, X, Y будемо вважати скінченними множинами параметрів, які визначають відповідно P, A, C . Наприклад, елементами I можуть бути дані про точність початкових величин, константи, що обмежують характеристики задач, розмірність таблиць і т. п. Елементами X можуть бути: степінь апроксимаційного полінома, крок сітки дискретизації, число вузлів дискретного апроксимаційного оператора, значення оператора у вузлах сітки, число ітерацій, параметр, що характеризує швидкість збіжності та ін. Елементами множини Y є довжина мантиси у машинному поданні числа, довжина розрядної сітки, спосіб заокруглення, порядок та час виконання арифметичних операцій, об'єм пам'яті ЕОМ та ін.

Для визначення чисельного методу, що може розв'язувати дану задачу $P(I)$ взагалі, або найкраще за критерієм точності або обчислювальної складності (чи швидкості) необхідно мати відповідну апріорну інформацію про задачу, тобто про ті її елементи, які для функціонування використовує сам метод і які необхідні для теорем існування і збіжності, а також для одержання апріорних і апостеріорних оцінок похибок, на базі яких можна говорити про якість і ефективність методу. Така інформація міститься в самих характеристиках задач та їх оцінках. Наприклад, в задачі розв'язування нелінійного операторного рівняння $T(u) = 0$ необхідна інформація закладена в структурі і властивостях

оператора Tu , просторів (областей) його визначення і значень, а також в оцінках норм оператора Tu та його, принаймні двох похідних.

Характеристики чисельних методів (ч.м.) умовно можна розділити на функціональні, які відображають суть і працездатність методів і якісні, що за різними критеріями визначають їх ефективність. Наприклад, до функціональних характеристик ітераційних методів відносяться: область застосування, початкове наближення, кроковий параметр, значення і оцінки оператора та його принаймні двох похідних у точці або області, параметр, що визначає швидкість збіжності, критерій зупинки та ін.

До якісних характеристик відносяться: гарантована точність результату, що визначається значенням або оцінкою різних видів похибок, що супроводжують процес розв'язування задач, обчислювальна складність, яка визначається часом або числом операцій, затрачених для одержання розв'язку, та необхідна пам'ять ЕОМ. Сюди можна віднести ще збіжність методу, швидкість збіжності, область збіжності, стійкість до вихідних даних і результатів обчислень, оптимальність за даним критерієм і т.д.

Оскільки о.а. можна трактувати як конкретну реалізацію на ЕОМ відповідного чисельного методу, то все вище викладене про характеристики чисельних методів переноситься і на характеристики о.а. з врахуванням того, що вони стосуються вже елементів дискретної задачі і розглядаються у метриці апроксимуючого простору. Надалі будемо розглядати о.а. $A(X, Y)$, що здійснюють на ЕОМ $C(Y)$ розв'язування задач із класу $P(I)$, а за їх характеристики якості приймемо:

$E(I, X, Y)$ — точність розв'язування задачі, або міру повної похибки;

$T(I, X, Y)$ — загальний час розв'язання задачі або обчислювальна складність алгоритму розв'язання задачі;

$M(I, X, Y)$ — інформаційна ємність або необхідна пам'ять ЕОМ для розв'язання задачі.

Точність $E(I, X, Y)$ визначається мірою абсолютної повної похибки, складовими якої є абсолютні похибки: неусувної, методу і заокруглення. Використовується також термін абсолютної обчислювальної похибки, що об'єднує похибку апроксимації або дискретизації та похибки методу і заокруглення.

В залежності від класів досліджуваних задач розглядаються наступні оцінки похибок: апіорні й апостеріорні, мажорантні і асимптотичні, детерміновані і стохастичні. Вибір і прийнятність тих чи інших оцінок похибок та способів їх побудови при наближеному розв'язуванні задач залежить від типу, структури та достовірності апіорних даних про задачу та обчислювальний алгоритм її розв'язання, обмежень на величину похибки та обчислювальних ресурсів.

Обчислювальна складність $T(I, X, Y)$ характеризується часом або загальним числом машинних (комп'ютерних) операцій, необхідних для розв'язання задачі.

Інформаційна ємність $M(I, X, Y)$ виражається необхідним для розв'язання задачі об'ємом усіх видів пам'яті ЕОМ.

Постановка задачі глобальної оптимізації. Оптимізаційні задачі, що характеризують реальні природничі і технологічні процеси, часто вимагають знаходження глобального оптимуму (мінімуму, максимуму або обох разом). Особливо важливими є багатовимірні мноекстремальні задачі, що вимагають знаходже-

ння глобального оптимуму на деякій обмеженій замкненій множині.

Задача глобальної оптимізації записується так: знайти мінімальне значення φ_* і максимальне значення φ^* многоекстремальної скалярної функції $\varphi(\bar{u})$ на обмеженій замкненій множині $\bar{\Omega}_n \in E_n$, де E_n – n -вимірний евклідів простір, $\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in E_n$. Інакше кажучи, потрібно розв'язати задачу:

$$\begin{aligned} \varphi_* &= \min_{\bar{u} \in \bar{\Omega}_n} \varphi(u), \\ \varphi^* &= \max_{\bar{u} \in \bar{\Omega}_n} \varphi(u), \end{aligned} \quad (1)$$

де $\bar{\Omega} = \{\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) : a < u_i < b; i = \overline{1, n}; -\infty < a, b < \infty, d = b - a\}$ – n -вимірний куб.

Якщо в задачі (1) відносно функції $\varphi(\bar{u})$ нічого крім неперервності невідомо, тоді найбільш розповсюджений метод її розв'язання базується на нерівномірному покритті допустимої області. Другий напрям стосується оптимізації двічі неперервно диференційовної функції $\varphi(\bar{u})$. В цьому випадку задача (1) зводиться до задачі глобального розв'язування на $\bar{\Omega}_n$ системи нелінійних скалярних рівнянь (СНСР) виду:

$$\frac{\partial \varphi(\bar{u})}{\partial u_i} = 0, \quad (i = \overline{0, 1, \dots, n}), \quad (2)$$

що відображає необхідну умову екстремуму функції $\varphi(\bar{u})$.

Оскільки оптимальні розв'язки \bar{u}_* та \bar{u}^* можуть знаходитись або всередині куба або на його гранях, то для їх знаходження необхідно розв'язувати повну систему (2) та усі урізані системи виду (2) розмірності від 1 до $n-1$, що відповідає сукупності задач оптимізації функції $\varphi(\bar{u})$ на j -вимірних кубах ($1 \leq j \leq n$). **Про комбінований метод наближеного розв'язування нелінійних рівнянь.** Математичними моделями складних природничих процесів або явищ, часто є нелінійні функціональні рівняння (системи скалярних рівнянь, диференціальні та інтегральні рівняння), представлені у вигляді:

$$Tu := u - \bar{T}u = 0, \quad (3)$$

де T – нелінійний двічі диференційовний за Фреше оператор, що діє в одному і тому ж гільбертовому просторі H (зокрема і оператор T) або в різних просторах. Надалі будемо вважати, що СНСР (2) зведені до рівняння вигляду (3).

Характерною особливістю таких рівнянь є те, що в залежності від своєї структури та елементів, які їх породжують, вони можуть мати в заданій області єдиний розв'язок або багато ізольованих розв'язків, кожний із яких може характеризувати той чи інший стан змодельованого процесу.

Наближене розв'язування таких рівнянь з істотними нелінійностями та багатьма розв'язками передбачає відокремлення ізольованих розв'язків з наступним їх ітераційним уточненням. Відокремлення ізольованих розв'язків може бути реалізоване ϵ S-алгоритмом [2], а уточнення – деяким ітераційним методом, загальний вигляд якого можна представити у вигляді формули

$$\bar{u}^{k+1} = \bar{u}^k - \alpha_k g_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

в якій g_k відображає напрям руху ітераційного процесу, а α_k – послідовність дійсних чисел, що визначають величину кроку ітераційного процесу. Різним значенням g_k і α_k будуть відповідати різні ітераційні методи [3]. Зокрема, при

$$\alpha_k = \|Tu^k\|^2 / \|T'(u^k)Tu^k\|^2, \quad g_k = Tu^k$$

із (4) впливає метод найшвидшого спуску (МНС), при цьому

$$q(r) = \left(\frac{M^2}{m^2} + \frac{N\delta_0}{m^2} - 1 \right)^{1/2},$$

$$\varphi(r) = \frac{\delta_0}{m(1 - q(r))}.$$

Важливим при наближеному розв'язуванні нелінійних рівнянь є сама постановка задачі щодо критерію розв'язання. Тут можливі два випадки:

1. Знайти наближений розв'язок або ϵ -розв'язок рівняння (3) згідно з критерієм точності за нев'язкою, що характеризує стан змодельованого об'єкту або процесу при даному розв'язку.

2. Знайти наближений розв'язок або ϵ -розв'язок рівняння (3) за критерієм точності по аргументу, що характеризує близькість наближеного і відповідного йому точного розв'язків.

Слід відмітити, що зв'язок або співвідношення між похибками за нев'язкою і аргументом в різних задачах може бути різним. Наприклад, малій похибці за нев'язкою може відповідати значна похибка за аргументом і навпаки. Все це залежить від диференціальних властивостей оператора в деякому околі розв'язку рівняння.

Отже, нехай СНСР (2) або рівняння (3) в обмеженій області $Q \subset H$ має l ізолюваних розв'язків u_i^* ($i = \overline{1, l}$). Відокремлення цих розв'язків передбачає знаходження таких підобластей $Q_i \subset Q$, зокрема замкнених куль \bar{S} , кожна з яких буде містити єдиний розв'язок із області Q . Для цього необхідно знайти множини елементів $v_i \in Q$ і дійсних чисел $r_i \in R_i$ ($i = \overline{1, l}$), які назвемо відповідно центрами і радіусами замкнених куль $\bar{S}(v_i, r_i) = \{u \in R : \|u - v_i\| \leq r_i\}$, щоб на кожній із них виконувались деякі достатні умови існування єдиного розв'язку рівняння (3). За наявності таких пар (v_i, r_i) існування єдиного розв'язку рівняння (3) у кулі $\bar{S}(v_i, r_i)$ та збіжності ітераційного методу (4) визначається наступною узагальненою теоремою.

Теорема 1. *Нехай у кулі $\bar{S}(u^0, r)$, де u^0 – один з елементів v_i , а r – відповідне цьому значення r_i , виконуються умови:*

$$\|T(u^0)\| \leq \delta_0, \quad (5)$$

$$\|T'(u)\| \leq M(u^0, r), \quad \|T''(u)\| \leq N(u^0, r), \quad (6)$$

$$|(T'(u)h, h)| \geq m(u^0, r) \|h\| \text{ або } \|T'(u)h\| \geq m(u^0, r), \quad (7)$$

де δ_0 , $M(u^0, r)$, $N(u^0, r)$, $m(u^0, r)$ – константи, які забезпечують виконання умов:

$$q(r) = q(\delta_0, M(u^0, r), N(u^0, r), m(u^0, r)) < 1, \quad (8)$$

$$\varphi(r) = \varphi(\delta_0, M(u^0, r), N(u^0, r), m(u^0, r)) < 1, \quad (9)$$

Тоді рівняння (3) в кулі $\bar{S}(u^0, r)$ має єдиний розв'язок, до якого збігається послідовність \bar{u}^k , побудована згідно з (4) (за відповідного вибору g_k і α_k), причому швидкість збіжності та оцінка похибки хапактеризується нерівністю:

$$\Delta(u^k) = \|u^* - u^k\| \leq \varphi(\delta_0, M(u^0, r), N(u^0, r), m(u^0, r))[q(r)]^k. \quad (10)$$

При $k = 0$

$$\|u^* - u^0\| \leq \varphi(\delta_0, M(u^0, r), N(u^0, r), m(u^0, r)), \quad (11)$$

що характеризує близькість точного і відповідного йому наближеного розв'язку.

Для різних конкретних значень g_k і α_k аналоги цієї теореми наведені і доведені в [4-6]. Вони стосуються методів найшвидшого спуску, мінімальних нев'язок та мінімальних похибок. Зокрема, при $\alpha_k = \|Tu^k\|^2 / \|T'(u^k)Tu^k\|^2$, $g_k = Tu^k$ із (4) одержимо метод найшвидшого спуску.

Зазначимо, що безпосередня реалізація ітераційних методів (4), при розв'язуванні рівняння (3) можлива лише для простих за структурою операторів T . В загальному випадку процес наближеного розв'язування рівняння (3) полягає у побудові і наступному розв'язуванні послідовності нелінійних рівнянь більш простої структури:

$$T_n u := u - \bar{T}_n u = 0 \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (12)$$

що апроксимують у певному розумінні рівняння (3) і такі, що $T_n : Q \subset H \rightarrow H$ і є двічі неперервно диференційовними за Фреше.

Згідно із загальною теорією наближених методів правомірність переходу від рівняння (3) до послідовності рівнянь (12) базується на теоремі про розв'язність (при довільному або достатньо великому n) рівнянь (12) за даними існування розв'язків рівняння (3) і збіжності методу переходу до рівнянь (12). Вказані теореми, що базуються в даному випадку на теоремі 1, дають теоретичне обґрунтування і практичний апарат для вирішення питання щодо відокремлення ізольованих розв'язків рівняння (3).

Практичне розв'язування рівняння (12) може бути здійснене з допомогою методу (4) безпосередньо, якщо це дозволяє структура оператора T_n (n – фіксоване) і для наявних початкових наближень u^0 мають місце умови (5) - (9) теореми 1. У протилежному випадку задача розв'язування рівняння (12) зводиться до еквівалентної задачі розв'язування відповідної системи нелінійних скалярних рівнянь (СНСР), яка може бути розв'язана за допомогою ϵ -алгоритму [2]. В цьому випадку за різних фіксованих n можуть бути знайдені всі ізольовані наближені розв'язки $u_{in}^* = v_i$, що у подальших дослідженнях приймаються за центри куль $\bar{S}(v_i, r_i)$ і можуть правити за початкові наближення при уточненні розв'язків ітераційними методами (4).

У теоремах існування поряд із оцінками норм операторів T , T_n та їх двох похідних, істотну роль відіграє близькість операторів T , T' , T'' і T_n , T'_n , T''_n . Ця близькість визначається в кулі $\bar{S}(v, r)$, де виконуються достатні умови існування єдиного розв'язку, таким чином: кажуть, що на елементі $u \in \bar{S}(v, r)$ виконуються достатні умови апроксимації операторів $T^m(u)$ операторами $T_n^m(u)$, якщо існують такі функціонали $\eta_m(n, u) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, що виконуються нерівності:

$$\|T^m(u) - T_n^m(u)\| \leq \eta_j(n, u), \quad (13)$$

де $j = 0, 1, 2$, $T^0(u) = Tu$, $T^1(u) = T'(u)$, $T^2(u) = T''(u)$. Фактично функціонали $\eta_j(n, u)$ є складовими елементами похибок апроксимації та методу.

Конструктивний алгоритм визначення радіусів r_i заданий в оберненій теоремі. Він полягає в тому, що для кожного значення $v_i = u^0$ знаходяться величини δ_0 , $M(u^0, r)$, $N(u^0, r)$, $m(u^0, r)$, які виражаються через відповідні величини $M_n(u^0, r)$, $N_n(u^0, r)$, $m_n(u^0, r)$ обчислені для операторів T'_n , T''_n і функціонали $\eta_i(n, u^0)$. В цьому випадку величини $M(u^0, r)$, $N(u^0, r)$, $m(u^0, r)$ будуть функціями шуканого радіуса $r_i = r$. Підставивши їх у (8), (9) одержимо систему нелінійних нерівностей відносно радіуса r для кожного $v_i = u^0$. Інтервал сумісності цих нерівностей при кожному $v_i = u^0$ визначає область допустимих значень радіуса r замкнених куль єдиних розв'язків рівняння (3).

Виходячи із наведеного вище, можна визначити (при фіксованому значенні параметра n) такі обчислювальні схеми відокремлення і уточнення усіх ізольованих розв'язків:

1. Апроксимаційна схема. Вона здійснює перехід від рівняння (3) до послідовності рівнянь (12) і еквівалентних їм СНСР з наступним застосуванням до них ϵ -алгоритму відокремлення всіх ізольованих розв'язків.

2. Ітераційна схема. Реалізує застосування ітераційних методів виду (4) для уточнення відокремлених розв'язків рівнянь (3) або (12) при наявності відповідних початкових наближень, що забезпечують збіжність методів.

3. Комбінована схема. Вона полягає у початковому застосуванні апроксимаційної схеми і ϵ -алгоритму до моменту відокремлення усіх ізольованих розв'язків і виконання достатніх умов теорем існування та збіжності з подальшим застосуванням ітераційних методів.

При реалізації наведених схем обчислень можливі такі варіанти щодо отримання розв'язку рівняння (12) за критерієм точності:

1. ϵ -розв'язок за нев'язкою при якомусь фіксованому n забезпечує апроксимаційна схема і ϵ -алгоритм до моменту можливого застосування ітераційного методу.

2. ϵ -розв'язок за нев'язкою апроксимаційна схема і ϵ -алгоритм при якомусь фіксованому n не забезпечують до моменту можливого застосування ітераційного методу. В цьому випадку потрібна точність за нев'язкою досягається за допомогою ітераційного методу або подальшого збільшення n і застосування ϵ -алгоритму.

3. ϵ -розв'язок за аргументом при певному фіксованому n забезпечує апроксимаційна схема і ϵ -алгоритм. Це означає, що на момент можливого застосування ітераційного методу ϵ -розв'язок за аргументом досягнуто.

4. ϵ -розв'язок за аргументом (до можливого застосування ітераційного методу) апроксимаційна схема і ϵ -алгоритм не забезпечують. В цьому випадку потрібна точність розв'язку за аргументом досягається або шляхом ітераційного уточнення, або збільшенням n і застосуванням ϵ -алгоритму.

Слід зазначити, що в наведених схемах оцінки похибок виражаються через характеристики задач, алгоритмів та деякі скалярні функції, що суттєво залежать від структури нелінійних рівнянь, розмірності простору, в якому розв'язується задача, параметру апроксимації, довжини розрядної сітки і т.д.

Похибку наближеного розв'язку, отриманого в результаті реалізації ϵ -алгоритму, можна вважати як таку, що виникла за рахунок неточності вихідних

даних і віднести її до неусувної. За її оцінку можна прийняти (11). Похибку методу ітераційного уточнення характеризує оцінка (10).

Щоб оцінити похибку заокруглення наближеного розв'язку рівняння (3) позначимо через $Q_1(n, \tau, c_1)$, $Q_2(n, \tau, c_2)$, $Q_3(n, \tau, c_3)$, $Q_4(n, \tau, c_4)$ скалярні функції, що визначають число всіх використаних арифметичних операцій при обчисленні величин Tu^k , $T'(u^k)Tu^k$, $\alpha_k = \|Tu^k\|^2 / (T'(u^k)T(u^k), Tu^k)$ та реалізації одного кроку ітераційного процесу (4). Параметр n може характеризувати розмірність простору або число вузлів сітки дискретизації або довжину апроксимаційного відрізка. τ – довжина мантиси, c_1, c_2, c_3, c_4 – константи. Тоді на підставі методики [3] оцінка похибки заокруглення у методі (4) запишеться у вигляді

$$\|u_n^k - u_{n\tau}^k\| \leq \|u_n^k\| \bar{C}(q) \sum_{i=1}^4 Q_i(n, c_i) \cdot 1,06 \cdot 2^{-\tau}, \quad (\bar{C}(q) - const). \quad (14)$$

Склавши (13) при $i = 1$ і (14) при $k = 0$, одержимо оцінку обчислювальної похибки апроксимаційної схеми

$$\begin{aligned} \|u^* - u_{n\tau}^0\| &\leq \|u^* - u_n^0\| + \|u_n^0 - u_{n\tau}^0\| \leq \\ &\leq \frac{C\eta_1(n, \|u_n^0\|)}{m(1 - q(r))} [q(r)]^k + \|u_n^0\| \bar{C}(q) \sum_{i=1}^4 Q_i(n, c_i) \cdot 1,06 \cdot 2^{-\tau}. \end{aligned} \quad (15)$$

Аналогічно, склавши (10) при відповідних МНС значеннях α_k і g_k одержимо оцінку обчислювальної похибки ітераційної схеми МНС

$$\begin{aligned} \|u^* - u_{n\tau}^k\| &\leq \|u^* - u_n^k\| + \|u_n^k - u_{n\tau}^k\| \leq \\ &\leq \frac{\delta_0}{m(1 - q(r))} [q(r)]^k + \|u_n^0\| \bar{C}(q) \sum_{i=1}^4 Q_i(n, c_i) \cdot 1,06 \cdot 2^{-\tau}. \end{aligned} \quad (16)$$

На основі нерівностей (15) і (16) компіляцією можна одержати оцінку обчислювальної похибки для комбінованої схеми. Маючи оцінки (15), (16) можна порушувати питання про можливість побудови й обчислення ϵ -розв'язків рівняння (3).

Оптимізація оцінок точності. Одну із характеристик якості наближеного розв'язування прикладних задач визначає оцінка повної похибки, складовими якої є оцінки похибок: неусувної, апроксимації, методу та заокруглення. Кожна із цих оцінок похибок має свої методи дослідження і в залежності від величин їх складових ці оцінки за величиною можуть мати різні значення, в тому числі і бути сильно завищеними. Цей факт суттєво залежить і від кваліфікації дослідника-математика. У зв'язку з цим актуальним стає питання оптимізації оцінок усіх видів похибок разом із повною.

Мінімізація неусувної похибки здійснюється за рахунок більш точного опису фізичної задачі та більш точного визначення параметрів математичної моделі, що описує досліджуваний процес або задачу та більш точно задання вихідних даних.

Оптимізація оцінки похибки апроксимації досягається за рахунок варіювання параметром апроксимації, що визначається довжиною відрізка апроксиманта або його степеня, величиною параметра дискретизації або числа вузлів її сітки.

Оптимізація оцінки похибки методу визначається за рахунок вибору початкового наближення при реалізації ітераційних методів, оцінок мажорант, що визначають параметр, який характеризує швидкість збіжності методу, та кількості ітерацій, що забезпечують задану точність результату.

Оптимізація оцінки похибки заокруглення здійснюється за рахунок її мінімізації на множині складових задачі, обчислювального алгоритму та параметрів ЕОМ. За даних різних умов, що накладаються на елементи цих складових, одержуються різні величини оцінки похибки заокруглення, з яких вибирається мінімальна.

Шляхом співставлення величин окремих оцінок похибок можна знайти інтервали, де вони будуть мінімальними. Межами інтервалів є числові величини, які визначаються різними співвідношеннями між характеристиками задачі, обчислювального алгоритму і ЕОМ.

Обчислювальна складність комбінованого методу. Специфіка наближеного розв'язування нелінійних рівнянь є такою, що відокремлення ізольованих розв'язків з допомогою ϵ -алгоритму передбачає покриття області $Q = \Omega_n$ послідовністю ϵ_k -сіток та відображення її оператором \bar{T} в послідовність γ_k -сіток, що належить $Q = \Omega_n$. Шляхом перевірки виконання певних умов, наведених в [2], формуються послідовності із елементів ϵ_k -сіток, що збігаються до різних розв'язків.

Уточнення відокремлених розв'язків передбачає виконання достатніх умов теорем існування єдиного розв'язку у кулі $\bar{S}(v, r)$ і збіжності відповідного ітераційного методу. Вибір та застосування того чи іншого ітераційного методу пов'язаний як з простотою схеми його реалізації так і з оцінкою його обчислювальної складності, яка істотно залежить від точності за нев'язкою або за аргументом шуканого розв'язку і характеризується обчислювальною складністю ітераційного оператора. Очевидно, що за однієї і тієї ж точності розв'язку обчислювальна складність різних ітераційних методів буде різною. У зв'язку з цим виникає питання вибору найкращого ітераційного методу за критерієм обчислювальної складності при одній і тій же точності або дослідження залежності обчислювальної складності різних ітераційних методів від характеристик задач, алгоритмів та точності результату (розв'язку). Але порівнювати різні ітераційні методи тільки за кількістю ітерацій, які забезпечують ту чи іншу однакову точність, некоректно, оскільки за кількістю арифметичних операцій ці ітераційні методи можуть бути різними. Тому, найкращим критерієм порівняння ітераційних методів можна вважати порівняння за кількістю операцій при даній точності, або співвідношення кількості ітерацій різних методів до простої ітерації. Але таке порівняння можна проводити тільки тоді, коли за однакових достатніх умов будуть працювати різні ітераційні методи разом з методом простої ітерації, що має найпростішу схему своєї реалізації.

Позначимо через $N(\epsilon, n(k))$ функцію, яка характеризує обчислювальну складність апроксимаційної схеми і ϵ -алгоритму, що забезпечують ϵ -розв'язок рів-

няння (3) за нев'язкою і аргументом. Очевидно, що задовольняє нерівності

$$N_1(\epsilon, n(k)) \leq N(\epsilon, n(k)) \leq N_k(\epsilon, n(k)), \quad (17)$$

де $N_1(\epsilon, n(k))$ – функція, що характеризує обчислювальну складність ϵs -алгоритму на 1-й сітці при заданому n . Інакше кажучи ϵ -розв'язок рівняння (3) за нев'язкою або аргументом отримано на елементах 1-ої сітки, частина яких покриває всі розв'язки (3). Функція $N_k(\epsilon, n(k))$ визначає сумарну обчислювальну складність ϵs -алгоритму знаходження усіх ізольованих розв'язків із врахуванням того факту, що кожний ϵ -розв'язок за нев'язкою може бути знайдений на своїй (відмінній від інших) сітці.

Очевидно, що в цьому випадку час реалізації ϵs -алгоритму буде максимальним. В інших випадках $N(\epsilon, n(k))$ буде задовольняти нерівності (17).

У випадку використання комбінованого методу ϵs -алгоритму і ітераційного методу уточнення функція $N(\epsilon, n(k), \mu)$, що характеризує обчислювальну складність, визначається двома складовими функціями $\bar{N}_1(\epsilon, n(k))$, $\bar{N}_2(\epsilon, n(k), \mu)$, перша з яких \bar{N}_1 визначає обчислювальну складність ϵs -алгоритму до моменту можливого застосування ітераційного методу, а друга \bar{N}_2 визначає обчислювальну складність ітераційного методу після виконання μ ітерацій. Таким чином

$$N(\epsilon, n(k), \mu) = \bar{N}_1(\epsilon, n(k)) + \bar{N}_2(\epsilon, n(k), \mu). \quad (18)$$

Із (18) випливає, що оптимальне значення $N(\epsilon, n(k), \mu)$ при заданій точності ϵ може бути досягнуто двома способами (схемами). В залежності від структури рівняння (3) і диференціальних властивостей оператора Tu це може бути при мінімальному значенні $\bar{N}_1(\epsilon, n(k))$, що відповідає апроксимаційній схемі, і комбінованій схемі при певному співвідношенні між параметрами k і μ .

З іншого боку, на підставі скалярних функцій $Q_i(n, c_i)$ можна визначити час реалізації кожної із вищенаведених схем, тобто оцінити обчислювальну складність кожної з них. Якщо позначити через t_c час виконання на ЕОМ деякої середньої операції, тоді час \bar{T} реалізації кожної із наведених схем для методу найшвидшого спуску (при деякому фіксованому значенні $n(\epsilon)$) виразиться формулами:

для апроксимаційного методу $T_a = Q_1(\bar{n}, \tau, c_1)t_c$;

для ітераційного методу $T_{it} = \mu \sum_{i=1}^4 Q_i(\bar{n}, \tau, c_i)t_c$;

для комбінованого методу $T_k = Q_1(\bar{n}, \tau, c_1)t_c + \mu \sum_{i=1}^4 Q_i(\bar{n}, \tau, c_i)t_c$.

Про оптимізацію обчислень. При чисельній реалізації комбінованого методу (ϵs -алгоритму і ітераційного методу) наближеного розв'язування нелінійних задач з багатьма розв'язками джерела оптимізації обчислень (при знаходженні ϵ -розв'язку за нев'язкою та аргументом за умов теореми 1) включають такі складові:

1. Оптимальний (щодо точності результату та швидкодії обчислювального алгоритму) вибір параметру дискретизації або апроксимації.

2. Своєчасний перехід від ϵs -алгоритму до ітераційного уточнення.

3. Реалізація оптимальних обчислень констант δ_0 , M , N , t теореми 1 і значення оптимальних значень δ_0 , M , N і t , при яких $q < 1$.

4. Оптимізація обчислень за рахунок групування констант M , N і t , що відповідають "симетричним" або близьким наближеним розв'язкам. Для таких

розв'язків значення M , N і m близькі і можна брати один набір значень M , N і m .

5. Розпаралелювання обчислень. Може здійснюватись розподілом між комп'ютерами підобластей $\Omega_{in} \in \Omega_n$ $i = \overline{1, l}$, при реалізації ϵs -алгоритму, а при реалізації ітераційного уточнення розподілом відокремлених наближених розв'язків, як початкових наближень ітераційних методів.

6. При нарощуванні " n " величини M , N і m міняються мало, тому умову $q < 1$ можна корегувати шляхом зменшення δ_0 .

1. Михалевич В.С., Сергиенко И.В., Задирака В.К., Бабич М.Д. К вопросу оптимизации вычислений. // Кибернетика. – 1994. – №2. – С. 65–94.
2. Бабич М.Д., Шевчук Л.Д. Об одном алгоритме приближенного решения систем нелинейных уравнений // Кибернетика. – 1982. – №2. – С. 74-79 .
3. Бабич М.Д., Бабич В.М. Про чисельне розв'язування нелінійних функціональних рівнянь з багатьма розв'язками. – Київ, 2002. – 36 с. – (Препр. / НАН України, Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова, 2002-6).
4. Красносельский М.А., Вайникко Г.М., Забрейко П.М. и др. Приближенное решение операторных уравнений. – М.: Наука, 1969. – 455 с.
5. Кивистик Л. О некоторых итерационных методах для решения операторных уравнений в пространстве Гильберта. // Изв. АН ЭССР. Серия физ.-мат и техн. наук, т. IX. №3, 1960, С. 229-240.
6. Фридман В.М. Итерационный процесс с минимальными ошибками для нелинейного операторного уравнения // Докл.АН СССР. – 1961, 139, №5. – С. 1063–1066.

Одержано 12.10.2008