Изучение приближения многочленами функций, возникающих при изучении динамики на метрических графах

Выполнил: Е. А. Соловьев, студент группы БПИ152
Научный руководитель: к.ф.-м.н. доцент
В. Л. Чернышев

Департамент программной инженерии ФКН НИУ ВШЭ,
Москва, 2017

Предмет исследования

Предметная область: динамические системы на графах, функции на графах.
Предмет исследования: полиномиальные приближения для функции числа точек на графе и функции числа точек в симплексе.

Цели работы

Цель исследования: экспериментальным путём убедиться в точности оценки функции числа точек на графе многочленами и разработать программный инструмент, позволяющий выписывать аппроксимирущие многочлены по заданному графу и его вершине.

Актуальность обусловлена интересом исследователей к динамике на графах.

Число точек в симплексе

Дано: положительный вектор весов $w = (w_1, w_2, \ldots, w_k)^T, w_i \in \mathbb{R}_+$, положительное число λ.
Найти: число $N_k(\lambda|w)$ натуральных решений неравенства $w_1 n_1 + w_2 n_2 + \ldots + w_k n_k \leq \lambda$

- $N_k(t|w) = N(t)$ – функция от t
- точные значения можно найти только перебором
- значение функции равно числу точек внутри некоторого многогранника (в k-мерном пространстве)

Приближения многочленами

- можно приближать число точек многочленами
- Spencer D. C. (1942) – полиномиальное приближение с точностью до $O(\log t)^k$, k – размерность пространства
- приближающие многочлены $R(t)$ выражаются через обобщённые многочлены Бернулли

Приближения многочленами

- асимптотика показывает точность оценки на $t \to +\infty$
- $|N(t) - R(t)| \leq 10^{10}(\log t)^4$ при $N(t) \approx 10^6$ – плохо
- стоит сравнить настоящие значения функции и значения, даваемые приближением

1. **проверка точности полиномиального приближения функции числа точек в симплексе (вспомогательная задача)**
   - разработка программы для подсчёта числа точек в симплексе

Число точек на графе

Дано: дерево с выделенной начальной вершиной (*корнем*), по графу начинают двигаться точки:

- сначала – точки из корня по всем инцидентным рёбрам
- прибывая в вершину, точка порождает новые по всем инцидентным рёбрам

Число точек на графе

Найти: число $N(t)$ точек на графе в момент времени t.

- $N(t)$ – функция от t
- точные значения можно найти только полным моделированием процесса с начального момента времени $t = 0$

Приближения многочленами

- можно приближать число точек многочленами
- А. А. Толченников и В. Л. Чернышев (2017) – полиномиальное приближение с точностью до $O(\log t)^{|E|-1}$ (статья публикуется)
- приближающие многочлены $R(t)$ выражаются через приближающие многочлены для числа точек в симплексах

Для дерева $\Gamma = (V, E)$:

$$N(t) = R(t) + O((\log t)^{|E|-1})$$

где

$$R(t) = R'(t) + R''(t)$$

Приближения многочленами

$$R'(t) = \sum_{E'} \sum_{I} (\rho(E, \mathrm{end}(I)) - \rho(E', \mathrm{end}(I))) \cdot$$
$$\mathrm{R}_{|E'|}\left(t + \textstyle\sum_{e_i \in I} t_i \middle| \{2t_i\}_{e_i \in E'}\right)$$

- первое суммирование – по всем подмножествам ребер $E' \subset E$, которые составляют поддерево Γ' в Γ, содержащее корень Γ
- второе – по всем подмножествам ребер $I \subset E'$, которые образуют путь (возможно, нулевой длины) в поддереве Γ'

Приближения многочленами

$$R''(t) = \sum_{E'} \sum_{l}$$

$$\mathrm{R}_{|E'|-1}\left(t + \sum\nolimits_{e_i \in l \setminus \mathrm{last}(l)} t_i - t_{\mathrm{last}(l)} \Big| \{2t_i\}_{e_i \in E' \setminus \mathrm{last}(l)}\right)$$

- первое суммирование – по всем подмножествам ребер $E' \subset E$, которые составляют поддерево Γ' в Γ, содержащее корень Γ
- второе – по всем непустым подмножествам ребер $l \subset E'$, которые образуют путь в поддереве Γ' и таким, что $\rho(E', \mathrm{end}(l)) > 1$

Приближения многочленами

- асимптотика показывает точность оценки на $t \to +\infty$
- стоит сравнить настоящие значения функции и значения, даваемые многочленами
- генерацию многочленов по заданному графу можно автоматизировать

2. **проверка точности полиномиального приближения функции числа точек на графе**
   - разработка программы, выписывающей по заданному графу полиномиальное приближение функции числа точек на нём
   - разработка программы для подсчёта числа точек на графе

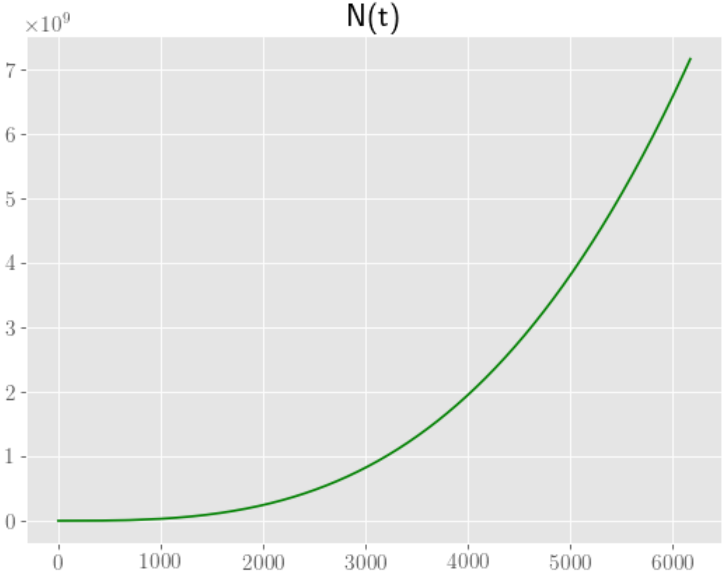
Алгоритмы решения задач

- число точек в симплексе: считаем перебором всех решений
- число точек на графе: моделируем с начального момента времени
  - храним все точки в очереди с приоритетом
  - извлекаем приходящие точки и добавляем новые
- генерация многочленов: ищем нужные подмножества рёбер, используем поиск в глубину

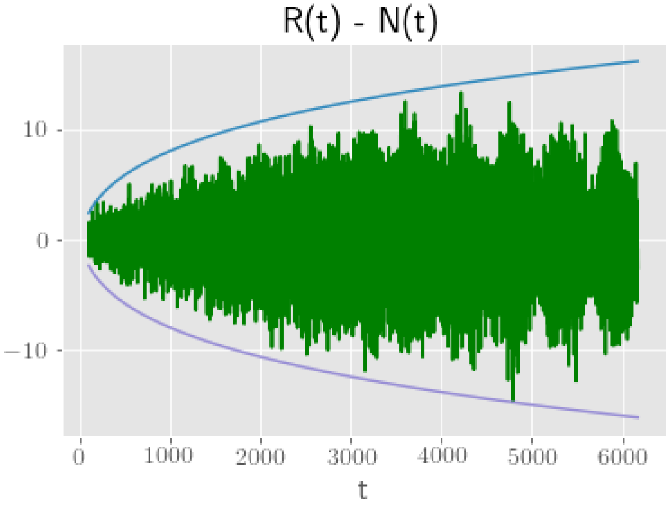
Используемые технологии

- C# – подсчёт числа точек на симплексе и графе
- Maple – генерация многочленов, приближающих число точек в симплексе
- MapleLib – взаимодействие Maple и C# для символьных вычислений для генерации многочленов, приближающих число точек на графе
- Python (NumPy, Pandas) – анализ результатов (построение графиков и подсчёт статистических показателей приближения)

Число точек в симплексе для $w = (\sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{5})^T$



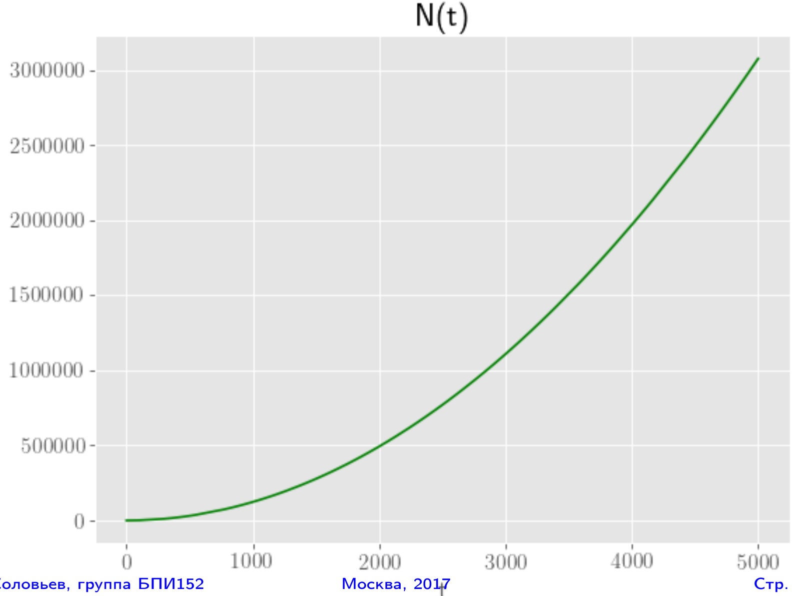
Разность $R(t) - N(t)$



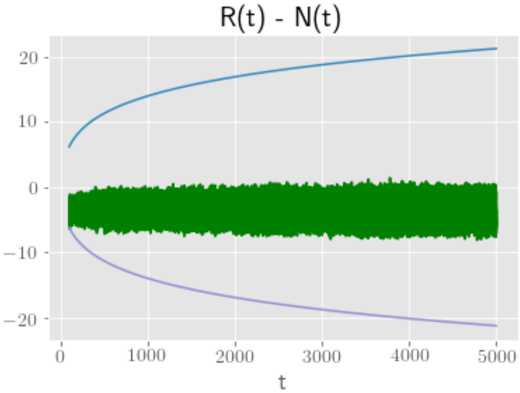
Качество приближения

- $|R(t) - N(t)| \leq 0.0243 \cdot \ln^3(t)$
- $\mathrm{MAE} = 3.005$ при $N \approx 10^9$ – хорошо
- $\sigma = 3.871$

Число точек на звёздном графе $K_{1,3}$



Ошибка приближения для $K_{1,3}$



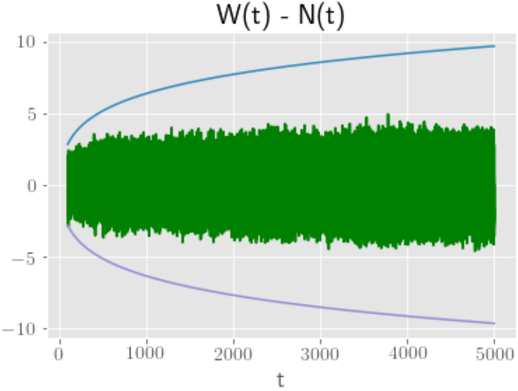
Качество приближения

- $|R(t) - N(t)| \leq 0.2933 \cdot \ln^2(t)$
- $\mathrm{MAE} = 3.5005$ при $N \approx 10^6$
- $\sigma = 3.6479$
- ошибка смещённая – можно попробовать уменьшить модуль
- свободный член не изменяет асимптотику $(\log t)^{|E|-1}$

Улучшение приближения

- $R_0(t)$ – приближающий многочлен с нулевым свободным членом
- $\mathbb{E}(R_0(t) - N(t))$ – оценка для свободного члена

Улучшенное приближение



Качество улучшенного приближения

- $|R(t) - N(t)| \leq 0.13346 \cdot \ln^2(t)$
- $\mathrm{MAE} = 0.8215$ (было 3.5005)
- $\sigma = 1.0267$ (было 3.6479)
- намного лучше
- оценивание величины $\mathbb{E}(R_0(t) - N(t))$ для произвольного графа без вычисления истинных значений – вопрос открытый

Преимущества написанной программы

- граф-цепочка из 5 рёбер с длинами $(\ln 2, \ln 7, \ln 13, \ln 17, \ln 41)$
- вычислить значения до $t = 300$ – уже достаточно долго
- таблица значений функции содержит 7,500,000+ записей и занимает 185 Mb
- требуется ~ 1 Gb оперативной памяти
- вычисление значений многочленов – практически мгновенно, генерация многочленов (в символьном и численном виде) – быстро

Выводы по работе

Научная новизна: проверка качества приближения многочленами функции числа точек на графе.

Практическая значимость: разработка программных инструментов для получения истинных значений рассматриваемых функций, а также их полиномиальные приближения.

Дальнейшие исследования: улучшение свободного члена, исследование второго члена асимптотики.

Список использованных источников

1. Spencer D. C., The Lattice Points of Tetrahedra, Journal of Mathematics and Physics, 21, 1942. doi: 10.1002/sapm1942211189
2. Borda B., Lattice points in algebraic cross-polytopes and simplices. Working papers by Series math-ph "arxiv.org"./2016/08. arXiv:1608.02417 [math.NT], 2016. 27 P.
3. Lehmer, D. H. The lattice points of an n–dimensional tetrahedron. *Duke Math. J.* 7, no. 1, 341–353. , 1940.
4. Barvinok A., Integer points in polyhedra. European Mathematical Society, 2008. 199 pages.

Список использованных источников

5. C5 generic collection library for C#/.NET [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://github.com/sestoft/C5, свободный. (дата обращения: 07.05.17)
6. ГОСТ 7.32-2001 Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления – М.: ИПК Издательство стандартов, 2001.
7. MaplePortal. [Электронный ресурс] Режим доступа: http://www.maplesoft.com/support/help/Maple/view.aspx?path=MaplePortal, свободный. (дата обращения: 07.05.17)
8. C# Reference. [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://docs.microsoft.com/en-us/dotnet/articles/csharp/language-reference/index, свободный. (дата обращения: 07.05.17)

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Спасибо за внимание!